



## استفاده از روش دینامیک مولکولی نرم‌افزار LAMMPS در نرم‌افزار متن باز OpenFOAM جهت تحلیل یک ماشین سانتریفیوژ گازی

صادق یوسفی نسب<sup>\*</sup>، جواد کریمی ثابت، سید جابر صفدری

پژوهشکده چرخه سوخت هسته‌ای، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، سازمان انرژی اتمی ایران، صندوق پستی: ۸۴۸۶-۱۱۳۶۵، تهران- ایران

\*Email: syousefy@aeoi.org.ir

مقاله پژوهشی

تاریخ دریافت مقاله: ۱۴۰۰/۱۱/۲۹ تاریخ پذیرش مقاله: ۱۴۰۱/۴/۲۶

### چکیده

به منظور مدل‌سازی رفتار گاز درون روتور یک سانتریفیوژ گازی، یک ابزار قدرتمند مورد نیاز است که محدودیت‌های محاسباتی یک سانتریفیوژ گازی را به همراه قابلیت اعمال تمامی محرک‌ها در کل رژیم‌های جریان شکل گرفته برطرف کند. با توجه به مناسب بودن روش DSMC برای تمامی رژیم‌های جریان تشکیل شده در داخل ماشین سانتریفیوژ، در این مقاله برای تحلیل عملکرد جداسازی یک ماشین سانتریفیوژ در مختصات متقارن محوری از روش DSMC استفاده شده است. به این منظور، با بهره گرفتن از یک روش چند مقیاسی CFD-MD، ابتدا ضرایب انطباق مومنوم مورد نیاز برای استفاده از شرط مرزی سرسیگناتی- لمپیس- لرد استخراج و سپس بر اساس آن، رفتار گاز درون یک ماشین سانتریفیوژ با استفاده از روش DSMC مورد بررسی قرار گرفته است و مقدار توان جداسازی آن تعیین شده است. بر اساس مقایسه نتایج به دست آمده از شبیه‌سازی با نتایج تست تجربی، نشان داده شد که استفاده از روش ترکیبی ارائه شده در این مقاله برای تعیین مقدار ضرایب انطباق مومنوم مورد استفاده در شرط مرزی CLL در روش DSMC، می‌تواند مقدار دقت در تعیین مقدار توان جداسازی ماشین را تا ۸ درصد افزایش دهد.

**کلیدواژه‌ها:** سانتریفیوژ گازی، OpenFOAM، کد DSMC، روش چند مقیاسی، دینامیک مولکولی

## Using the molecular dynamics method of LAMMPS software in OpenFOAM open source software to analyze a gas centrifuge machine

S. Yousefi-Nasab\*, J. Karimi-Sabet, J. Safdari

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

Research Article

Received 18.2.2022, Accepted 17.7.2022

### Abstract

In order to modeling the gas behavior inside the rotor of a gas centrifuge, a powerful tool is needed to overcome the computational constraints of gas inside the centrifuge along with the ability to apply all drives at the all flow regimes. Due to the suitability of the DSMC method for all flow regimes formed inside the centrifuge, in this paper, the DSMC method is used to analyze the separation performance of a centrifuge in axisymmetric coordinates. For this purpose, using a multi-scale CFD-MD method, first the momentum accommodation coefficients required to use the Cercignani-Lampis-Lord boundary condition are extracted and then, based on that, the behavior of the gas inside a centrifuge machine is investigated using the DSMC method and the amount of separation power is determined. Based on the comparison of the simulation results with the experimental test results, it was shown that using the proposed hybrid method to determine the amount of momentum accommodation coefficients used in the CLL boundary condition of the DSMC method, can increase the accuracy of determining the amount of separation power of the machine up to 8%.

**Keywords:** Gas centrifuge, OpenFOAM, DSMC code, Multi-scale method, Molecular dynamics



## ۱. مقدمه

درون روتور یک ماشین سانتریفیوژ، 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. علاوه بر جریان شعاعی درون روتور، برای ایجاد یک جریان محوری و هم‌چنین برای افزایش جدایش در داخل روتور یک ماشین سانتریفیوژ از انواع مختلف محرک‌ها استفاده می‌گردد که در اثر وجود این محرک‌ها سرعت محوری درون روتور ایجاد می‌شود. انواع مختلف محرک‌ها در یک ماشین سانتریفیوژ، شامل محرک ورود و خروج جریان، محرک مکانیکی اسکوپ و بفل، محرک حرارتی دیواره و کپ‌ها می‌باشند [۱]. با توجه به عدم امکان انجام محاسبات عددی حجیم برای حل معادلات غیرخطی ناویر-استوکس در گذشته و از طرفی ضرورت بررسی رفتار گاز درون روتور و محاسبه پارامترهای جریان، از ابتدای توسعه سانتریفیوژ، روش‌های جایگزینی مانند روش اونساگر برای حل معادلات حاکم بر جریان گاز درون لایه استوارتسون روتور (لایه‌ای نازک کنار دیواره روتور که جرم غالب گاز در آن قرار دارد) ارائه شد [۲]. هم‌چنین برای حل معادله پیوستگی جرم و تعیین توزیع غلظت اجزاء ایزوتوپی یک گاز در راستای محوری، روش تقریب میانگین شعاعی توسط کهن ارائه گردید [۳]. با پیشرفت سیستم‌های محاسباتی، روش‌هایی هم‌چون روش دینامیک سیالات محاسباتی (CFD<sup>۱</sup>) جایگزین روش‌های اونساگر شدند [۴، ۵]. روش دیگری که هم‌زمان با پیشرفت سیستم‌های محاسباتی توسعه پیدا کرد روش شبیه‌سازی مستقیم مونت کارلو (DSMC<sup>۲</sup>) است [۶]. اکثریت گاز درون روتور یک ماشین سانتریفیوژ به دلیل سرعت چرخشی بالای روتور، در مجاورت دیواره روتور متراکم می‌شود و در نتیجه فشار گاز در محدوده مرکزی روتور به شدت افت پیدا می‌کند به گونه‌ای که بررسی این ناحیه با استفاده از حل عددی معادلات ناویر-استوکس معتبر نمی‌باشد. لذا با پیشرفت‌های اخیر سیستم‌های محاسباتی، از روش DSMC در شبیه‌سازی رفتار گاز رقیق درون ماشین‌های سانتریفیوژ نیز استفاده شده است [۷-۱۰]. علی‌رغم کاربرد مناسب روش DSMC برای شبیه‌سازی رفتار گاز رقیق درون ماشین‌های سانتریفیوژ نسل جدید، استفاده از شرط مرزی دقیق و مناسب نیز یک چالش همیشگی در این روش محسوب می‌شود. به همین دلیل در این مقاله سعی بر آن شد که برای شبیه‌سازی یک ماشین

