

بررسی تغییرات غلظت اجزای یک مخلوط گاز سه جزئی در جهت شعاعی و محوری در داخل یک ماشین سانتریفوژ گازی در شرایط «جریان برگشت کامل» با استفاده از روش شبیه‌سازی مستقیم مونت کارلو

صادق یوسفی‌نسب^۱، جواد کریمی ثابت^{۱*}، سیدجابر صفدری^۱، علی نوروزی^۲، الهام امینی^۲

۱. پژوهشکده‌ی مواد و سوخت هسته‌ای، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، سازمان انرژی اتمی، صندوق پستی: ۸۴۸۶-۱۱۳۶۵، تهران- ایران

۲. شرکت فن‌آوری‌های پیشرفته‌ی ایران، سازمان انرژی اتمی، صندوق پستی: ۵۹۳۱-۱۴۳۹۹۵، تهران- ایران

مقاله‌ی پژوهشی

تاریخ دریافت مقاله: ۹۷/۵/۲۱ تاریخ پذیرش مقاله: ۹۷/۱۰/۴

چکیده: این مقاله با بهره‌گیری از یک روش جدید شبکه‌بندی ترکیبی در مختصات متقارن محوری، یک حل‌کننده‌ی غلظت چند جزئی- شبیه‌سازی مستقیم مونت کارلو (MCC-DSMC) معرفی می‌کند که با استفاده از آن تغییرات جریان و غلظت در داخل یک سانتریفوژ در حالت گردش صلب برای مدل‌های کروی سخت و نرم تغییرپذیر و برای مخلوط گازهای هیدروژن، آرگون و کریپتون بررسی شد. یافته‌ها حاکی از آن است که دو مدل برخورد دارای انطباق بالایی نسبت به یک‌دیگر هستند ولی نتیجه‌های آن‌ها با نتیجه‌های حل تحلیلی به دست آمده از تابع توزیع بولتزمن دارای مقداری اختلاف است. همچنین نتیجه‌ها نشان می‌دهند که با حضور مخلوط چند گاز در داخل یک سانتریفوژ، چند لایه‌بندی شعاعی از جریان گازها درون روتور شکل می‌گیرد به گونه‌ای که سنگین‌ترین گاز در لایه‌ی کناری دیواره، سبک‌ترین گاز در لایه‌ی نزدیک محور روتور و گازهای با جرم مولکولی متوسط در لایه‌ی مابین این دو قرار می‌گیرند. همچنین در این پژوهش تأثیر محرک‌های گرمایی روتور در ایجاد یک جریان محوری (برگشت کامل) و تغییرات محوری غلظت اجزا در جهت محوری با استفاده از روش شبیه‌سازی مستقیم مونت کارلو مورد بررسی قرار گرفت درحالی‌که بررسی آن با استفاده از حل تحلیلی تابع توزیع بولتزمن امکان‌پذیر نیست.

کلیدواژه‌ها: گازهای چندجزئی، سانتریفوژ گازی، جریان بازروانی کامل، روش شبیه‌سازی مستقیم مونت کارلو

Investigation of concentration variation of the components of a three-component gas mixtures in the radial and axial direction of a gas centrifuge machine under “total reflux flow” conditions by using the DSMC method

S. Yousefi Nasab¹, J. Karimi-Sabet^{1*}, J. Safdari¹, A. Norouzi², E. Amini²

1. Materials and Nuclear Fuel Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute, AEOI, P.O.Box: 11365-8486, Tehran – Iran

2. Iran Advanced Technologies Company, AEOI, P.O.Box: 143995-5931, Tehran – Iran

Abstract: In this paper, using a new combinatory meshing technique in the axisymmetric coordinate, a MCC-DSMC solver is introduced. Using this solver, the flow and the concentration variation inside a centrifuge machine in a rigid body rotation mode with the DSMC method for a variable hard sphere and a variable soft sphere models and for the mixing hydrogen, argon, and krypton gases are investigated. Our results are compared with the analytical solution. The results indicate that the two collision models are totally in agreement with each other, but the results have some differences with the analytical results obtained from the Boltzmann distribution function. The results show that the presence of the several gases with different molecular weights in a centrifuge shaped a multi-layered radial flow of gas inside the rotor, so that the heaviest gas in the area of the side wall of the rotor, the lightest gas in the region near the axis of the rotor and gases with the medium molecular mass were placed in a layer between them. Furthermore, the variation of the concentration for each component of the mixing gas in the axial direction is also investigated by the DSMC method, otherwise, that it is impossible to investigate it using the analytical solution of the Boltzmann distribution function.

Keywords: Multi-component gases, Gas centrifuge, Total reflux, DSMC method

*Email: jvkarimi@aeoi.org.ir

۱. مقدمه

کاربرد اصلی سانتریفوژهای گازی، جداسازی ایزوتوپی و جداسازی گازهای چندجزیی برای هدفهای مختلف در علوم شیمی، فیزیک، پزشکی و مواد است. طراحی مجدد سانتریفوژها برای اهداف جدید، با استفاده از مدل‌های محاسباتی مبتنی بر مدل‌سازی جریان داخلی صورت می‌پذیرد [۱].

در یک ماشین سانتریفوژ گازی، گاز با ترکیبی از دو یا چند جزء یا ایزوتوپ وارد روتور می‌شود و تحت تأثیر نیروی گریز از مرکز شدیدی که ناشی از دوران روتور این ماشین در یک محفظه‌ی خلأ است، جداسازی صورت می‌پذیرد. به دلیل نفوذ فشاری، جزء سنگین‌تر به دیواره و جزء سبک‌تر به محور روتور نزدیک می‌شوند و به این ترتیب جدایش شعاعی بین ایزوتوپ‌های یک گاز صورت می‌پذیرد. با توجه به عدم امکان انجام محاسبه‌های عددی حجیم برای حل معادله‌های غیرخطی ناویر-استوکس در گذشته و از طرفی ضرورت بررسی رفتار گاز درون روتور و محاسبه‌ی پارامترهای جریان، از ابتدای توسعه‌ی سانتریفوژ، روش‌های جای‌گزینی مانند روش اونساگر [۲] برای حل معادله‌های حاکم بر جریان گاز درون لایه‌ی استوارتسون روتور (لایه‌ی نازک کناری دیواره‌ی روتور که جرم غالب گاز در آن قرار دارد) ارایه شد. همچنین برای حل معادله‌ی پیوستگی جرم و تعیین توزیع غلظت اجزا در راستای محوری، روش تقریب میانگین شعاعی توسط کهن ارایه شد [۳، ۴]. با پیشرفت سیستم‌های محاسباتی، روش‌های دقیق‌تری همچون روش‌های لاگرانژ مورد استفاده قرار گرفتند. یکی از این روش‌ها، روش شبیه‌سازی مستقیم مونت‌کارلو (DSMC) است که برای شبیه‌سازی جریان‌های گاز رقیق مورد استفاده قرار می‌گیرد. در این روش به جای حل معادله‌های بولتزمن، از مفهوم فیزیکی به کار رفته در استخراج معادله‌های بولتزمن استفاده می‌شود که برای محدوده‌ی وسیعی از روندهای جریان کاربرد دارد. یک حل با استفاده از روش شبیه‌سازی مستقیم مونت‌کارلو با انتخاب تعداد مناسب شبکه و بازه‌ی زمانی و همچنین تعداد ذره‌های شبیه‌سازی بالا با حل معادله‌های بولتزمن برابری می‌کند [۵]. برد [۶] در سال ۱۹۹۴ جریان کوئت-تیلور را با روش شبیه‌سازی مستقیم مونت‌کارلو مورد

مطالعه قرار داد و تغییرات سرعت محوری، دما، تنش و شار گرمایی را در یک بُعد بررسی کرد. او به بررسی ناپایداری‌های ایجاد شده در این نوع جریان پرداخت و نشان داد که روش شبیه‌سازی مستقیم مونت‌کارلو روشی توانمند در تحلیل مسایل گاز رقیق است.

رابلین و دوندو [۷] در سال ۲۰۰۱ جریان گاز درون سانتریفوژ را بررسی کردند. آن‌ها میدان جریان را به دو بخش پیوسته و مولکولی تقسیم کردند. بخش پیوسته که نزدیک دیواره‌ی چرخان سیلندر است به کمک معادله‌های ناویر استوکس حل و نمایه‌های سرعت شعاعی و محوری در بخش مولکولی روتور ضمن تزریق خوراک، با استفاده از روش شبیه‌سازی مستقیم مونت‌کارلو تعیین شد. همچنین آن‌ها توان مکانیکی چرخشی سیلندر و انتقال حرارت از بدنه‌ی سیلندر برای گاز HF را نیز مورد بررسی قرار دادند.

ونگ و لی [۸] در سال ۲۰۰۵ به بررسی مخلوط گازی با عدد نادسن بالا در یک ریزکانال با روش شبیه‌سازی مستقیم مونت‌کارلو پرداختند. آن‌ها تغییرات ضریب اختلاط نسبت به عدد ماخ و معکوس عدد نادسن را به دست آوردند. داده‌های شبیه‌سازی آن‌ها نشان داد که سرعت و دمای جریان بیش‌ترین تأثیر را در ضریب اختلاط گازها دارند و خاصیت‌های دیواره اگرچه روی نمایه‌های سرعت و دما تأثیر می‌گذارد ولی تأثیر کمی بر روی طول اختلاط دارد. پورمحمود [۹] در سال ۲۰۰۸ به بررسی جریان‌های چرخشی در سیلندرهای چرخان با مقادیر مختلف نسبت طول به قطر استوانه پرداخت و تأثیر این پارامتر بر روی خواص میدان جریان مثل چگالی و سرعت را بررسی کرد.

برد [۱۰] در سال ۲۰۱۳ همچنین به بررسی تغییرات غلظت برای گازهای هلیوم، آرگون و زنون در داخل یک ماشین سانتریفوژ در یک بُعد پرداخت و نمایه‌های فشار، غلظت و سرعت چرخشی را برحسب شعاع به دست آورد.

خادم و همکاران [۱۱] در سال ۲۰۱۵ به بررسی جریان داخلی مخلوط حاوی گازهای آرگون و هلیوم درون یک استوانه‌ی دوار با سرعت زاویه‌ای و دمای دیواره‌ی ثابت با استفاده از روش شبیه‌سازی مستقیم مونت‌کارلو پرداختند. آن‌ها بررسی خود را با استفاده از دو شیوه‌ی برخورد کروی سخت و نرم تغییرپذیر انجام دادند.

