

شبیه سازی سانتریفیوژ گازی با روش DSMC

احمد ذوالفقاری*، عبدالحمید مینوچهر، علی نوروزی، پیمان ماکارچی

۱ و ۲ و ۳- دانشگاه شهید بهشتی، دانشکده مهندسی هسته ای

چکیده:

یکی از روشهای متداول در مکانیک سیالات برای مدلسازی جریان گازهای رقیق استفاده از روش DSMC¹ می باشد. در این متد که در سالهای اخیر با توجه به توسعه سرعت محاسبات رایانه ای و کاهش هزینه های آن مورد توجه ویژه ای قرار گرفته، جریان غیر خطی گازها در مقیاس مولکولی مورد آنالیز قرار می گیرد. نتایج به کارگیری مدل‌های مولکولی در روش DSMC نشان داده که این روش در مقابل روشهای متداول کلاسیک سابق بسیار ارزشمند می باشد. از جمله موارد بکارگیری این روش در موضوعات مربوط به حرکت فضاپیماها، موج شوک و سانتریفیوژهای گازی و ... است. در این مقاله جداسازی مخلوط دو گاز آرگون و هلیوم که در داخل یک استوانه با سرعت بالا در حال چرخش می باشد مورد ارزیابی قرار گرفته است.

کلید واژه: DSMC - سانتریفیوژ گازی - گاز رقیق - معادله بولتزمن - برخورد مولکولی

۱. مقدمه

۱-۱- مقایسه مدل‌های میکروسکوپی و ماکروسکوپی

جریان گاز هم به شکل میکروسکوپی و هم به شکل ماکروسکوپی مدل سازی می شود. مدل ماکروسکوپی، به گاز به صورت یک محیط پیوسته نگاه می کند و متغیرهایی مانند سرعت، چگالی، فشار و دما دارد. مدل میکروسکوپی یا مولکولی، ذرات گاز را به صورت مولکولهای مجزا در نظر می گیرد و برای هر ذره یک موقعیت و سرعت در زمانی خاص قرار می دهد. کمیت‌های اصلی مدل مولکولی، تعداد مولکولها در واحد حجم، جرم، اندازه و سرعت مولکول می باشند. تعداد مولکولها در واحد حجم، چگالی عددی نامیده می شود که بستگی به دما و فشار گاز دارد و مستقل از ترکیب شیمیایی آن است. مدل ریاضی گاز ناپیوسته معادله بولتزمن است. اگر فاصله ذرات یا مولکولها به اندازه فاصله متوسط طی شده بین برخوردهای مولکولی یا متوسط پوشش آزاد (m.f.p)² باشد، دیگر معادلات ناویر استوکس گاز پیوسته اعتبار خود را از دست می دهند.

¹ Direct Simulation Monte Carlo

² mean free path

درجه رقیق شدن گاز با عددی به نام نادسن Kn^3 مشخص می شود. [1]

$$Kn = \frac{m \cdot f \cdot p}{L} \quad (1)$$

۱-۲- مدل مولکولی

اگر مولکولها به شکل دو کره صلب الاستیک با قطر d باشند، یک مدل ساده برای برخورد مولکولی خواهیم داشت. دو مولکول زمانی برخورد می کنند که فاصله مراکز بین آنها به d برسد. در این صورت سطح مقطع برخورد کلی این مولکولها $\sigma_T = \pi d^2$ است. متوسط زمان برخورد، مدت زمان متوسط بین برخوردهای مولکولی است که معمولاً به جای آن از نرخ برخورد یا فرکانس برخورد هر مولکول استفاده می شود. برای گازی شامل دو مولکول p و q و قطر مؤثر d_p و d_q سطح مقطع کل برخورد برابر متوسط سطح مقاطع است. دو نوع مدل برخورد به شرح زیر است:

۱- مدل VHS^4 : در این مدل قانون پراکندگی پس از برخورد در سیستم مرکز جرم ایزوتروپیک و مانند مدل برخورد دو مولکول سخت است و می توان از مکانیک برخوردها استفاده کرد ولی سطح مقطع مولکولها در این روش متغیر است. بنابراین این مدل تلفیقی از مدل HS با سطح مقاطع متغیر می باشد. [4,6]

$$V'_i = V_{CMi} + 0.5V_i \quad \text{for } i=1,2,3 \quad (2)$$

که در آن V'_i مؤلفه سرعت پس از برخورد، V_{CMi} سرعت سیستم مرکز جرم برای هر مؤلفه و V_i برابر است با:

$$\begin{aligned} V_1 &= BV_r \\ V_2 &= A \cos(c) V_r \\ V_3 &= A \sin(c) V_r \end{aligned} \quad (3)$$