سانتریفیوژ، از شرط مرزی سرسیگناتی-لمپیس-لرد (CCL<sup>۳</sup>) استفاده شود [۱۱، ۱۲]. این شرط مرزی دقیق‌ترین شرط مرزی برای استفاده در این روش می‌باشد که همواره نیاز به تعیین ضرایب انطباق مومنوم بین مولکول‌های گاز و سطح دارد. این ضرایب وابسته به جنس گاز، جنس سطح، زبری سطح و سرعت می‌باشند که به همین دلیل نیاز است برای هر سطح و گاز، مقدار این ضرایب تعیین شوند. برای استخراج این ضرایب می‌توان از یک روش چند مقیاسی به نام روش ترکیب اتمی-پیوستگی (HAC<sup>۴</sup>) با ترکیب دو روش CFD و دینامیک مولکولی (MD) استفاده کرد.

اولین روش مدل HAC برای سیالات چگال توسط آکنل و تامسون برای مطالعه جریان کوئیت یک‌بُعدی انجام شد [۱۳]. آن‌ها ناحیه محاسباتی را به دو ناحیه پیوسته و اتمی از طریق یک اتصال حل ترکیبی (HSI<sup>۵</sup>) تقسیم‌بندی کردند که HSI در واقع یک مرز بافر بود که شرایط مرزی را برای هر روش در یک بُعد فراهم می‌ساخت. در این مطالعه دو ناحیه پیوستگی (C) و اتمی (P) در یک ناحیه مشترک (O) با یکدیگر کوپل شدند. در این ناحیه مشترک، اطلاعات مربوط به مرز ناحیه C توسط ناحیه P و از طریق میانگین‌گیری زمانی و مکانی فراهم شد و اطلاعات مربوط به مرز ناحیه P توسط تکنیک محدودیت دینامیک‌های لاگرانژی<sup>۶</sup> (CCLD) فراهم می‌شد. این تکنیک میانگین سرعت‌های اتمی در هر بین<sup>۷</sup> را برابر با میانگین سرعت‌های ناحیه پیوستگی در آن بین قرار می‌دهد. بعداً هادجیکانستنتو و پاترا روش ترکیبی استفاده شده توسط آکنل را برای یک سیستم دو‌بُعدی توسعه دادند. آن‌ها برای عبور فلاکس جرمی از طریق مرز بین ناحیه C و ناحیه P، یک مخزن ذرات را برای ناحیه C تعبیه کردند [۱۴]. علاوه بر این، برای اطمینان از انطباق بین ناحیه C و ناحیه P نیز از روش تکرارشونده شوارتز<sup>۸</sup> استفاده کردند. این روش دو‌بُعدی بعدها توسط لی و همکارانش توسعه داده شد. آن‌ها با استفاده از یک روش آماری برای پیش‌بینی میدان ترمودینامیکی، مشخصات میکروسکوپی جریان از قبیل چگالی، سرعت و دما را تعیین کردند. پس از این، با استفاده از شبیه‌سازی یک جریان کوئیت و پویزل، یک روش ترکیبی از طریق کوپل شارهای تکانه جرمی برای مدل‌سازی یک جریان تراکم‌ناپذیر توسط فلکوی مطرح شد

3. Cercignani-Lampis-Lord

4. Hybrid Atomistic-Continuum

5. Hybrid Solution Interface

6. Crude Constraint Lagrangian Dynamics

7. Bin

8. Schwarz Iterative

Journal of Nuclear Science and Technology

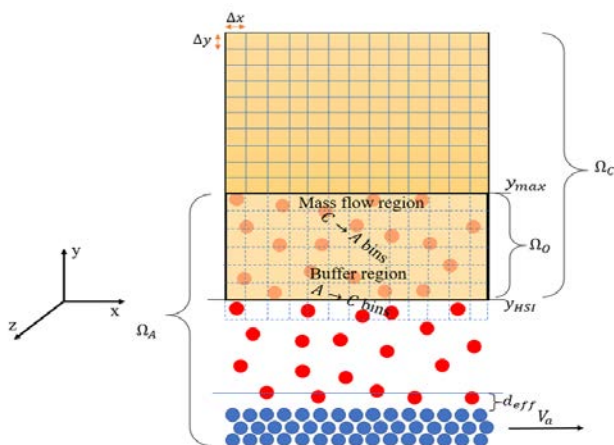
1. Computational Fluid Dynamic

2. Direct Simulation Monte Carlo



دو صفحه موازی حرکت کرده و صفحه بالایی ثابت و صفحه پایینی آن با یک سرعت ثابت در حال حرکت است. این شبیه‌سازی به دلیل حرکت یک سطح آن، نتایجی مشابه با رفتار گاز کنار دیواره روتور را استخراج می‌کند. از روش دینامیک مولکولی برای شبیه‌سازی قسمت پایینی محدوده آن استفاده شده است تا بتوان اثر سرعت خطی مرز پایینی را با دقت بالایی بر میدان جریان مشاهده کرد. برای مابقی فضای جریان کوئیت نیز از روش عددی حل معادلات ناویراستوکس استفاده شده است [۱۵]. اطلاعات مربوط به هر یک از این دو روش نیز توسط یک ناحیه مشترک واقع در قسمت میانی آن‌ها رد و بدل می‌شود. در شکل ۱ شماتیکی از جریان کوئیت مورد شبیه‌سازی و نحوه تقسیم‌بندی آن نشان داده شده است.