موقعیت و سرعت هر مولکول گازی و در نتیجه کمیت‌های ماکروسکوپی و غلظت هر جزء گازی را پس از به تعادل رسیدن جریان ثبت کرد. ذره‌های درون هر شبکه‌ی سلولی به طور متوالی در امتداد یک مسیر خطی پیشروی می‌کنند و سپس برای برخورد با دیواره یا برخورد با یکدیگر بررسی می‌شوند. به طور کلی این حل‌کننده شامل مرحله‌های زیر است:

۱. مقداردهی اولیه‌ی موقعیت و سرعت به هر جزء گازی؛
۲. شبکه‌بندی ناحیه‌ی محاسباتی؛
۳. حرکت دادن ذره‌ها و برخورد با سطح؛
۴. برخورد ذره‌ها با یکدیگر؛
۵. نمونه‌گیری از اجزای گازی داخل هر شبکه؛
۶. محاسبه‌ی کمیت‌های ماکروسکوپی مربوط به هر جزء گازی؛
۷. برگشت به مرحله‌ی سوم.

۱.۲ مقداردهی اولیه به هر جزء گازی

در ابتدا می‌باید براساس نسبت فراوانی هر جزء گازی، یک موقعیت اولیه برای آن‌ها تعیین شود. مقداردهی اولیه در مختصات کارتزین به صورت مکان‌هایی در جهت x ، y و z است که طی آن ذره‌ها به صورت تصادفی در ناحیه‌ی محاسباتی ریخته می‌شوند. رابطه‌های موقعیت‌دهی اولیه‌ی ذره‌ها چنین‌اند. در مختصات استوانه‌ای:

$$\begin{aligned} r &= \sqrt{\text{Random}} \times R \\ Z &= Z_{\max} \times \text{Random} \\ \theta &= 2\pi \times \text{Random} \end{aligned} \quad (1)$$

در مختصات کارتزین:

$$\begin{aligned} y &= \text{Random} \times y_{\max} \\ x &= \text{Random} \times x_{\max} \\ z &= \text{Random} \times z_{\max} \end{aligned} \quad (2)$$

در این‌جا Random عددی تصادفی با توزیع یکنواخت بین صفر و یک است.

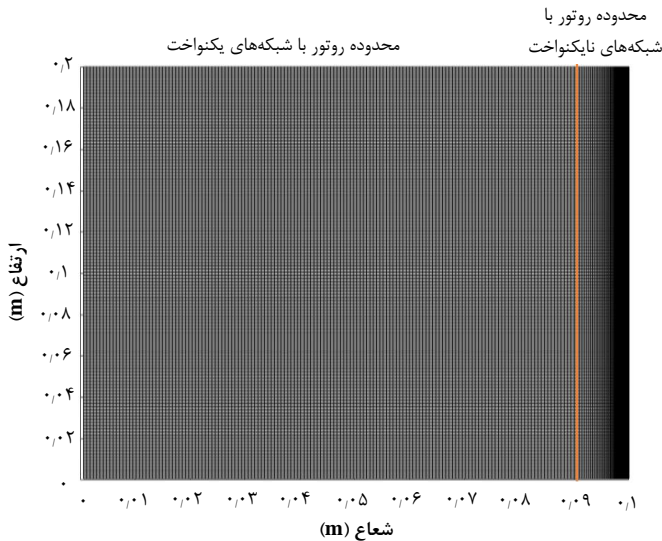
پرادهان و کوماران [۱۲] در سال ۲۰۱۱ و پرادهان [۱۳] در سال ۲۰۱۶ به بررسی شار جرمی محوری داخل یک استوانه‌ی چرخان با سرعت بالا براساس عبارت بی‌بعد در راستای شعاعی با استفاده از روش شبیه‌سازی مستقیم مونت‌کارلو پرداختند و یافته‌های خود را با مدل انساگر تعمیم‌یافته مقایسه نمودند و به یافته‌های مشابهی دست یافتند. این مقاله، حل‌کننده‌ی غلظت چند جزئی- شبیه‌سازی مستقیم مونت‌کارلو (MCC-DSMC) را معرفی می‌کند که شبیه‌سازی هم‌زمان جریان و غلظت در سیستم سه جزئی هیدروژن، آرگون و کریپتون را با استفاده از ابزار مولکولی DSMC انجام می‌دهد؛ در واقع با این ابزار نیازی به شبیه‌سازی جداگانه‌ی جریان و غلظت در داخل ماشین سانتریفوژ نیست. از دیگر مزیت‌های این روش می‌توان به قابلیت آن در شبیه‌سازی رفتار گاز درون یک ماشین سانتریفوژ در تمامی محدوده‌های روند جریانی (از پیوسته تا مولکولی) و برای گازهای چند جزئی و ایزوتوپی نام برد.

در کار حاضر با استفاده از این حل‌کننده، اثر جدایش محوری در یک ماشین سانتریفوژ با استفاده از اعمال یک محرک گرمایی روی دیواره‌ی روتور مورد بررسی قرار گرفته است و نشان می‌دهد که درون روتور ماشین سانتریفوژ، علاوه بر جدایش شعاعی (به دلیل اعمال نیروی گریز از مرکز)، با اعمال یک محرک گرمایی بر روی دیواره‌ی روتور، می‌توان به یک جدایش محوری نیز دست یافت.

۲. توصیف حل‌کننده‌ی MCC-DSMC

MCC-DSMC یک روش شبیه‌سازی بر پایه‌ی مونت‌کارلو با روند مشابه روش DSMC است. با توجه به این که این حل‌کننده برای شبیه‌سازی گاز داخل یک ماشین سانتریفوژ مورد استفاده قرار می‌گیرد، شبکه‌بندی آن یک شبکه‌بندی ترکیبی است. هم‌چنین این حل‌کننده به محاسبه‌ی مقدارهای غلظت اجزای گازی براساس دیدگاه میکروسکوپی می‌پردازد و در انتها مقدارهای غلظت در راستای شعاعی و محوری را محاسبه می‌کند. در این حل‌کننده ضمن دنبال کردن ذره‌ها و بررسی برخورد آن‌ها با یکدیگر یا دیواره‌ها، می‌توان در انتها

1. Multi component concentration- direct simulation monte carlo solver



شکل ۱. ساختار شبکه‌بندی برای فضای درون یک روتور.

در این جا α_s پهنای شبکه‌ی اول و r_s عامل کاهنده یا افزایش‌دهی بُعد هر سلول و r_s و α_s جواب‌های تصاعد هندسی مربوط به شبکه‌ی نایکنواخت، C_w نسبت پهنای آخرین سلول به اولین سلول در هر قسمت، r_s بُعد هر ناحیه و \hat{y} مکان بهنجار شده‌ی مولکول است که چنین نوشته می‌شود.

$$\hat{y} = \frac{(y - y_1)}{(y_r - y_1)} \quad (۸)$$

۳.۲ مرحله‌ی حرکت

در مرحله‌ی حرکت پس از موقعیت‌دهی تصادفی ذره‌ها در محیط، برای آن‌ها می‌توان با استفاده از یک توزیع ماکسولی مقادیر سرعت اولیه را تعیین کرد. برای یک مسأله‌ی متعادل، شرایط اولیه روی حل نهایی اثر نمی‌گذارد، اما روی زمان محاسبات اثر خواهد داشت. در مسایل گذرا، تعیین مقدار، شرط اولیه‌ی مهم بوده و خود می‌تواند یک جواب مسأله در زمان صفر باشد به نحوی که در جواب نهایی مسأله می‌تواند تأثیرگذار باشد. بنابراین، تعیین مقدار اولیه‌ی درست برای سرعت و دما مهم است. مقداردهی اولیه‌ی سرعت با استفاده از توزیع ماکسولی به صورت زیر است:

$$\begin{aligned} v_r &= v_{mp} \sqrt{-\text{Ln}(\text{Random})} \sin(\pi \text{Random}) \\ v_z &= v_{mp} \sqrt{-\text{Ln}(\text{Random})} \cos(\pi \text{Random}) \\ v_\theta &= \pi \text{Random} \times v_{mp} \\ v_{mp} &= \sqrt{\frac{r k_B T}{m}} \end{aligned} \quad (۹)$$

۲.۲ شبکه‌بندی ترکیبی در مختصات متقارن محوری

یکی از عامل‌های مهم برای سرعت بخشیدن به اجرای برنامه با روش DSMC، انتخاب روش مناسب برای شبکه‌بندی فضای محاسبات و تعیین شماره‌ی شبکه‌ها به وسیله‌ی مختصات ذرات است. برای این منظور، برد [۶] از شبکه‌بندی کاهش‌ی در جهت شعاع استفاده کرده است. از آن جایی که چگالی یا فشار در درون روتور به صورت نمایی از محور سانتیفریوژ تا دیواره افزایش می‌یابد، می‌توان از شبکه‌ی کاهش‌ی در محدوده‌ی نزدیک به دیواره و از شبکه‌ی یکنواخت در سایر ناحیه‌های روتور استفاده کرد یا به عبارتی دیگر می‌باید از یک شبکه‌بندی ترکیبی استفاده کرد.