که در رابطه بالا V_r برآیند اختلاف سرعتها و بقیه پارامترها تصادفی اند. [4]

۲- مدل VSS^5 : این روش توسط Koura و Matsumoto توسعه یافته است [6]. در این مدل چند پارامتر لازم برای انعطاف پذیری مولکولها در نظر گرفته شده است. به طوری که زاویه پراکندگی مولکول تابعی از دما و چسبندگی گاز می باشد. روش به دست آوردن سرعتهای بعد از برخورد با استفاده از سرعتهای قبل از آن از رابطه (2) به دست می آید. مقدار V_i از فرامین مرجع [1] قابل دسترسی است. ضریب 0.5 در رابطه

$$(2) \text{ برای دو مولکول متفاوت به صورت } \frac{m_p}{m_p + m_q} \text{ و } \frac{m_q}{m_p + m_q} \text{ تغییر می کند.}$$

در این مدل حل متغیرهای مکان و سرعت یک مقدار اولیه به خود اختصاص می دهند. در واقعیت وقتی یک مولکول حرکت می کند به مولکولهای مجاورش برخورد خواهد کرد. در DSMC این فرآیند جدا می

³ Knudsen

⁴ Variable Hard Spheres

⁵ Variable Soft Sphere

شود؛ یعنی ابتدا مولکولها را حرکت داده و سپس برخورد بین آنها بررسی می‌شود و در هنگام حرکت دادن مولکولها (Shift) برخوردی میان مولکولها مد نظر قرار نمی‌گیرد. [3] سرعتهای مربوط به دمای گاز از رابطه توزیع ماکسولین گازها مقدار دهی می‌شود.

$$V_i = \frac{1}{\beta} \sqrt{-\ln(Rand)} \sin(2\pi Rand) \quad (4)$$

در رابطه بالا، Rand عددی رندم بین صفر و یک است و β بستگی به بیشترین احتمال سرعت در دمای مورد نظر دارد. [2]

$$\frac{1}{\beta} = \sqrt{\frac{2KT}{M}} \quad (5)$$

که K ثابت بولتزمن، T دمای گاز و M جرم مولکولی گاز مفروض می‌باشد. برای حرکت دادن ذرات رابطه ای بین سرعت آنها و فواصل زمانی به کار می‌رود. بدین صورت که هر مولکولی با توجه به دمای گاز سرعتی به خود می‌گیرد و در بازه های زمانی مختلف با توجه به:

$$\begin{cases} x_j^{n+1} = x_j^n + V_j^n \Delta t \\ j = 1, 2, 3 \\ n = \text{No. of Steps} \end{cases} \quad (6)$$

مکان ثانویه مولکول مشخص می‌گردد. در رابطه بالا x_j^n و V_j^n به ترتیب مختصات فضایی کارتیزین و مؤلفه های سرعت مولکول در مرحله n ام اند. اگر مولکول به دیواره یا مرز مسئله برسد، در مرحله حرکت ذرات باید مکان و سرعت آنها با توجه به نوع بازتاب تغییر کند. در سیالات واقعی رقیق تعداد مولکولها به 10^{21} عدد در هر متر مکعب می‌رسد. شبیه سازی سیال با این تعداد مولکول غیر ممکن است و لذا هر مولکول شبیه سازی شده نماینده λ مولکول واقعی می‌باشد.

$$\lambda = \frac{N_{real}}{n} \quad (7)$$

قابل ذکر است که N_{real} و n به ترتیب تعداد مولکولهای واقعی و شبیه سازی شده اند.

۲. به کار گیری مدل مولکولی در روش DSMC

فضای مسئله به قطعات کوچکی تقسیم بندی می‌شود و ذرات سیال برحسب شبکه بندی داخل این سلولها قرار می‌گیرند. برای شبکه بندی فضا می‌توان از مش بندی ثابت استفاده کرد ولی مش بندی مورد استفاده در این مقاله به گونه ای است که براساس تعداد مولکولهای موجود در سلول ابعاد آن تغییر می‌کند. در واقع یک مش بندی دینامیک خواهیم داشت. پس از شبکه بندی، مولکولهای داخل هر مش شمرده می‌شوند و کار نمونه گیری و برخوردهای بین ذرات با توجه به تعداد مولکولهای داخل هر سلول صورت می‌گیرد. حال یک سلول از DSMC را در نظر بگیرید که در آن V_C حجم سلول و هر مولکول داخل آن نماینده λ مولکول واقعی است. احتمال برخورد بین دو مولکول شبیه سازی شده در زمان Δt برابر است با نسبت حجم ایجاد شده با حرکت سطح مقطع مولکولها در سرعت نسبی V_r به حجم کل سلول [1]