همان‌طوری که در شکل ۱ مشاهده می‌شود مرز بین دو محدوده اتمی و پیوستگی HSI نامیده می‌شود که مبدأ آن نقطه  $y = 0$  انتخاب شده است. محدوده اتمی شامل دیواره جامد و بخشی از سیال بالای آن است و محدوده پیوستگی نیز برای محدوده بالای مرز HSI تا دیواره بالایی انتخاب شده است. اندازه محدوده اشتراک نیز از یک مقداری کوچک‌تر نمی‌تواند انتخاب شود چون انتخاب کوچک‌تر ناحیه اشتراک موجب واگرایی حل روش ترکیبی می‌شود. برای حل محدوده اتمی با استفاده از روش دینامیک مولکولی، از یک جعبه شبیه‌سازی سه‌بعدی استفاده شده است و این در حالی است که برای شبیه‌سازی محدوده پیوستگی از حل عددی معادلات ناویراستوکس در مختصات دو‌بعدی استفاده شده است. در ادامه به نحوه تجزیه محدوده مورد شبیه‌سازی به سه ناحیه اتمی، پیوستگی و اشتراک پرداخته می‌شود و نحوه عملکرد هر ناحیه تشریح داده می‌شود.



شکل ۱. تقسیم‌بندی محدوده شبیه‌سازی و شماتیکی از جزئیات ناحیه اشتراک.

[۱۵]. سپس این روش کوپل فلاکس‌ها توسط بوسکالیونی و کاونی توسعه داده شد. آن‌ها روش کوپل انرژی را معرفی کردند و یک جریان تراکم‌پذیر را با دقت بالایی شبیه‌سازی کردند [۱۶]. علاوه بر این، نی و همکارانش نیز یک روش کوپلینگ لاگرانژی جدید را برای فراهم کردن شرایط مرزی ناحیه میکروسکوپی بر اساس مشخصات میدان جریانی میکروسکوپی معرفی کردند. آن‌ها از این روش برای مطالعه جریان کوئیت یک‌بعدی، جریان گوشه منفرد<sup>۱</sup> و جریان کوئیت استفاده کردند [۱۷-۱۹].

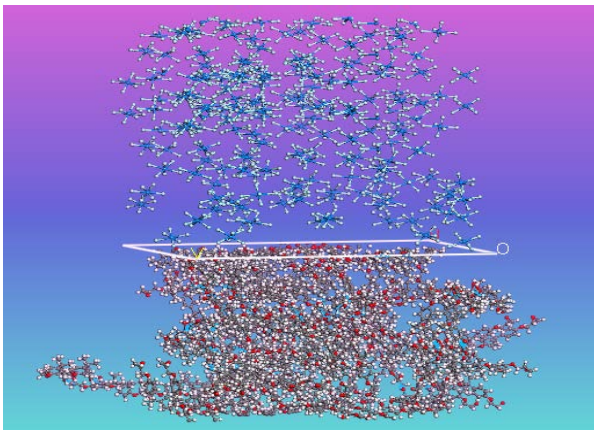
در این مقاله با بهره گرفتن از یک روش ترکیبی HAC، مقدار ضرایب انطباق مومنوم برای برهم‌کنش گاز هگزافلوراید اورانیم با یک دیواره کامپوزیتی روتور تعیین و سپس با بهره گرفتن از شرط مرزی سرسیگنالی-لمپس-لرد، رفتار گاز رقیق درون روتور یک ماشین سانتریفیوژ مورد با استفاده از روش DSMC مورد بررسی قرار گرفته است و در انتها بر اساس آن، مقدار توان جداسازی ماشین با نتایج تست تجربی مورد مقایسه قرار گرفته است. حل گر HAC نوشته شده در این مطالعه قابلیت بهره گرفتن از خروجی‌های مربوط به نرم‌افزار متریالزاستودیو را به صورت یک دیتافایل برای حل گر لمپس موجود در حل گر HAC دارد. در نتیجه این حل گر قابلیت شبیه‌سازی چندمقیاسی سیال اطراف هر سطح با هر شرایط از پیچیدگی را دارد. این یکی از مهم‌ترین تفاوت‌های حل گر نوشته شده با سایر مطالعات انجام شده می‌باشد. همچنین بهره گرفتن از ضرایب انطباق مومنوم استخراجی از حل گر HAC در شرط مرزی CLL برای شبیه‌سازی گاز درون روتور یک ماشین سانتریفیوژ با روش DSMC نیز برای اولین بار در این مقاله انجام شده است.

## ۲. روش HAC

روش ترکیبی اتمی-پیوستگی (HAC) استفاده شده در این مقاله بر اساس کار انجام شده توسط کاسدن و همکارانش است [۲۰]. با این تفاوت که روش ناویراستوکس در این مقاله برای حل جریان پیوستگی تراکم‌پذیر و مغشوش مورد استفاده قرار گرفته است. برای استفاده از یک روش ترکیبی HAC، محدوده مورد شبیه‌سازی به سه قسمت ناحیه اتمی ( $\Omega_A$ )، ناحیه پیوستگی ( $\Omega_C$ )، و ناحیه مشترک ( $\Omega_0$ ) تقسیم‌بندی شده است. روش ترکیبی HAC برای شبیه‌سازی جریان کوئیت مورد استفاده قرار گرفته است به نحوی که جریان گاز از فضای بین

### 1. Singular Corner Flow





شکل ۲. ناحیه اتمی مورد شبیه‌سازی با استفاده از روش دینامیک مولکولی جهت به‌کارگیری در حل گر HAC.