در این شیوه، شعاع به دو قسمت شبکه‌های یکنواخت و نایکنواخت مطابق با شکل ۱ تقسیم‌بندی می‌شود. مشکل ایجاد شده در این نوع شبکه‌بندی به دست آوردن شماره‌ی شبکه با توجه به مختصات آن است. در ادامه رابطه‌های مورد نیاز برای محاسبه‌ی شماره‌ی شبکه‌ی هر ذره‌ی واقع در موقعیت y از شعاع (m_y) برای یک شبکه‌بندی ترکیبی پیشنهاد می‌شود. در قسمت شبکه‌بندی یکنواخت، می‌توان از رابطه‌های زیر استفاده کرد:

$$s = 1 : N \quad (\text{شماره‌ی ناحیه})$$

$$c = 1 : n_{cy(s)} \quad (\text{شماره‌ی شبکه})$$

$$\Delta y_s(c) = \frac{y_r(s) - y_1(s)}{n_{cy(s)}} \quad (۳)$$

$$m_y = 1 + \frac{(y - y_1)}{\Delta y_s(c)} \quad (۴)$$

در این جا $y_r(s)$ و $y_1(s)$ مرز هر ناحیه، $n_{cy(s)}$ تعداد شبکه‌ی استفاده شده در هر ناحیه و $\Delta y_s(c)$ بُعد هر شبکه است. براساس یک تصاعد هندسی، معادله‌ی مناسب برای محاسبه‌ی شماره‌ی ذره‌ها در قسمت شبکه‌بندی نایکنواخت به صورت معادله‌ی (۷) پیشنهاد می‌شود:

$$a_s + a_s r_s + a_s r_s^2 + \dots + a_s r_s^{n-1} = a_s (1 - r_s^n) / (1 - r_s) \quad (۵)$$

$$r_s = C_w^{1/n_{cy(s)-1}}$$

$$a_s = (1 - r_s) / (1 - r_s^{n_{cy(s)}})$$

$$\Delta y_s(c) = r(s) \times a_s \times r_s^{(c - n_{cy(s)-1})} \quad (۶)$$

$$m_{y(s)} = \left[1 + \frac{\ln \left\{ 1 - \frac{(1 - r_s)(\hat{y} - 1)}{a_s} \right\}}{\ln(r_s)} \right] + n_{cy(s-1)} \quad (۷)$$

رسانندگی گرمایی به خوبی قابل محاسبه‌اند ولی عدد اشمیت^۱ که وابسته به ضریب نفوذ است با رفتار یک گاز واقعی انطباق ندارد. مقدار توان دمایی ضریب گرانروی^۲ (ω) در این مدل برای هر گاز مقداری متفاوت (غیر از ۰٫۵) است که این باعث ایجاد شرایط واقع بینانه‌تری نسبت به مدل کروی سخت ($\omega = 0.5$) در رابطه‌ی بین دما و گرانروی می‌شود. شکل ۲ نمونه‌ای از برخورد دو ذره با یکدیگر را نشان می‌دهد.

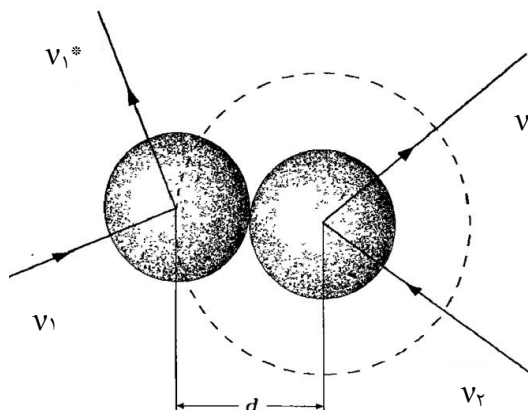
برخورد کروی نرم تغییرپذیر

این مدل رابطه‌های احتمالی را توسط پارامتری به نام پارامتر تطبیق^۳ (α)، به جنس گاز مورد استفاده وابسته می‌سازد؛ این پارامتر در مدل برخورد کروی سخت تغییرپذیر برابر یک است. در نتیجه زاویه‌ی انعکاس ذره‌ها بعد از برخورد نیز با دیگر مدل‌ها متفاوت است. مقدار قطر مرجع در این مدل برخورد، براساس مقدارهای α ، دمای مرجع (T_{ref}) و گرانروی مرجع (در شرایط استاندارد) به صورت زیر قابل محاسبه است:

$$d_{ref} = \left(\frac{\Delta(a+1)(a+2)(mk_B T_{ref} / \pi)^{\gamma/\Delta}}{4a(\Delta-2\omega)(\gamma-2\omega)\mu_{ref}} \right)^{\gamma/\Delta} \quad (11)$$

مقدار α به طور مستقیم با استفاده از رابطه‌ی زیر با عدد اشمیت و ضریب گرانروی و ضریب خودنفوذی مرتبط است:

$$Sc \equiv \frac{\mu_{ref}}{\rho(D_{11})_{ref}} = \frac{\gamma+a}{\left(\frac{\gamma}{\Delta}\right)(\gamma-2\omega)a} \quad (12)$$



شکل ۲. برخورد دو ذره با یکدیگر.

در این جا T دما، k_B ثابت بولتزمن و m جرم مولکول است. همان‌طور که از رابطه‌ی (۹) می‌توان دید جرم مولکولی با سرعت مولکولی رابطه‌ی عکس دارد. به عبارت دیگر می‌توان گفت که هر قدر جرم مولکول کم‌تر باشد میانگین سرعت آن بیش‌تر است. در واقع اختلاف در جرم مولکولی اجزای گازی می‌تواند باعث شکل‌گیری سرعت‌های مختلف برای اجزای شود. پس از موقعیت‌دهی و سرعت‌دهی اولیه به ذره‌ها، می‌توان آن‌ها را با استفاده از معادله‌ی خطی حرکت، حرکت داد.

$$r_i(t+dt) = r_i(t) + v_{i-r,z,\theta}(t)dt \quad (10)$$

که در آن r_i موقعیت برداری ذره‌ی نام است.

۴.۲ مرحله‌ی برخورد

ذره‌ها بعد از شروع حرکت، می‌توانند با یکدیگر برخورد و در نتیجه تغییر سرعت داشته باشند. برخورد می‌تواند برخورد ذرات با یکدیگر و یا برخورد آن‌ها با دیواره باشد.

۱.۴.۲ برخورد ذرات با یکدیگر

از مهم‌ترین مدل‌های برخورد ذرات با یکدیگر که در شبیه‌سازی مستقیم مونت کارلو مورد استفاده قرار می‌گیرند می‌توان به مدل‌های زیر اشاره داشت:

مدل برخورد کروی سخت

در این مدل، مقدار سطح مقطع برخورد ثابت بوده و با مقدار سرعت نسبی تغییر نمی‌کند در صورتی که مقدار سطح مقطع واقعی می‌باید با افزایش سرعت نسبی کاهش یابد. از جمله‌ی مزیت‌های این مدل، محاسبات ساده‌ی آن به دلیل پراکندگی ناهمسانگرد در سیستم مرکز جرم است؛ ولی این قانون پراکندگی، واقعی نیست که خود از عیب‌های این مدل است.

مدل برخورد کروی سخت تغییرپذیر

مدل برخورد کروی سخت تغییرپذیر همان مدل کروی سخت است که در آن قطر تابعی از سرعت نسبی است. سطح مقطع مدل کروی سخت تغییرپذیر از ضریب گرانروی تعیین می‌شود ولی نسبت سطح مقطع تکانه به گرانروی از مقدار سطح مقطع کروی سخت تبعیت می‌کند و این یک نقص برای این مدل به حساب می‌آید. در این مدل، ضریب گرانروی و ضریب

1. Schmidt number
2. Temperature exponent of the coefficient of viscosity
3. Exponent in the Variable soft sphere molecular model

$$\begin{aligned}
 v_{r_new} &= -v_{mp} \sqrt{-\log(\text{Random})} \\
 v_{\theta_new} &= v_w + (\text{Random normal}) \times v_{sd} \\
 v_{z_new} &= (\text{Random normal}) \times v_{sd} \\
 r_{new} &= r_{max} + t_{rem} v_{r_new} \\
 v_{sd} &= \sqrt{\frac{k_B T}{m}} \\
 t_{rem} &= \frac{(r - r_{max})}{v_r} \quad (16)
 \end{aligned}$$

۵.۲ نمونه‌گیری از کمیت‌های میکروسکوپی و محاسبه‌ی مقادیرهای ماکروسکوپی

بعد از تکرار فرایندهای حرکت، آدرس‌دهی برخورد ذره‌ها با دیواره و با یک‌دیگر، عمل نمونه‌برداری آماری در مرحله‌ی نمونه‌گیری انجام می‌شود که به محاسبه‌ی مقادیرهای مجموع سرعت $\sum v_r$ ، $\sum v_\theta$ ، $\sum v_z$ و مجذور مجموع سرعت $\sum v_r^2$ ، $\sum v_\theta^2$ و $\sum v_z^2$ که بیان‌گر کمیت‌های ماکروسکوپی هستند، در هر سلول می‌پردازد و بعد از تعداد مشخص نمونه‌برداری، خروجی برنامه تهیه و این خروجی تا رسیدن به تعداد مشخصی تکرار، اصلاح می‌شود.

پس از به دست آوردن مقادیرهای کمیت‌های میکروسکوپی سرعت در هر سلول، مقادیرهای ماکروسکوپی هم‌چون غلظت، چگالی جرمی، فشار و دمای انتقالی برای گازهای چند جزیی به صورت زیر قابل محاسبه‌اند:

$$x_i = \frac{n_i}{\sum_{i=1}^t n_i} \quad (17)$$

$$\rho = \sum_{i=1}^t (m_i n_i) \quad (18)$$

$$p = \sum_{i=1}^t \frac{1}{3} m_i n_i \overline{c_i^2} = \sum_{i=1}^t \frac{1}{3} m_i n_i (\overline{v_r^2} + \overline{v_\theta^2} + \overline{v_z^2})_i = \frac{1}{3} n m \overline{c^2} \quad (19)$$

$$\frac{3}{2} k T_r = \frac{1}{2} \overline{m c^2} \quad (20)$$

چگالی عددی برای هر جزء گازی در هر سلول، بیان‌گر غلظت همان جزء در آن سلول انتخابی است. بنابراین، نسبت چگالی عددی هر جزء به چگالی عددی کل در هر سلول، غلظت یا کسر مولی آن جزء را نشان می‌دهد. (t تعداد اجزاء گازی است)

تمامی رابطه‌های مورد نیاز محاسبه‌ی مقدار اجزای سرعت بعد از برخورد، با استفاده از مدل‌های کروی سخت و نرم تغییرپذیر در مرجع [۱۴] آورده شده است.