$$P = \sigma_T V_r \Delta t / V_C \quad (8)$$

این احتمال زمانی بیشترین مقدار خود را خواهد داشت که سرعت نسبی بین دو مولکول و سطح مقطع آنها به بالاترین حد خود برسد [1].

$$P_{\max} = \lambda (\sigma_T V_r)_{\max} \Delta t / V_C \quad (9)$$

تعداد حالات برخورد بین مولکولها در یک سلول با N مولکول برابر است با: $\frac{N(N-1)}{2}$ بنابراین ماکزیمم تعداد برخوردها از رابطه زیر محاسبه می گردد. [1]

$$N(N) \lambda (\sigma_T V_r)_{\max} \Delta t / 2V_C, N \rightarrow \infty \quad (10)$$

یک جفت مولکول انتخابی از سلول برای اینکه با یکدیگر برخورد داشته باشند، باید شرط زیر را ارضاء کنند:

$$\frac{\sigma_T V_r}{(\sigma_T V_r)_{\max}} > Rand \quad (11)$$

اگر گازی شامل دو نوع مولکول مانند p و q باشد شرط بالا به صورت زیر اصلاح می شود.

$$\frac{\sigma_T V_r}{\{(\sigma_T V_r)_{\max}\}_{pq, pp, qq}} > Rand \quad (12)$$

که در این شرط pp ، qq و pq به ترتیب برخورد مولکولهای نوع p ، نوع q و دو نوع pq با هم هستند. در متد DSMC برای به دست آوردن $(\sigma_T V_r)_{\max}$ در هر مرحله حرکت دادن مولکول $\sigma_T V_r$ محاسبه می شود و اگر بزرگتر از مقدار مرحله قبلی باشد، جایگزین آن می گردد.

شرایط مرزی: اگر مولکول به دیواره یا مرز مسئله برسد باید در مرحله حرکت دادن ذرات سرعت آنها تغییر کند. دو نوع شرط مرزی برای مولکولها، طیفی (Specular) و انتشار (Diffuse) می باشند. روش دیگری نیز برای تعیین شرایط مرزی وجود دارد که به نام CLL (Cercignani Lampis Lord) مشهور است [7].

$R(\vec{V}' \rightarrow \vec{V}; \vec{r}; t)$ تابع چگالی احتمال حالت مولکول برگشتی از دیواره در واحد حجم فضای فازی است. این تابع شامل تمام اطلاعات در مورد خصوصیات فیزیکی و شیمیایی نفوذ گاز رقیق از سطح می باشد و سه شرط زیر را داراست. [5]

$$(1) |\vec{V}'_n| \exp\left(-\frac{mV'^2}{2KT_w}\right) R(\vec{V}' \rightarrow \vec{V}; \vec{r}; t) = |\vec{V}_n| \exp\left(-\frac{mV^2}{2KT_w}\right) R(-\vec{V}' \rightarrow -\vec{V}; \vec{r}; t) \quad (2) R(\vec{V}' \rightarrow \vec{V}; \vec{r}; t) \geq 0$$

$$(3) \int_{V_n > 0} R(\vec{V}' \rightarrow \vec{V}; \vec{r}; t) d\vec{V} = 1 \quad (13)$$

m جرم مولکول، T_w دمای سطح و K ثابت بولتزمن است. دو مدل طیفی و انتشار سه شرط بالا را دارا هستند. مدل طیفی در حقیقت یک بازتابنده کامل است که سرعت پس از برخورد وابسته به سرعت قبل از برخورد است. ولی در مدل انتشار سرعت مولکول بازگشتی از دیواره به دمای دیواره بستگی دارد. اگر

دیواره در حال چرخش باشد، سرعت چرخش با یکی از مؤلفه‌های سرعت مدل انتشار با توجه به مختصات مسئله جمع می‌شود.