جدول ۱. پارامترهای لنارد جونز مورد نیاز برای برهم‌کنش بین گاز هگزافلوراید اورانیم با سطح DGEBA/TETA

اتم	$\sigma$ (Å)	$\epsilon$ (kcal/mol)	جرم (a.m.u)
F - F	۳,۲۸۵	۰,۳۰۵	۱۸,۹۹۸۴
U - U	۵,۹۶۷	۰,۵۰۷۸	۲۳۸,۰۲۸۹۱
N - N	۳,۵۲۹۰	۰,۳۳۳۰	۱۴,۰۰۶۷
C = C	۳,۹۱۵	۰,۰۶۸	۱۲,۰۱
C - C	۳,۸۵۴	۰,۰۶۲	۱۲,۰۱
O = O	۳,۴۳	۰,۱۹۲	۱۶
O - O	۳,۳	۰,۰۸	۱۶
H - H	۲,۸۷۸	۰,۰۲۳	۱,۰۰۸

مقدار شعاع قطع مناسب نیز بر اساس مرجع [۲۲] برابر با  $3\sigma_{gs}$  در نظر گرفته شده است. برای سطح پلیمری نیز اثر برهم‌کنش‌های پیوندی نیز می‌بایستی در توابع در نظر گرفته شود. به همین دلیل از تابع میدان نیروی pcff استفاده شده است.

## ۲.۲ ناحیه پیوسته

جریان کوئیت با یک رژیم پیوسته و به همراه یک سطح متحرک با ماخ بالا ( $Ma > 6$ )، یک جریان تراکم‌پذیر، ویسکوز، نیوتنی و توربولانس را ایجاد می‌کند. در محدوده پیوستگی مطابق با روابط (۲) تا (۴)، معادلات بقای جرم، مومنتوم و انرژی برای جریان‌های تراکم‌پذیر در یک چارپوب اولیری استفاده می‌شوند [۲۳]. در این مقاله برای حل دو بُعدی معادلات ناویراستوکس از حل گر sonicFoam در نرم‌افزار OpenFOAM استفاده شده است. این حل گر مناسب برای جریان پیوسته در شرایط گذرا و سیال فراصوت/ مافوق صوت، مغشوش و تراکم‌پذیر است.

## ۱.۲ ناحیه اتمی

ناحیه اتمی با استفاده از روش دینامیک مولکولی مورد شبیه‌سازی قرار می‌گیرد. دینامیک مولکولی را می‌توان به طور خلاصه به صورت حل عددی و گام به گام معادله حرکت نیوتون برای یک سیستم بسیار ذره‌ای تعرف کرد. دینامیک مولکولی شکلی از شبیه‌سازی کامپیوتری است که در آن اتم‌ها و مولکول‌ها اجازه دارند برای یک دوره از زمان تحت قوانین شناخته شده فیزیک باهم برهم‌کنش کنند و چشم‌اندازی از حرکت اتم‌ها بدهند.

در این مقاله پیکربندی اولیه مولکول‌ها با استفاده از نرم‌افزار متریالزاستودیو ۱۷ تعیین شده است. به گونه‌ای که سیال کاری در این مطالعه گاز چگال هگزافلوراید اورانیم انتخاب شده است که در مجاورت با سطح پلیمری DGEBA/TETA<sup>۱</sup> قرار گرفته است. بدین منظور ابتدا در نرم‌افزار متریالزاستودیو، مونومرهای DGEBA ترسیم و سپس پیوندهای اپوکسی دو حلقه انتهایی آن شکسته و هر مولکول اکسیژن آن با یک مولکول کربن مونومر TETA (عامل پخت) پیوند داده می‌شود. این فرایند به اندازه‌ای ادامه پیدا می‌کند که جعبه شبیه‌سازی به ابعاد  $10 \times 10 \times 5$  نانومتر برسد. سپس مولکول‌های هگزافلوراید اورانیم نیز در ساختار مولکولی خود ترسیم و تعداد ۳۰۰ مولکول آن در مجاورت با سطح پلیمری ایجاد شده قرار داده شد. شکل ۲ شماتیکی از ناحیه اتمی مورد نظر را نشان می‌دهد.

پتانسیل لنارد جونز جابه‌جا شده<sup>۲</sup> برای برهم‌کنش بین مولکول‌های گاز و هم‌چنین برای برهم‌کنش بین مولکول‌های گاز با سطح انتخاب شده است. پتانسیل به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\Phi^{LJ}(r_{ij}) = \begin{cases} 4\epsilon \left[ \left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^6 - \left(\frac{\sigma}{r_c}\right)^6 + \left(\frac{\sigma}{r_c}\right)^6 \right], & r < r_c \\ 0, & r > r_c \end{cases} \quad (1)$$

که  $r_{ij}$  فاصله بین ذرات  $i$  و  $j$ ،  $r_c$  شعاع قطع،  $\epsilon$  عمق چاه پتانسیل و  $\sigma$  فاصله پتانسیل صفر می‌باشند. مقدار پارامترهای لنارد-جونز برای برهم‌کنش بین گاز هگزافلوراید اورانیم با سطح پلیمری DGEBA/TETA نیز در جدول ۱ آورده شده است [۲۱].