۲.۴.۲ برخورد ذره‌ها با دیواره

یکی از مرحله‌های مهم در شبیه‌سازی با روش مستقیم مونت‌کارلو، مرحله‌ی برخورد ذره‌ها با دیواره است. با توجه به شرط‌های مرزی انتخاب شده برای ناحیه‌ی مورد بررسی، اگر ذره‌ای از مختصات شرط مرزی داده شده عبور کند، مطابق با رابطه‌های هر یک از مدل‌های برخورد با دیواره، می‌تواند موقعیت و سرعت جدید بگیرد. از شرط‌های مرزی مهم مورد استفاده در برخورد مولکول با دیواره می‌توان به موردهای زیر اشاره کرد:

۱) شرط مرزی طیفی^۱

در شرط مرزی طیفی، ذره‌ها پس از برخورد با دیواره، با سرعت شعاعی برابر با سرعت برخورد ولی در جهت عکس آن مقداردهی می‌شوند و سرعت در دو جهت دیگر تغییری نمی‌کند. رابطه‌های مورد استفاده در این شرط مرزی در مختصات استوانه‌ای چنین‌اند:

$$\begin{aligned}
 v_{r_new} &= -v_{old} \\
 v_{\theta_new} &= v_{\theta_old} \quad (13)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 v_{z_new} &= v_{z_old} \\
 r_{new} &= 2r_{max} - r_{old} \quad (14)
 \end{aligned}$$

۲) شرط مرزی انتشاری^۲

در شرط مرزی انتشاری، ذره‌ها، مستقل از سرعت اولیه‌ی برخورد با دیواره عمل می‌کنند و با یک توزیع نیمه‌گاوسی متناسب با دمای دیواره، مقداردهی می‌شوند.

$$f_w(T_w, \vec{v}_w) = \frac{m^r (v_n - v_{w,n})}{2\pi (k_B T_w)^r} \exp\left(-\frac{m(\vec{v} - \vec{v}_w)^r}{2k_B T_w}\right) \quad (15)$$

مقادیرهای سرعت و مکان ذره بعد از برخورد با دیواره با استفاده از تابع توزیع داده شده در رابطه‌ی (۲۴) در مختصات استوانه‌ای به صورت رابطه‌ی (۱۶) بیان می‌شوند:

1. Specular boundary condition
2. Diffuse boundary condition

۳. روش حل تحلیلی

در یک سانتریفوژ در حال چرخش با سرعت زاویه‌ای ω (rad s⁻¹) گاز با چگالی ρ در شعاع r تحت نیروی گریز از مرکز $\omega^2 r \rho$ در یکای حجم قرار می‌گیرد که برابر با شیب فشار در آن نقطه است [۱۵].

$$\frac{dP}{dr} = \omega^2 r \rho \quad (21)$$

$$P = \frac{\rho R_g T}{M} \quad (22)$$

با جای گذاری رابطه‌ی (۲۲) در رابطه‌ی (۲۱) چنین به دست می‌آید.

$$\frac{1}{P} \frac{dP}{dr} = \frac{M \omega^2 r}{R_g T} \quad (23)$$

با انتگرال‌گیری از رابطه‌ی (۲۳)، نسبت فشار یا نسبت چگالی از محور تا دیواره‌ی روتور سانتریفوژ به دست می‌آید.

$$\frac{P(r)}{P_R} = \frac{\rho(r)}{\rho_R} = \exp \left[-\frac{M V_w^2 r}{r R_g T} \left(1 - \frac{r^r}{R^r} \right) \right] \quad (24)$$

که در آن فشار در دیواره‌ی روتور و V_w سرعت محیطی روتور است. انرژی یک ذره در جریان متقارن محوری مخلوط گاز در یک استوانه‌ی دوار از معادله‌ی زیر به دست می‌آید:

$$E(r) = \frac{1}{2} I \omega^2 = \frac{1}{2} m r^2 \omega^2 \quad (25)$$

اثرهای چرخش نیز مشابه اثرهای اضافی میدان، روی سیستم است و با رابطه‌ی زیر بیان می‌شود.

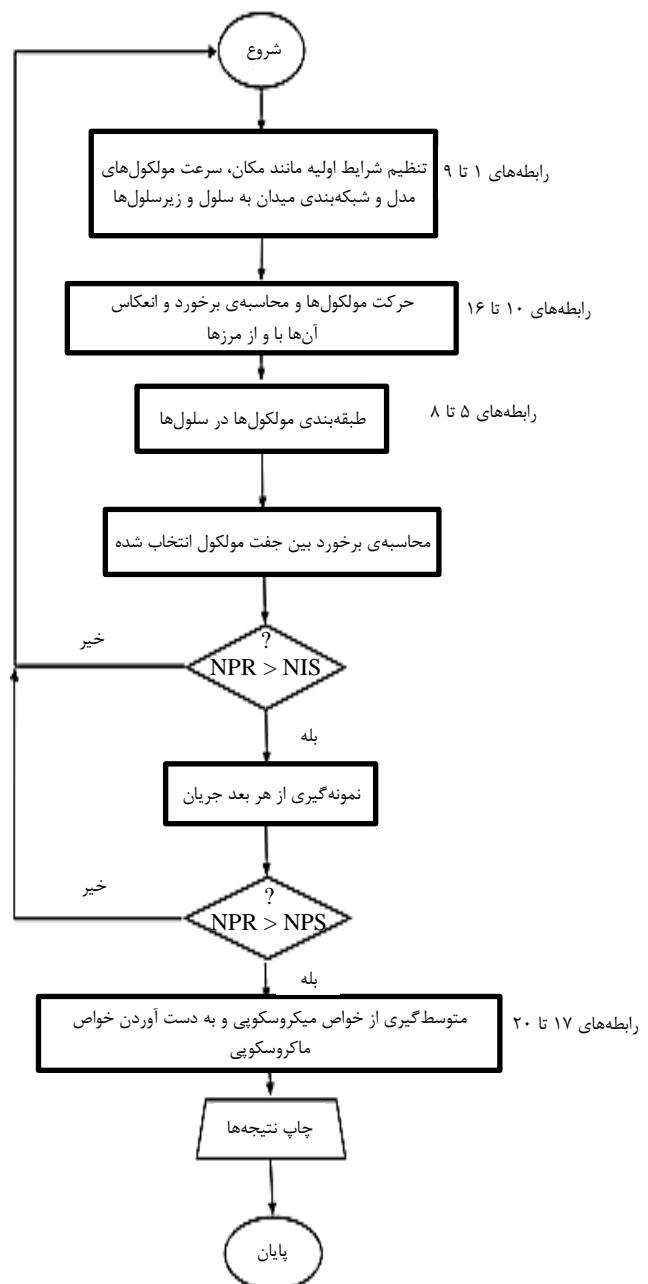
$$U(r) = -\frac{1}{2} m r^2 \omega^2 \quad (26)$$

با استفاده از تابع توزیع بولتزمن برای چگالی عددی یک ذره و استفاده از معادله‌ی (۲۶) در آن، چگالی عددی در راستای شعاعی قابل محاسبه است.

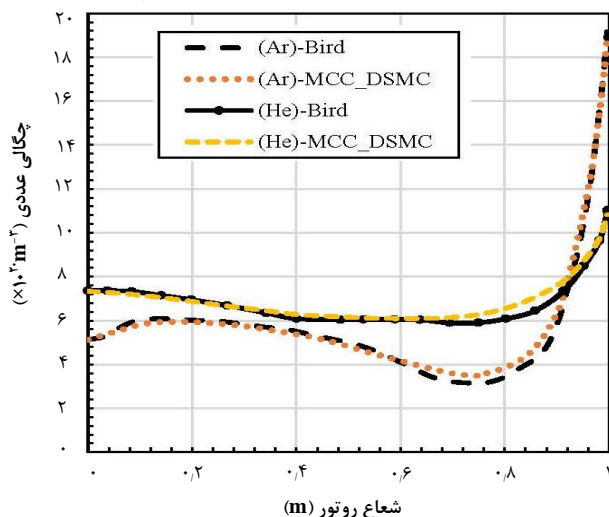
۶.۲ روندنمای روش MCC-DSMC

روندنمای مورد استفاده در حل‌کننده‌ی MCC-DSMC در شکل ۳ نشان داده شده است. شماره‌ی رابطه‌های مورد استفاده در هر مرحله از حل‌کننده نیز در کنار هر جعبه آورده شده است.

در این روندنما کمیت‌های NPR، NIS و NSP به ترتیب تعداد تکرارها برای به دست آوردن فایل خروجی، تعداد تکرارها بین نمونه‌گیری و تعداد دفعات نمونه‌گیری قبل از متوسط‌گیری از کمیت‌های میکروسکوپی هستند.



شکل ۳. روندنمای مورد استفاده‌ی حل‌کننده MCC-DSMC و رابطه‌های مورد استفاده برای هر مرحله.



شکل ۴. مقایسه‌ی نتیجه‌های به دست آمده از حل‌کننده‌ی MCC-DSMC با یافته‌های برد [۶].

۲.۴ هندسه و شرایط مرزی مورد شبیه‌سازی

با توجه به اعتبارسنجی حل‌کننده‌ی MCC-DSMC، پژوهش توسط این حل‌کننده در یک مختصات متقارن محوری برای یک روتور ماشین سانتریفوژ در حالت گردش صلب در محیط زبان برنامه‌نویسی فرترن صورت گرفت. سانتریفوژ مورد بررسی، به طول ۰/۲m و شعاع ۰/۱m بود که با سرعت زاویه‌ای ثابت 6000 rad s^{-1} یا 600 m s^{-1} در حال چرخش بود. سیال درون استوانه حاوی ۳۳/۳۳٪ مولی هیدروژن، ۳۳/۳۳٪ مولی آرگون و ۳۳/۳۴٪ مولی کریپتون به عنوان گازهای سبک، میانی و سنگین نسبت به یکدیگر انتخاب شد. تمامی شرایط مرزی انتخابی در روتور ماشین سانتریفوژ به صورت انتشاری در نظر گرفته شد و به دلیل تقارن زاویه‌ای جریان درون روتور ماشین سانتریفوژ در حالت گردش صلب و برگشت کامل، از مدل متقارن محوری استفاده شد. جریان حاصل از شبیه‌سازی با انتخاب مقدار بازه‌ی زمانی $1 \times 10^{-5} \text{ s}$ پس از $1,000,000$ تکرار به پایداری رسید. برای کمینه شدن خطای آماری و هم‌چنین نزدیک شدن جواب DSMC به جوابی از معادله‌ی بولتزمن، تعداد ذره‌های شبیه‌سازی باید به اندازه کافی زیاد باشد اما به دلیل افزایش زمان محاسباتی، نباید از ظرفیت سیستم محاسباتی تجاوز کند. تعداد کل مولکول‌ها در یکای حجم که به طور یکنواخت در محیط شبیه‌سازی قرار می‌گیرند برابر $1,406 \times 10^{21}$ (فشار اولیه ۶ pa) انتخاب شد و مقدار ضریب تکثیر (نسبت تعداد مولکول‌های واقعی به ذره‌های

$$n(r) = A \exp\left(-\frac{U(r)}{k_B T}\right) = A \exp\left(\frac{mr^r \omega^r}{rk_B T}\right) \quad (27)$$