ارزیابی روش: در این مسئله سانتیفریوژی مورد بررسی قرار می‌گیرد که شعاع آن یک متر و شامل مخلوط دو گاز آرگون و هلیوم با مقدار مساوی است و چگالی گاز داخل آن برابر $10^{21} (n/m^3)$ است. دمای گاز و دیواره هر دو $200^{\circ}K$ می‌باشد. دیواره خارجی از لحظه $t=0$ با سرعت خطی $1000 (m/S)$ می‌چرخد. تعداد مولکولهای شبیه سازی شده برابر 50000 ذره در کل سیستم است و مولکولها از دیواره با مدل انتشار بازتاب می‌کنند. در زیر داده‌های مربوط به حل مسئله آورده شده است.

جدول ۱ - ب

	ω_{12}	d_{eff}	α_{12}
He - Ar	۰/۷۲۵	$d_{eff Ar} + d_{eff He} / 2$	۱/۶۴

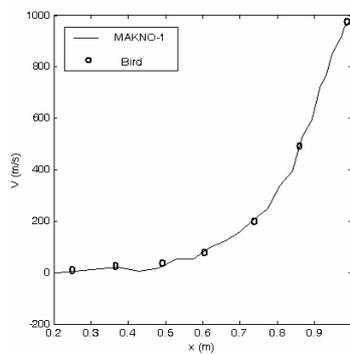
جدول ۱ - الف

	ω	d_{eff}	M	α
Ar	۰/۸۱	$4/11 \times 10^{-11}$	$66/3 \times 10^{-27}$	۱/۴
He	۰/۶۶	$2/88 \times 10^{-11}$	$6/65 \times 10^{-27}$	۱/۲۶

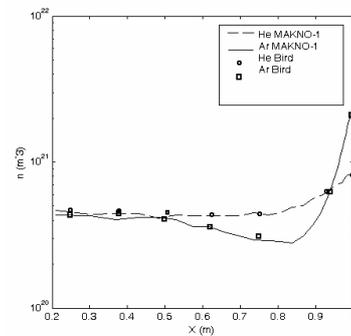
مقادیر مورد استفاده برای به دست آوردن سطح مقطع برخورد بین دو گاز جدول ۱ - الف و He-He و Ar-Ar و جدول ۱ - ب He-Ar. ω و α ضرایب به کار رفته برای به دست آوردن سطح مقطع برخوردها.

۳. نتایج

برای حل این مسئله نرم افزاری به نام MAKNO-1 توسعه یافته و نتایج زیر حاصل شده اند.



شکل ۱-ب) مؤلفه سرعت مماسی در داخل سانتیفریوژ [1]



شکل ۱-الف) نمودار چگالی عددی [1]

۴. بحث و نتیجه گیری

در نزدیکی دیواره گاز آرگون به علت جرم بالا، چگالی عددی بیشتری از چگالی عددی هیدروژن خواهد داشت. همچنین نمودار سرعت چرخشی در مجاورت دیواره برابر $1000 (m/S)$ است و با دور شدن از دیواره سرعت مماسی آن کاهش می‌یابد.

۵. سپاسگزاری

در پایان از آقایان ، دکتر مجید شهریار و مهندس هادی نصیری راد جهت راهنمایی هایشان کمال تشکر را داریم .

۶. مراجع

- [1] G.A.Bird , Molecular Gas Dynamic And The Direct Simulation Of Gas Flows , Clarendon Press . OXFORD , pp. 1 – 43,122,218 – 314 , 1995
- [2] M. Moffat , L. Long , P. Plassmann , Direct Simulation Monte Carlo , CEMBA Seminar , 2002
- [3] W.K.Mtthes , Monte Carlo Simulation Of gas-flow using MCNP , Annals of Nuclear Energy, 32 , 1495 – 1508 , 2005
- [4] G.A.Bird , Monte Carlo Simulation in an Engineering Context , Progr. Astro. Aero , 74 , 239 – 255 , 1981
- [5] O.Sazhin , A.Kulev , S.Borisov , S.Gimelshein , Numerical analysis of gas-surface scattering effect on thermal transpiration in the free molecular regime , SURFACE ENGINEERING , SURFACE INSTRUMENTATION & VACUUM TECHNOLOGY , 82 , 20 – 29 , 2007
- [6] C.Cercignani , Rarefied Gas Dynamics , Cambridge University Press. Cambridge , pp. 231 – 235 , 2000
- [7] R.G.Lord , Some extension to the cercignani-Lampis gas scattering kernel , Phys. Fluids 43 , pp. 706 – 710 , 1991b