1. Diglycidyl Ether Bisphenol A/Triethylenetetramine  
2. Shifted Lennard-Jones Potential



که  $\dot{r}_k$  سرعت  $k$ امین اتم در بین  $N_i$  تعداد اتمها در بین  $i$  و برکت نشان دهنده میانگین زمانی است. در این حالت سرعت روی یک تعدادی از بازه های زمانی مربوط به ناحیه اتمی که معادل با یک پیش روی زمانی برای ناحیه پیوسته است میانگین گیری می شود. برای این منظور از روش میانگین نمونه گیری CAM [۲۴] روی  $S$  نقطه نمونه گیری استفاده می شود. HSI بخشی از ناحیه پیوسته است که اطلاعات مرزی را از ناحیه اتمی دریافت می کند. به دلیل ماهیت آماری در این اطلاعات، شرایط مرزی در مرز منطقه پیوسته ممکن است به طور دقیق بقای جرم را ارضا نکند. برای رفع این مشکل راهکار پیشنهادی توسط وانگ و همکارانش که رایج ترین راهکار است، به صورت زیر اعمال شده است [۲۵]:

$$(V_{HSI} \cdot n)_{corrected} = V_{HSI} \cdot n - \frac{\int_{\phi} V_{\phi} \cdot nds}{\int_{HSI} ds} \quad (9)$$

که  $V_{HSI}$  سرعت محاسبه شده روی HSI با استفاده از تکنیک نمونه گیری CAM،  $n$  بردار نرمال به مرز،  $ds$  یک المان از مرز و  $\phi$  کل مرز ناحیه پیوسته می باشند.

### ۲.۳.۲ منطقه $C \rightarrow A$

در منطقه  $C \rightarrow A$  یک لایه کنترلی ساخته می شود تا سازگاری های مومنتوم و دمایی بین محدوده های اتمی و پیوستگی را دریافت کند. سازگاری مومنتوم بیان می کند که میانگین مومنتوم در ناحیه مولکولی می بایستی با مومنتوم ماکروسکوپی لحظه ای از ناحیه پیوستگی برابر باشد. به عبارتی می توان گفت میانگین فضایی مومنتوم با مومنتوم در حجم کنترل مشخص برابر است. منطقه  $C \rightarrow A$  سرعت سلول های شبکه پیوستگی را به سرعت اتم های واقع شده در آنها از طریق تکنیک CCLD منتقل می کند و شرایط مرزی برای ناحیه اتمی را فراهم می سازد. مشابه با ناحیه  $A \rightarrow C$ ، ناحیه  $C \rightarrow A$  نیز مطابق با سلول های شبکه ناحیه پیوستگی می تواند به بین هایی در جهت  $x$  و  $y$  تبدیل شود. سرعت سیال در هر بین  $i$  بر اساس میانگین مقدار سرعت اتم های قرار گرفته در آن بین قابل محاسبه است [۲۶]:

$$U_i = \frac{\langle m_j V_j \rangle}{M_i} \quad (10)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U) = 0 \quad (2)$$

$$\frac{\partial (\rho U)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U U) = \nabla p + \nabla \cdot \underline{\tau} \quad (3)$$

$$\frac{\partial (\rho E)}{\partial t} + \nabla \cdot [U (\rho E)] + \nabla \cdot q + \nabla \cdot [(pI - \underline{\tau})U] = 0 \quad (4)$$

که  $\rho$  چگالی جرمی،  $U$  سرعت سیال،  $p$  فشار،  $\underline{\tau}$  تانسور تنش ویسکوز،  $E$  انرژی کل و  $q$  فلاکس حرارتی می باشند. بر اساس فرض پیشنهادی بوسینسک، تانسور تنش را می توان به صورت زیر نشان داد:

$$\underline{\tau} = \nu \mu dev(\underline{D}) \quad (5)$$

$$\underline{D} = \frac{1}{2} [\nabla U + (\nabla U)^T] \quad (6)$$

$$dev(\underline{D}) = \underline{D} - \frac{1}{3} tr(\underline{D})I \quad (7)$$

که  $\mu$  ویسکوزیته دینامیکی، و  $\underline{D}$  تانسور گرادیان تغییر شکل،  $dev(\underline{D})$  جز انحراف آن و  $I$  تانسور واحد می باشد.

### ۳.۲ ناحیه مشترک $(\Omega_c)$

همان طوری که در شکل ۱ نشان داده شده است، ناحیه اشتراک بین دو محدوده پیوستگی و اتمی به چهار منطقه تقسیم می شود: (۱) منطقه  $C \rightarrow A$ ، (۲) منطقه بافر، (۳) منطقه  $A \rightarrow C$  و (۴) منطقه جریان جرمی.

### ۱.۳.۲ منطقه $A \rightarrow C$

منطقه  $A \rightarrow C$  در بیرونی ترین مرز محدوده پیوستگی قرار دارد و اولین منطقه از ناحیه اشتراک محسوب می شود که در مرکز مرز  $y_{HSI}$  واقع شده است. ناحیه پیوسته، میانگین زمانی سرعت اتم های منطقه  $A \rightarrow C$  را همانند یک شرط مرزی سرعت جدید دریافت می کند. برای انطباق بین سلول های شبکه ناحیه پیوسته و اتمی، می توان این ناحیه را به تعداد مشخصی بین در دو جهت  $x$  و  $y$  تقسیم بندی کرد. برای بین  $i$ ام، شرط مرزی برای سرعت مربوط به ناحیه پیوسته  $u$  از میانگین سرعت اتم های بین  $i$ ام و به صورت زیر تعیین می شود:

$$u_i = \left\langle \frac{1}{N_i} \sum_k^{N_i} \dot{r}_k \right\rangle \quad (8)$$



پیش‌روی زمانی ناحیه پیوسته می‌باشد.  $N^{A-C}$  تعداد مولکول‌ها درون حجم کنترل ناحیه اتمی و پیوسته، و نیروی  $f$  نیرویی است که از تابع پتانسیل به دست می‌آید. عبارت دوم نشان‌دهنده نوسان ذاتی در سیستم مولکولی برای تسریع یا کاهش سرعت مولکول‌هاست. در برخی از تحقیقات ترم دوم