که در آن ضریب نرمال‌سازی A از معادله‌ی زیر به دست می‌آید:

$$A = \frac{Nm\omega^r}{r\pi k_B T} \left[\exp\left(\frac{mR^r \omega^r}{rk_B T}\right) - 1 \right]^{-1} \quad (28)$$

با محاسبه‌ی A می‌توان چگالی عددی نسبت به شعاع یک ماشین سانتریفوژ را با رابطه‌ی زیر به دست آورد:

$$n(r) = \frac{Nm\omega^r}{r\pi k_B TL} \frac{\exp\left(\frac{mr^r \omega^r}{rk_B T}\right)}{\exp\left(\frac{mR^r \omega^r}{rk_B T}\right) - 1} \quad (29)$$

در این جا، N تعداد کل مولکول‌ها، m جرم مولکول گاز، M جرم مولکولی گاز (حاصل ضرب جرم مولکول در عدد آووگادرو)، ω سرعت زاویه‌ای، k_B ثابت بولتزمن، T دمای مطلق، L طول استوانه، R شعاع استوانه، R_G ثابت جهانی گازها و r مسیر شعاعی است.

۴. حل مدل و استخراج نتیجه‌ها

۱.۴ اعتبارسنجی حل‌کننده MCC-DSMC

برای اعتبارسنجی کد MCC-DSMC، یک شبیه‌سازی اولیه برای گازهای آرگون و هلیوم با چگالی عددی 10^{21} و دمای K ۲۰۰ انجام شد. شعاع ماشین سانتریفوژ فرضی ۱m و ارتفاع آن ۲۰cm در نظر گرفته شد که با سرعت محیطی 1000 m s^{-1} در حال چرخش بود. داده‌های به دست آمده از حل‌کننده MCC-DSMC با نتیجه‌های ارایه شده در حالت یک بعدی توسط برد مورد مقایسه قرار گرفتند. نتیجه‌های به دست آمده از تغییرات چگالی عددی در راستای طول شعاع برای هر جزء گازی آرگون و هلیوم با استفاده از حل‌کننده MCC-DSMC و نتیجه‌های یک بعدی برد در شکل ۴ باهم مقایسه شده‌اند. همان‌طور که مشاهده می‌شود نتیجه‌ها انطباق خوبی با یکدیگر دارند.

داشت که با تغییر جنس گاز به یک گاز سنگین تر مثل اورانیم هگزا فلورید و تلوریم هگزا فلورید، به علت انباشت شدید مولکول های گاز در دیواره ی روتور، فرض تغییرات خطی برای سرعت چرخشی برای کل شعاع قابل قبول نخواهد بود.

اعمال نیروی گریز از مرکز، باعث ایجاد شیب فشار در راستای شعاعی روتور می شود (شکل ۶) که مقدار آن در محور روتور برای گازهای هیدروژن، آرگون و کریپتون حدود یک مرتبه از فشار در دیواره ی روتور کم تر است؛ این امر به دلیل انباشت ذره ها به سمت دیواره با اعمال نیروی گریز از مرکز است.

همان طور که در شکل ۶ ملاحظه می شود نتیجه های فشار با روش تحلیلی (با توجه به رابطه ی (۲۳)) و DSMC دارای اختلاف با یکدیگر به خصوص در قسمت محوری روتور هستند. مقدار تغییرات شعاعی فشار کل داخل روتور براساس حاصل جمع فشار جزئی تک تک گازها به دست آمده است. به عبارت دیگر، در یک دما و نیروی گریز از مرکز ثابت می توان توزیع فشار جزئی را تنها از اختلاف جرم ذره ها به دست آورد. شکل ۷، فشار جزئی به دست آمده از روش تحلیلی و حل کننده ی MCC-DSMC با استفاده از مدل های کروی سخت تغییرپذیر و کروی نرم تغییرپذیر را نشان می دهد.

با توجه به شکل ۷ نتیجه های به دست آمده از مدل کروی سخت تغییرپذیر و مدل کروی نرم تغییرپذیر دارای انطباق خوبی هستند. در نتیجه می توان گفت که هر چند که مدل کروی نرم تغییرپذیر اثر خواص فیزیکی گازها را به طور واقع بینانه تری لحاظ می کند ولی یک مدل با درجه بالاتری از واقع بینی فیزیکی لزوماً منجر به تولید نتیجه های دقیق تر در یک شبیه سازی نمی شود و تمامی مدل های مولکولی، وابسته به پدیده شناسی خاص خود هستند [۱۰].

شبیه سازی شده) برابر $2,812 \times 10^{15}$ در نظر گرفته شد. در نتیجه، تعداد ذره های شبیه سازی شده در این پژوهش $50,000$ مولکول بود. از روش شبکه بندی ترکیبی استفاده شد و تعداد شبکه های مورد استفاده در شبیه سازی 300×300 بود. برای استفاده از برخوردهای همسایه در مرحله ی برخورد ذره ها با یکدیگر، از شیوه ی زیر شبکه استفاده و تعداد زیر شبکه های مورد استفاده در هر شبکه برابر ۴ در نظر گرفته شد. دمای اولیه ی مولکول های گاز 300 K و دمای تمامی دیواره ها 300 K در نظر گرفته شد. در محاسبات مربوط به کسر مولی یا غلظت گازهای چند جزئی، می باید از جرم، قطر و توان دمایی ضریب گرانروی صحیح مولکول های گازی استفاده کرد. با توجه به رابطه ی ۱۱، با تغییر مقدار α از یک برای مدل کروی سخت تغییرپذیر، مقدار قطر مرجع برای مدل کروی نرم تغییرپذیر نسبت به مدل کروی سخت تغییرپذیر مطابق رابطه ی ۱۱ مقدار کمی تغییر می کند. در جدول ۱ مقدارهای پارامترهای مولکولی گازهای هیدروژن، آرگون و کریپتون برای دو مدل کروی سخت تغییرپذیر و کروی نرم تغییرپذیر آورده شده است. همان طور که ملاحظه می شود مقدارهای پارامترهای α و d در دو مدل با یکدیگر دارای اختلاف مقداری هستند.

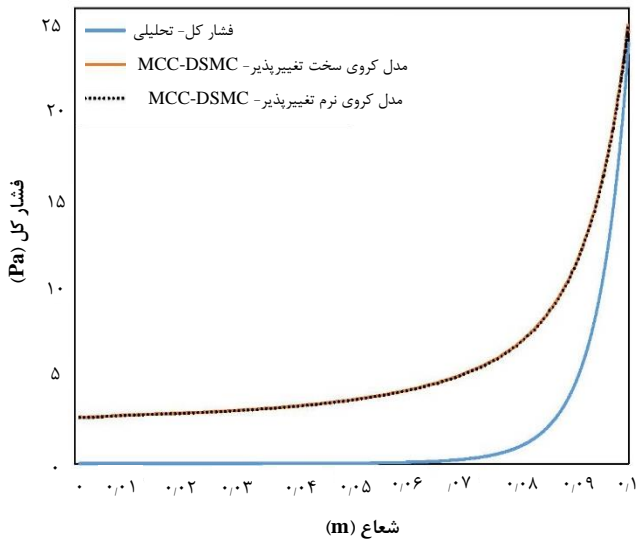
۳.۴ یافته ها

۳.۴.۱ تغییرات شعاعی جریان و غلظت داخل ماشین سانتریفیوژ

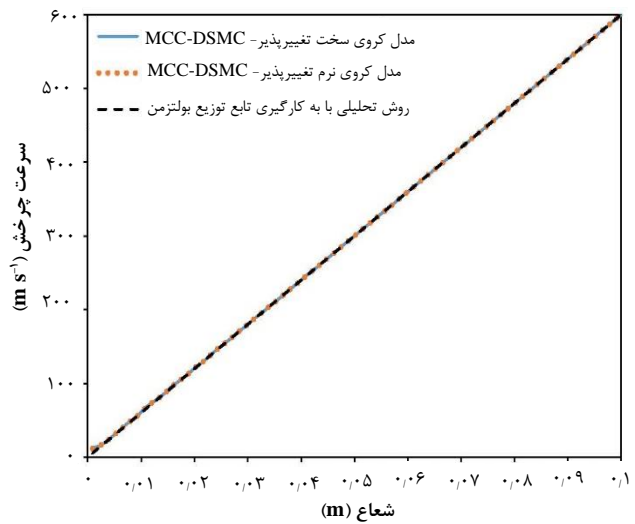
در حالت تعادل، جریان درون روتور مانند یک جسم صلب با سرعت چرخشی برابر با سرعت روتور می چرخد. در واقع با توجه به شکل ۵ نتیجه های به دست آمده از حل کننده ی MCC-DSMC، نشان دهنده ی رفتار خطی سرعت چرخشی برای گازهای انتخابی در این شبیه سازی است. این بدان معنا است که در مورد گازهای انتخابی، فرض $V = r\omega$ برای حل تحلیلی فرض درستی است، ولی می باید به این نکته توجه

جدول ۱. خواص مولکولی گازهای هیدروژن، آرگون و کریپتون برای مدل های کروی سخت تغییرپذیر و کروی نرم تغییرپذیر در شرایط استاندارد