$$\text{فقط به صورت } \frac{f_j}{m_j} \text{ بیان شده است [۲۹، ۱۳].}$$

### ۳.۳.۲ ناحیه بافر

این ناحیه برای به حداقل رساندن بازخورد بین دو ناحیه ارتباطی مورد استفاده قرار می‌گیرد. هر جایی که احتمال وجود نوسانات بین دو ناحیه وجود داشته باشد استفاده از ناحیه بافر می‌تواند موجب تقلیل این نوسانات شود. معمولاً ناحیه بافر بین نواحی  $A \rightarrow C$  و  $C \rightarrow A$  یا ناحیه کنترل و ناحیه  $A \rightarrow C$  قرار می‌گیرد. در این ناحیه هیچ‌گونه عملیات درج یا حذف ذرات و محدودیت یا ارتباطی در هر دو حوزه وجود ندارد. یکی از چالش‌های مهم در استفاده از ناحیه بافر انتخاب عرض این ناحیه می‌باشد. عرض این ناحیه می‌بایستی برای کاهش حجم محاسبات مرتبط با محدوده اشتراک کوچک انتخاب شود، درحالی‌که برای جلوگیری از اتصال کوتاه بین دو ناحیه و هم‌چنین برای ریلکس کردن نتایج نواحی اتمی و پیوسته، می‌بایستی به اندازه کافی نیز بزرگ باشد. بر اساس مرجع [۲۰]، انتخاب ناحیه بافر با عرض حدود ۳۰ درصد ناحیه اشتراک، هر برهم‌کنش بین نواحی  $A \rightarrow C$  و  $C \rightarrow A$  را به حداقل مقدار ممکن نزدیک می‌کند. بر همین اساس در این مطالعه نیز اندازه عرض بافر همواره ۳۰ درصد ناحیه اشتراک انتخاب شد.

### ۴.۳.۲ ناحیه جریان جرمی

بقای جرم درون محدوده اتمی همواره از طریق حذف و یا اضافه کردن ذرات در هر بازه زمانی و بر اساس میدان جریان پیوسته حفظ می‌شود. با توجه به این‌که شرط مرزی استفاده شده در  $y_{\max}$  برای جلوگیری از فرار آزادانه اتم‌ها از نوع غیردوره‌ای<sup>۱</sup> و شرط مرزی‌های چپ و راست جعبه شبیه‌سازی از نوع دوره‌ای (ذرات خروجی از جعبه با سرعت یکسان از طرف دیگر وارد محدوده شبیه‌سازی می‌شوند) انتخاب شده‌اند، بنابراین تعداد اتم‌ها در ناحیه اتمی می‌تواند فقط از طریق عملیات درج و حذف اتم‌ها تغییر کنند. تعداد اتم‌های درج شده یا حذف شده از

که در آن سمت چپ میانگین مکانی تکانه است و سمت راست نشان‌دهنده تکانه در حجم کنترل خاص است. از طریق تکنیک CCLD سرعت جدید اتم‌ها واقع شده در بین اتم ناحیه  $A \rightarrow C$  به صورت زیر تعیین می‌شود:

$$\dot{r}_j^a = v_j^a + \xi^a \left[ u_j^a - \frac{1}{N_i} \sum_k^{N_i} v_k^a \right] \quad (11)$$

که  $N_i$  تعداد اتم‌ها در بین اتم،  $a$  جهت‌های  $x, y, z$  و  $\xi$  قدرت محدودیت می‌باشند. در انتها نیز سرعت اتمی  $j$  ( $V_j$ ) با اجرای انتگرال‌گیری عددی MD از شتاب‌های اتمی ( $\ddot{r}$ ) به صورت زیر تعیین می‌شود:

$$\ddot{r}_j = -\frac{1}{m} \frac{d}{dr} \sum_{k \neq j} \phi^{LJ}(r_{kj}) \quad (12)$$

کاسدن و لوکس [۲۰]، نی و همکارانش [۱۷]، پن و همکارانش [۲۷] و وانگ و همکارانش [۲۸] مقدار  $\xi$  را برای حذف لگ زمانی مرتبط با مقادیر بین ۰ و ۱، برابر با یک در نظر گرفتند. در این مقاله مقدار  $\xi$  برابر با یک در نظر گرفته شد. مقدار  $\xi$  برابر با صفر به نشانه حذف فرایند کوپلینگ می‌باشد. به منظور رسیدن به یک سازگاری مومنوم بین دو ناحیه اتمی و پیوسته، یک نیروی خارجی متناسب با اختلاف مومنوم در مکان یکسان بین یکی از سطح پیوسته و دیگری از محدوده اتمی روی اتم‌های درون ناحیه  $A \rightarrow C$  اعمال شده است. بنابراین با توجه به روابط بالا، با در نظر گرفتن مقدار  $\xi$  برابر با یک، نیرویی که روی هر اتم در ناحیه  $A \rightarrow C$  عمل می‌شود می‌تواند از طریق شتاب آن تخمین زده شود [۲۶]:

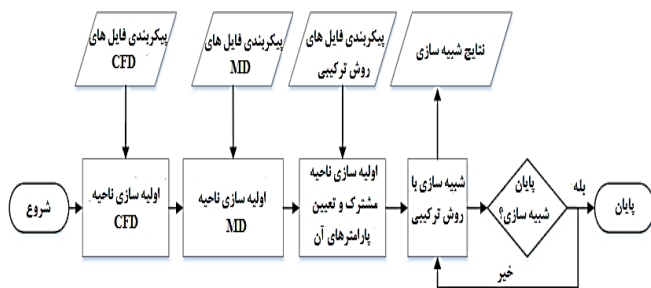
$$\ddot{r}_j = \frac{1}{\left(\frac{n}{\gamma} + 1\right)} \left( u_{CFD} - \left\langle \frac{\sum_{i=1}^{N^{A-C}} m_i \dot{r}_i}{\sum_{i=1}^{N^{A-C}} m_i} \right\rangle n \Delta t^A \right) + \left( \frac{f_j}{m_j} - \left\langle \frac{\sum_{i=1}^{N^{A-C}} f_j}{N^{A-C}} \right\rangle n \Delta t^A \right) \quad (13)$$

که در این رابطه  $\dot{r}$  شتاب‌های اتمی می‌باشد. اولین ترم اختلاف سرعت را منعکس می‌کند و دومین ترم مربوط به تنظیم قدرت حرکت مولکول‌ها است.  $n \Delta t^A$  تعداد بازه‌های زمانی سپری شده توسط شبیه‌سازی دینامیک مولکولی جهت یک عدد



اتمی در فایل in.Atomic انجام می شود. به طور کلی روش کار برای استفاده از نرم افزارها و کتابخانه های مختلف و همچنین تعیین پارامترها و شرایط مرزی از ابتدا تا انتهای استفاده از حلگر HAC به صورت تیتروار عبارتند از:

۱. اجرای حلگر HAC جهت فراخواندن کتابخانه CFD-Convert برای تعیین ابعاد بی بُعد شده جعبه شبیه سازی ناحیه اتمی
  ۲. استفاده از نرم افزار متریزاستودیو جهت ایجاد دیتافایل موردنظر
  ۳. تعیین پارامترهای مورد نیاز برای شبیه سازی ناحیه اتمی در فایل ورودی in.Atomic
  ۴. استفاده از نرم افزار LAMMPS جهت اولیه سازی ناحیه اتمی
  ۵. تعیین پارامترهای مورد نیاز برای ناحیه پیوستگی در فایل های 0, constant و system مربوط به نرم افزار OpenFOAM (شامل مشخصات سیال، انواع شرط مرزی، هندسه و شبکه بندی و تنظیمات مربوط به نحوه اجرای نرم افزار)
  ۶. فراخواندن حلگر sonicFoam جهت شبیه سازی ناحیه پیوستگی
  ۷. استفاده از کتابخانه CoupledProperties جهت کوپل هم زمان دو نرم افزار LAMMPS و OpenFOAM
  ۸. استفاده از نرم افزار paraView جهت مشاهده و تجزیه و تحلیل نتایج
- هم چنین الگوریتم روش ترکیبی اتمی- پیوستگی در شکل ۳ نشان داده شده است.



شکل ۳. الگوریتم روش ترکیبی اتمی- پیوستگی (HAC).

جریان جرمی در بین  $i$  و برای یک بازه زمانی پیوسته  $\Delta t_c$  بر اساس رابطه زیر تعیین می شوند:

$$n = \frac{A_i \bar{u}_i \rho \Delta t_c}{m} \quad (14)$$

که  $n = (\Delta x_i \Delta z_i)$ ، سطح بین  $i$  عمود بر جهت  $y$  و  $n$  بردار نرمال صفحه مرتبط به ناحیه اتمی می باشد.  $\bar{u}_i$  میانگین سرعت پیوسته،  $\rho$  نیز چگالی جرمی و  $m$  جرم اتمی مربوط به مولکول های سیال است. درج یا حذف آنها از محدوده اتمی به علامت  $n$  بستگی دارد به گونه ای که اگر  $n$  مثبت باشد اتم های مشخصی می بایستی به داخل ناحیه جریان جرمی تزریق شوند و اگر  $n$  منفی باشد اتم های مشخصی می بایستی از ناحیه جریان جرمی حذف شوند.

### ۳. پیاده سازی حل گر

برای حل گر HAC نوشته شده، نرم افزار متن باز OpenFOAM به عنوان حل گر اصلی و نرم افزار LAMMPS به عنوان یک کتابخانه برای صدا زدن از داخل آن انتخاب شده است. حلگر انتخابی از نرم افزار OpenFOAM حلگر sonicFoam می باشد و نرم افزار انتخابی برای شبیه سازی با روش دینامیک مولکولی نرم افزار LAMMPS می باشد. همچنین نرم افزار متریز استودیو ۱۷ برای ساختن دیتافایل ورودی (شامل اطلاعات مربوط به موقعیت و مختصات اتم ها در درون جعبه شبیه سازی) برای نرم افزار LAMMPS استفاده شده است. برای تعیین ابعاد جعبه شبیه سازی در ناحیه اتمی، کلاس CFD-Convert ابعاد را ابتدا بدون بُعد می کند و بر اساس این اطلاعات، هندسه جعبه شبیه سازی در نرم افزار متریز استودیو تعیین می شود. ترسیم و شبکه بندی هندسه کویتی در فایل blockMeshDict انجام می شود. تمامی ورودی های مربوط به شبیه سازی ناحیه عددی در حلگر HAC کاملاً مشابه با ورودی های حلگر sonicFoam است. در نتیجه برای اجرای حلگر HAC نیز مشابه با حلگر sonicFoam نیاز به تعریف فایل های thermophysicalProperties و در صورت مغشوش شدن جریان فایل turbulenceProperties می باشد. شرایط مرزی مربوط به محدوده شبیه سازی با روش CFD نیز در پوشه صفر قابل اعمال است. همچنین تنظیمات مربوط به ناحیه اشتراک در فایل CoupledProperties و تنظیمات مربوط به ناحیه