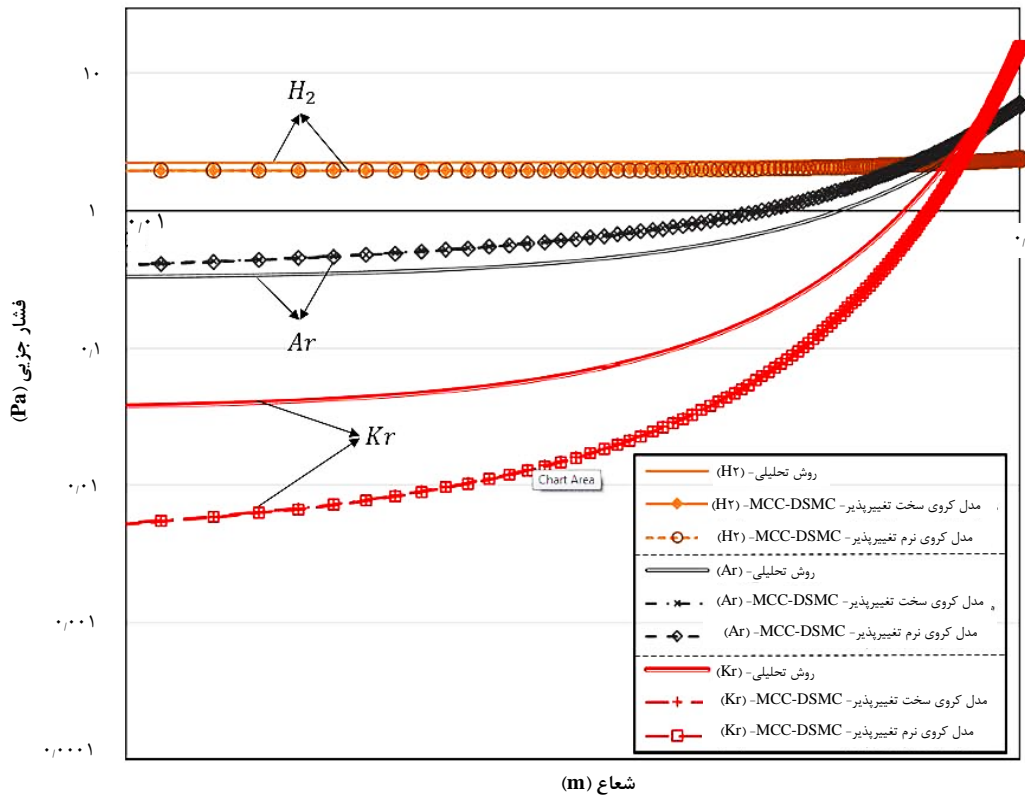
نام گاز	جرم مولکولی ($\times 10^{-27} \text{ kg}$)	قطر مولکولی ($\times 10^{-10} \text{ m}$)	توان دمایی ضریب گرانروی	پارامتر تطبیق مدل کروی نرم تغییرپذیر (α)	پارامتر تطبیق مدل کروی سخت تغییرپذیر (α)
هیدروژن (H_2)	۳،۳۴	۲،۹۲	۰،۶۷	۱،۳۵	۱
آرگون (Ar)	۶۶،۳	۴،۱۷	۰،۸۱	۱،۴	۱
کریپتون (Kr)	۱۳۹،۱	۴،۷۶	۰،۸۵	۱،۳۲	۱



شکل ۶. نمودار تغییرات فشار کل در راستای شعاعی روتور یک ماشین سانتریفوژ با استفاده از MCC-DSMC و روش تحلیلی.



شکل ۵. نمودار تغییرات سرعت چرخش گاز درون روتور برای گازهای هیدروژن، آرگون و کریپتون با استفاده از مدل‌های کروی سخت تغییرپذیر و کروی نرم تغییرپذیر - MCC-DSMC و روش تحلیلی.



شکل ۷. نمودار تغییرات شعاعی فشار درون روتور یک ماشین سانتریفوژ، به دست آمده از حل‌کننده MCC-DSMC و روش تحلیلی.

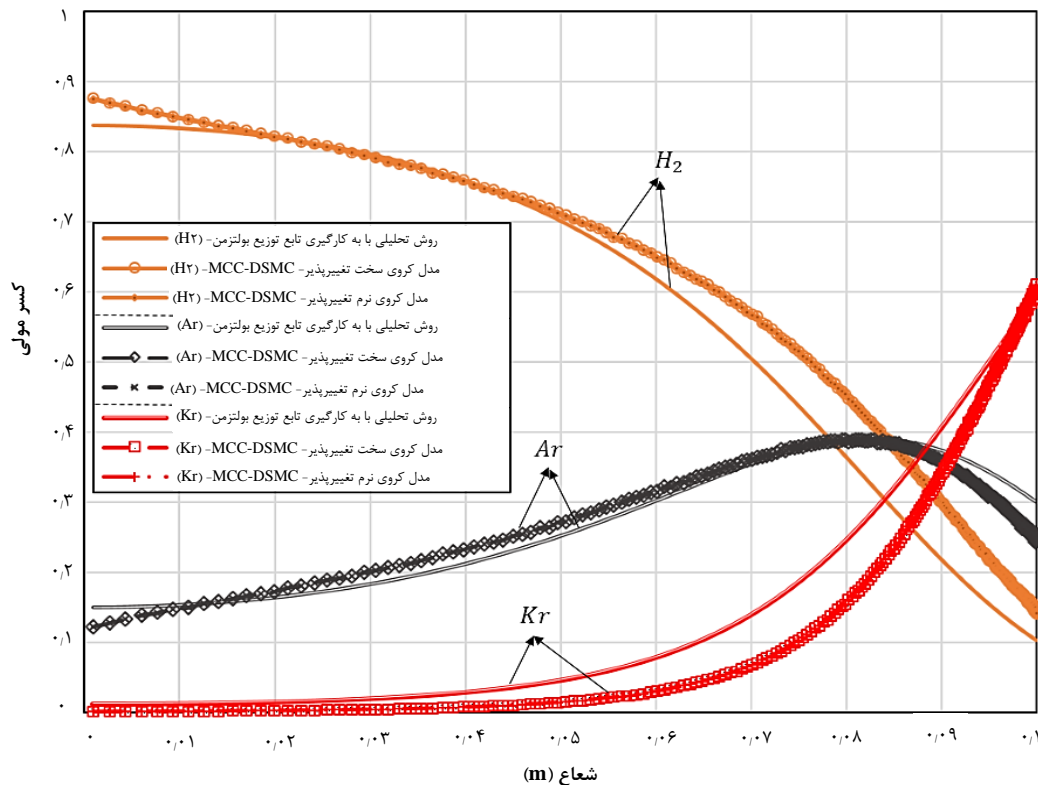
محاسبه شده است. تغییرات غلظت به دست آمده از روش تحلیلی با نتیجه‌های حل‌کننده MCC-DSMC مقداری اختلاف دارند که دلیل آن را می‌توان عدم در نظر گرفتن اثرهای واقعی سطح مقطع برخورد، اثر ضریب نفوذ و اثرهای ضریب گرانروی در محاسبه‌ی قطر مؤثر در روش تحلیلی

تغییرات شعاعی غلظت در ماشین سانتریفوژ، به دست آمده از شبیه‌سازی با حل‌کننده MCC-DSMC و از حل تحلیلی (با توجه به رابطه‌ی (۲۵)) در شکل ۸ نشان داده شده است. مقدار غلظت هر جزء در شبیه‌سازی مونت کارلو از نسبت تعداد مولکول‌های هر جزء به تعداد کل مولکول‌ها در هر شبکه

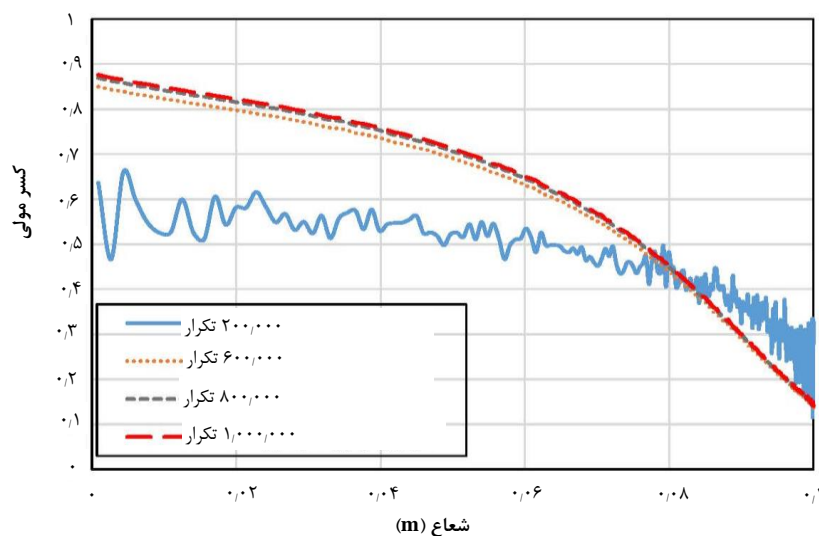
اطمینان حاصل کرد. همان گونه که در شکل ۹ نشان داده شده است نتیجه‌های تغییرات غلظت برای گاز هیدروژن به عنوان نمونه در زمان‌های اولیه‌ی اجرا دارای ناپایداری بالایی است که با گذشت زمان و رسیدن به تعادل، نوسان‌های غلظت کاهش می‌یابد به گونه‌ای که مقدار اختلاف بین تکرارهای ۸۰۰,۰۰۰ و ۱,۰۰۰,۰۰۰ ناچیز می‌شود؛ این نشان‌دهنده‌ی پایداری نتیجه‌های غلظت به دست آمده از شبیه‌سازی پس از ۱,۰۰۰,۰۰۰ تکرار است.

دانست که در روش DSMC تمامی این اثرها به صورت میکروسکوپی لحاظ شده است به همین دلیل نتیجه‌های به دست آمده از MCC-DSMC با نتیجه‌های به دست آمده از روش تحلیلی اختلاف دارند.

به دلیل این که روش DSMC یک روش گذرا بوده و پس از گذشت زمان مناسب به پایداری جریان و غلظت می‌رسد بنابراین می‌توان با استفاده از مقدارهای تغییر غلظت در هر تکرار نسبت به تکرار قبلی آن از رسیدن به جریانی پایدار



شکل ۸. نمودار تغییرات شعاعی غلظت گازهای درون روتور یک ماشین سانتریفوژ با استفاده از حل‌کننده‌ی MCC-DSMC و روش تحلیلی.

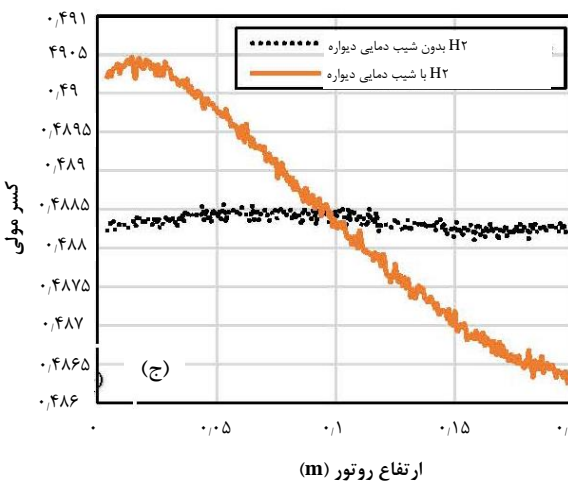
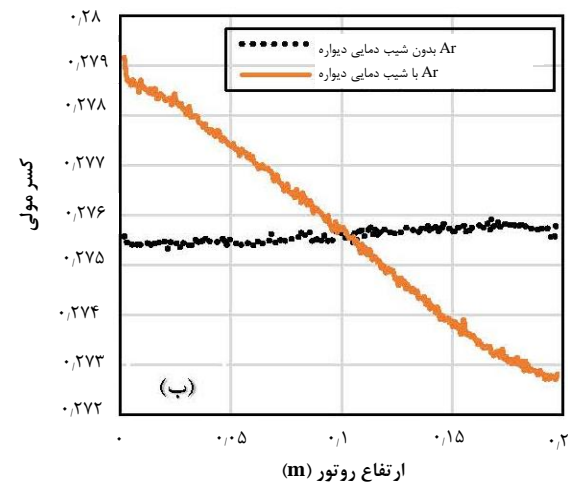
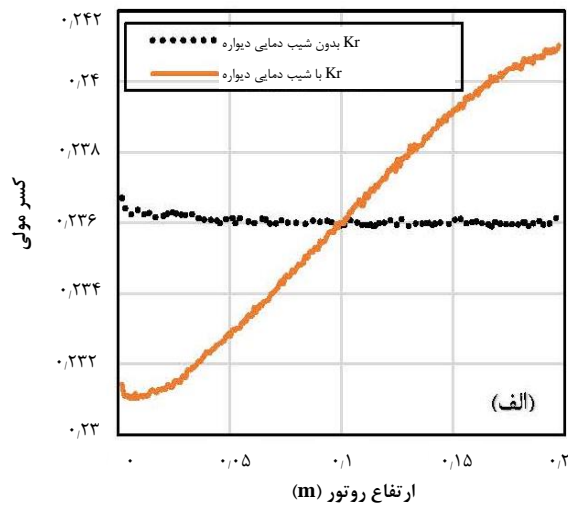


شکل ۹. تغییرات شعاعی غلظت برای گاز نمونه‌ی هیدروژن با تعداد متفاوت تکرار.

ناحیه منفی نشان‌دهنده حرکت روبه پایین جریان در راستای محوری روتور است.

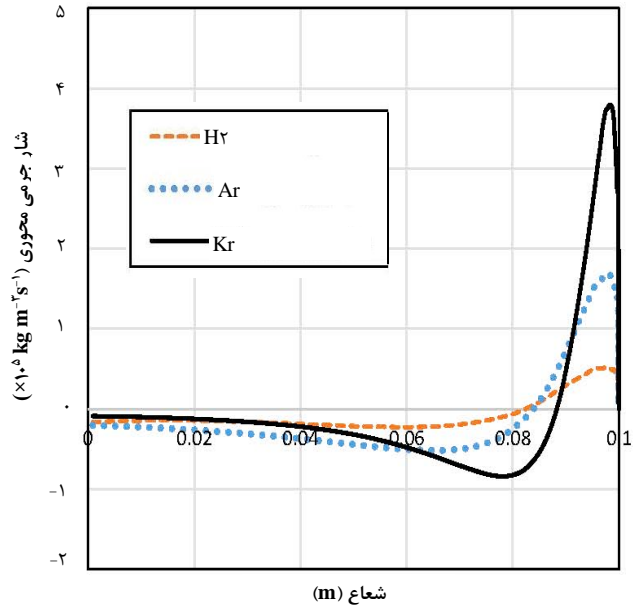
۲.۳.۴ تغییرات محوری غلظت در داخل ماشین سانتریفوژ

شکل ۱۰ تغییرات محوری غلظت در یک ماشین با جریان برگشت کامل را نشان می‌دهد. گازهای سبک‌تر هیدروژن و آرگون با اعمال یک شیب خطی مثبت 20° بر روی دیواره، دارای یک تغییرات غلظتی منفی در راستای محور روتور می‌شوند ولی گاز سنگین کریپتون دارای تغییرات محوری غلظتی مثبت است. در واقع به دلیل اعمال نیروی گریز از مرکز، جزء سنگین‌تر نزدیک دیواره و جزء سبک‌تر نزدیک محور روتور قرار می‌گیرد. اگر هیچ‌گونه محرک گرمایی بر روی روتور اعمال نشود و در نتیجه جریان محوری ایجاد نشود غلظت گازهای مختلف در مقطع‌های مختلف از ارتفاع روتور تغییر نمی‌کند. اعمال محرک خطی شیب دمایی بر روی دیواره‌ی روتور، باعث ایجاد یک جریان محوری می‌شود یا به عبارتی جریان شعاعی ایجاد شده تبدیل به یک جریان محوری می‌شود. در نتیجه اجزای سنگین نزدیک دیواره با اعمال یک شیب دمایی مثبت بر روی دیواره، به سمت بالا حرکت می‌کنند و اجزای سبک‌تر که در محور روتور قرار دارند با جریان برگشتی رو به پایین در نزدیکی محور به سمت پایین حرکت می‌کنند. بعد از یک دور کامل، ذرات سنگین که در مسیر رو به پایین جریان چرخشی قرار می‌گیرند با اعمال نیروی گریز از مرکز دوباره به سمت دیواره‌ی روتور حرکت می‌کنند و این فرایند باعث تجمع دوباره‌ی ذره‌های سنگین‌تر در کنار دیواره‌ی روتور می‌شود. به همین دلیل بعد از یک گردش کامل جریان محوری، ذره‌های سنگین‌تر در قسمت بالایی و نزدیک دیواره‌ی روتور تجمع بیشتری نسبت به قسمت پایینی روتور پیدا می‌کنند و همچنین تجمع ذره‌های سبک‌تر در قسمت پایین روتور بیش‌تر از قسمت بالای روتور می‌شود. نتیجه‌های این فرایند در شکل ۱۰ برای تغییرات محوری غلظت گازهای هیدروژن، آرگون و کریپتون در حالت بدون اعمال محرک گرمایی دیواره و با اعمال محرک گرمایی کپ‌ها و اختلاف خطی دمایی 20° بر روی دیواره‌ی روتور نشان داده شده است. شکل ۱۱ نمودار جریان محوری تشکیل شده به واسطه اعمال محرک گرمایی بر روی دیواره‌ها در مرکز محور روتور برای هر جزء گازی را نشان می‌دهد. همان‌طور که در شکل نیز مشخص است مقدار شار جرمی محوری برای جزء گازی کریپتون (به دلیل چگالی جرمی بالاتر) بیش‌ترین مقدار را به خود می‌گیرد و به ترتیب مقدار شار جرمی محوری برای اجزای سبک‌تر کم‌تر می‌شود. در واقع ناحیه‌ی مثبت نمودار نشان‌دهنده حرکت رو به بالای جریان کنار دیواره‌ی روتور و

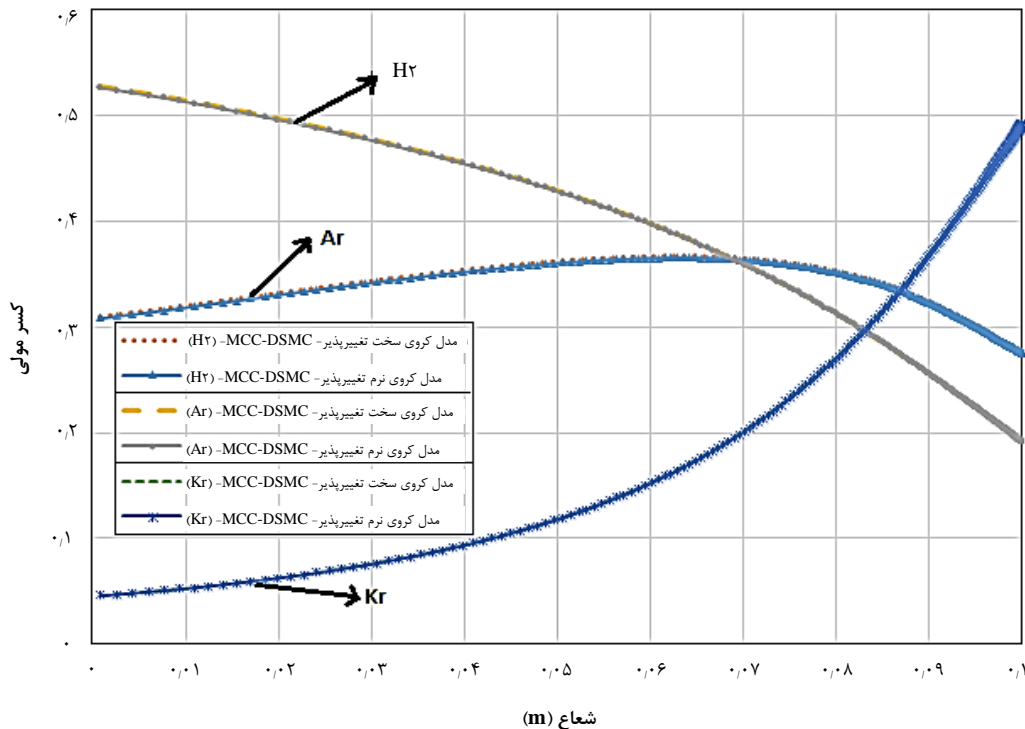


شکل ۱۰. میانگین تغییرات محوری غلظت در حالت بدون محرک گرمایی دیواره و با شیب خطی 20° بر روی دیواره برای گازهای مختلف: (الف) کریپتون (ب) آرگون (ج) هیدروژن.

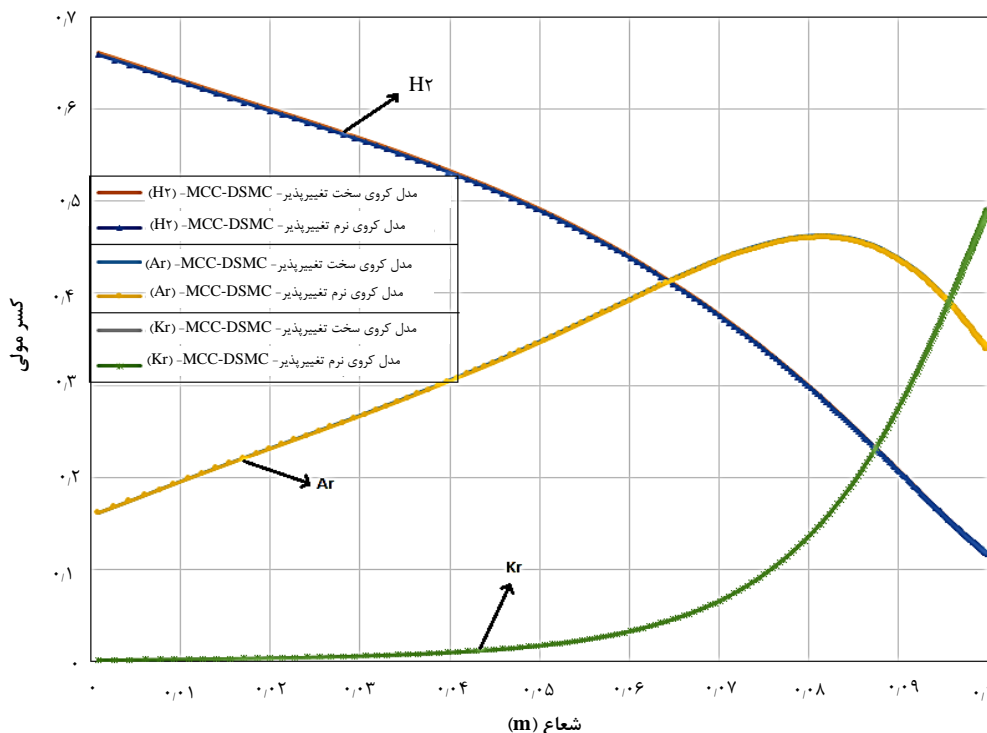
نظر به این که مدل کرووی سخت تغییرپذیر و مدل کرووی نرم تغییرپذیر با توجه به شرایط پدیده شناسی خود برای یک ماشین سانتریفوژ دارای اختلاف بسیار ناچیزی نسبت به یکدیگر هستند، در ادامه با توجه به تغییر در سرعت چرخشی روتور و دمای گاز، مقایسه‌ای بین این دو مدل انجام شد. با توجه به نتیجه‌ها، مشاهده شد که در شرایط دمایی و سرعت مختلف نیز این دو مدل دارای عملکرد بسیار مشابهی نسبت به یکدیگر هستند، در حالت اول (شکل ۱۲) سرعت روتور از 600 m s^{-1} به 400 m s^{-1} تقلیل پیدا کرده و کسر مولی اجزای گازی آن با استفاده از دو مدل کرووی سخت تغییرپذیر و کرووی نرم تغییرپذیر مقایسه شده است. در حالت دوم (شکل ۱۳) دمای گاز از 300 K به 350 K تغییر پیدا کرده و کسر مولی اجزای مربوط به سه جزء گازی برای مدل‌های کرووی سخت تغییرپذیر و کرووی نرم تغییرپذیر با یکدیگر مورد مقایسه قرار گرفته‌اند.



شکل ۱۱. نمودار شار جرمی محوری در مرکز محور روتور برای جزیهای گازی هیدروژن، آرگون و کریپتون.



شکل ۱۲. نمودار تغییرات شعاعی غلظت گازهای درون روتور یک ماشین سانتریفوژ، به دست آمده از دو مدل برخورد کرووی سخت تغییرپذیر و کرووی نرم تغییرپذیر در سرعت چرخشی دیواره تا 400 m s^{-1} .



شکل ۱۳. نمودار تغییرات شعاعی غلظت گازهای درون روتور یک ماشین سانتریفوژ، به دست آمده از دو مدل برخورد کروی سخت تغییرپذیر و کروی نرم تغییرپذیر در دمای ۳۵۰ K.

در شرایط دمایی و سرعت مختلف مورد بررسی قرار گرفت و نتیجه‌های به دست آمده از این دو مدل دارای انطباق خوبی با یکدیگرند که این نشان می‌دهد که استفاده از یک مدل واقع بینانه‌تر نمی‌تواند نتیجه‌های دقیق‌تری را نیز برای هر مسأله ارائه دهد. در یک ماشین سانتریفوژ با اعمال یک محرک گرمایی بر روی دیواره، می‌توان یک جریان محوری در درون روتور ایجاد کرد که این جریان محوری باعث تجمع مولکول‌های سنگین گاز در جهت حرکت جریان در کنار دیواره‌ی روتور تا بالای روتور می‌شود و به همین ترتیب اجزای سبک‌تر در جهت حرکت جریان در سمت محور روتور قرار می‌گیرند. در یک ماشین سانتریفوژ با اعمال یک محرک گرمایی بر روی دیواره‌ی روتور و کپ‌های آن، می‌توان علاوه بر جدایش شعاعی، به یک جدایش محوری نیز دست یافت که این امر باعث افزایش مقدار ضریب جداسازی و توان جداسازی در یک ماشین سانتریفوژ می‌شود. نشان داده شد اثر جدایش محوری با استفاده از روش DSMC به خوبی قابل ارزیابی است به طوری که امکان بررسی آن با استفاده از حل تحلیلی تابع توزیع بولتزمن امکان‌پذیر نیست. در واقع می‌توان گفت شبیه‌سازی هم‌زمان جریان و غلظت در سیستم‌های سه جزئی با استفاده از ابزار مولکولی DSMC از نوآوری‌های این مقاله است.

۵. نتیجه‌گیری

در یک ماشین سانتریفوژ جرم مولکولی گاز تأثیرهای چشم‌گیری در نحوه‌ی شکل‌گیری تغییرات غلظت داخل یک روتور دارد. با توجه به این که روش DSMC یک روش با دیدگاه مولکولی است بنابراین پس از به تعادل رسیدن جریان با به دست آوردن نسبت فراوانی هر جزء گازی به تمامی اجزا در هر شبکه‌ی حجمی، می‌توان کسر مولی آن جزء را در آن موقعیت از شبکه به دست آورد. در این مقاله حل‌کننده‌ی MCC-DSMC معرفی شد که در آن تغییرات شعاعی و محوری غلظت داخل روتور با استفاده از یک تکنیک شبکه‌ی انطباقی متناسب با تغییرات شعاعی فشار قابل محاسبه است. از حل تحلیلی تغییرات شعاعی غلظت در صورتی که تغییرات سرعت چرخشی گاز داخل روتور به صورت خطی باشد نیز می‌توان به نتیجه‌های قابل قبولی دست یافت. در حل تحلیلی تغییرات شعاعی غلظت، اثرهای واقعی سطح مقطع برخورد، ضریب نفوذ و اثرهای ضریب گرانروی در محاسبه‌ی قطر مؤثر لحاظ نمی‌شود ولی در حل‌کننده‌ی MCC-DSMC تمامی این اثرها به صورت میکروسکوپی لحاظ شده است. بنابراین نتیجه‌های به دست آمده از این حل‌کننده با نتیجه‌های حل تحلیلی برای تغییرات شعاعی غلظت در درون روتور متفاوت است. همچنین در این مقاله حل‌کننده‌ی MCC-DSMC با دو روش برخورد کروی سخت تغییرپذیر و کروی نرم تغییرپذیر

مراجع

1. J. Safdari, A. Noroozi, R. Toumari, *Parameters optimization of a counter-current cascade based on using a real coded genetic algorithm*, J. Sep. Scie. Tech. **515**, 44 (2017).
2. H. G. Wood, J. B. Morton, *Onsager's pancake approximation for the fluid dynamics of a gas centrifuge*, J. Fluid Mech, **20**, 299 (1980).
3. K. Cohen, *The Theory of Isotope Separation as Applied to the Large Scale Production of UTM*, J. Sep. Scie. and Tech. **18**, 103 (1951).
4. L. Soubbaramayer, *centrifugation*, J. App. Phys. **35**, 183 (1979).
5. W. Wagner, *A convergence proof for Bird's direct simulation Monte Carlo method for the Boltzmann equation*, J. Stat. Phys. **66**, 1011 (1992).
6. G. A. Bird, *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*, 2nd ed. (Clarendon, Oxford, 1994).
7. P. Roblin, F. Doneddu, in: *AIP Conference Proceeding*, Direct Monte-Carlo Simulations in a Gas Centrifuge (American Institute of Physics, 2001), pp.169-175.
8. M. Wang, Z. Li, *Gas mixing in micro channels using the direct simulation Monte Carlo methods*, Int. J. Heat and Mass Trans. **49**, 1696 (2005).
9. N. Pourmahmoud, *Rarefied Gas Flow Modeling inside Rotating Circular Cylinder*, American J. of Eng. Appl. Sci. **1** (1) 62 (2008).
10. G. A. Bird, *The DSMC method*, 1nd ed. (The University of Sydney, 2013).
11. J. Khadem, A. Abotalebi, *Investigation of internal flow of mixture gases inside a rotating cylinder by direct simulation monte carlo*, J. Inst. Mech. **51**, 270 (2015).
12. S. Pradhan, V. Kumaran, *The generalized Onsager model for the secondary flow in a high-speed rotating cylinder*, J. Fluid Mech. **686**, 140 (2011).
13. S. Pradhan, in: *Conference of Annual Meeting*, The generalized Onsager model and DSMC simulations of high-speed rotating flow in a multiply connected domain, (San Francisco, 2016), pp. 1021-1068.
14. S.R. Auvil, *A General Analysis of Gas Centrifugation with Emphasis on the Countercurrent Production Centrifuge*, PhD Thesis, Chemical Engineering, Michigan State University, 1974.
15. M. Benedict, *Nuclear Chemical Engineering*, 2nd ed. (Mcgraw-Hill Book Company 1981).