سطح، برخورد‌های بین‌ذره‌ای نیز بررسی می‌شوند. تفاوت بسیار کمی در عملکرد عددی یا اجرای مدل‌های برخورد کره سخت متغیر (VHS<sup>۱</sup>) و کره نرم متغیر (VSS<sup>۲</sup>) وجود دارد، در حالی که دومی فرصتی را برای مطابقت جنس گاز نه تنها با ویسکوزیته شناخته شده، بلکه با ضرایب نفوذ نیز فراهم می‌سازد. به همین دلیل، حتی اگر تقریباً تمام کدهای DSMC مدل VHS را پیاده‌سازی کرده‌اند، استفاده از آن در حال حاضر بیش‌تر به آن دسته از فعل و انفعالات گونه‌ای محدود می‌شود که در آن داده‌های مربوط به نفوذ جزء گازی در دسترس نباشد. برای برخورد ذرات با سطوح، سه نوع شرط مرزی آینه‌ای<sup>۳</sup>، انتشاری<sup>۴</sup> و سرسیگنایی- لمپیس- لرد مورد استفاده قرار می‌گیرند. در شرط مرزی آینه‌ای، ذرات با زاویه‌ای برابر با زاویه ورودی از سطح منعکس می‌شوند و مقدار سه مؤلفه سرعت منعکس شده با مقادیر سرعت ورودی آن‌ها برابر خواهند بود و تنها علامت سرعت در راستای شعاعی تغییر می‌کند. در شرط مرزی انتشاری ذرات منعکس شده از سطح را دارند و مقدار سرعت منعکس شده ذرات مستقل از سرعت ورودی و متناسب با دما و سرعت سطح خواهد بود. در شرط مرزی سرسیگنایی- لمپیس- لرد چیزی مابین دو شرط مرزی آینه‌ای و انتشاری اتفاق می‌افتد که ارتباط بین این دو شرایط مرزی با استفاده از ضرایب انطباق مومنتوم برقرار خواهد شد. به همین دلیل می‌توان گفت این شرط مرزی واقع‌بینانه‌ترین شرط مرزی محسوب می‌شود ولی برای استفاده از آن تعیین ضرایب انطباق مومنتوم الزامی است. کرنل پراکندگی در مدل سرسیگنایی- لمپیس- لرد به صورت زیر قابل بیان می‌باشد:

$$R_{CLL}(c_i, c_r) = (1 - \sigma)R_S(c_i, c_r) + \sigma R_D(c_i, c_r) \quad (18)$$

که  $\sigma$  برابند ضرایب انطباق مومنتوم و  $R_S$  و  $R_D$  نیز کرنل‌های پراکندگی شرایط مرزی آینه‌ای و انتشاری می‌باشند. کرنل پراکندگی ارتباط بین مولکول‌های ورودی و خروجی را در هر مدل تعیین می‌کند به‌گونه‌ای که بتوان بر اساس آن تابع توزیع مولکول‌های منعکس شده را به دست آورد. با توجه به وابستگی ضرایب انطباق مومنتوم به عدد نادسن، و هم‌چنین با توجه به

پس از شبیه‌سازی با حلگر HAC می‌توان مقدار طول لغزش بین سیال و سطح را با استفاده از رابطه زیر تعیین کرد:

$$L_s = \left| \frac{u_s}{\left. \frac{du}{dy} \right|_{y=0}} \right| \quad (15)$$

در نتیجه با تعیین شیب خط سرعت می‌توان مقدار طول لغزش و در نتیجه سرعت لغزش را تعیین کرد. پس از تعیین طول لغزش، مقدار طول لغزش بدون بُعد را نیز به صورت زیر می‌توان تعریف کرد:

$$l_s = \frac{L_s}{H} \quad (16)$$

بر این اساس با مشخص بودن مقدار عدد نادسن  $Kn = \lambda / L$ ، که  $\lambda$  میانگین پویش آزاد مولکولی و  $L$  طول مشخصه سیستم می‌باشند، با استفاده از تئوری نادسن نیز می‌توان مقدار ضریب انطباق مومنتوم ( $\sigma$ ) را با استفاده از رابطه زیر تعیین کرد:

$$l_s = \frac{1 - \sigma}{\sigma} Kn \quad (17)$$

پس از تعیین ضرایب انطباق مومنتوم با استفاده از روش ترکیبی HAC، می‌توان به شبیه‌سازی رفتار گاز درون روتور یک ماشین سانتریفیوژ با استفاده از روش DSMC پرداخت. در این حالت، شرط مرزی مورد استفاده در این روش، شرط مرزی سرسیگنایی- لمپیس- لرد خواهد بود. در نتیجه می‌توان از واقع‌بینانه‌ترین شرط مرزی مورد استفاده در روش DSMC برای شبیه‌سازی گاز درون ماشین بهره برد و این‌گونه دقت نتایج را نیز افزایش داد.

#### ۴. روش DSMC

با توجه به عدم قابلیت حل عددی معادلات غیرخطی ناویر استوکس در شبیه‌سازی رفتار گاز درون کل روتور (به دلیل حضور ناحیه مولکولی)، روش شبیه‌سازی مستقیم مونت‌کارلو (DSMC) گزینه مناسبی برای شبیه‌سازی گاز رقیق درون روتور می‌باشد. در این روش تعداد زیادی ذرات شبیه‌سازی شده به طور هم‌زمان دنبال می‌گردند و علاوه بر برخورد ذرات با

1. Variable Hard Sphere
2. Variable Soft Sphere
3. Specular
4. Diffuse





فلوراید در نظر گرفته شد. محدوده شبیه سازی به ناحیه اتمی نزدیک دیواره پایینی و ناحیه پیوسته برای سایر نواحی محدوده شکسته شد و دیواره پایینی با سرعت  $565 \text{ m/s}$  در حال حرکت است. ارتفاع ناحیه اتمی، برابر با  $205$  انتخاب شد و سپس این ناحیه به صورت سه بعدی مورد شبیه سازی قرار گرفت. ناحیه اتمی به بین‌هایی که منطبق بر سلول‌های ناحیه پیوسته می‌باشند تقسیم‌بندی شد که برابر با  $n_x \times n_y \times n_z = 100 \times 40 \times 1$  است. نتایج پروفایل سرعت به دست آمده از شبیه سازی حلگر HAC با نتایج حل تحلیلی برای جریان کوئیت مطابق با رابطه زیر نیز مورد مقایسه قرار گرفت.

$$u(y, t) = \frac{u_w y}{L_y} + \frac{\gamma u_w}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\cos(n\pi)}{n} \times \sin\left(\frac{n\pi y}{L_y}\right) \exp\left(-\frac{v n^2 \pi^2 t}{L_y^2}\right) \quad (22)$$

که  $L_y$  فاصله بین دو دیواره و  $v$  ویسکوزیته سینماتیکی می‌باشند. با تعریف مشخصه زمان پتانسیل لنارد جونز  $(\tau = \frac{m\sigma^2}{\epsilon})^{1/5}$  پروفایل سرعت در جهت  $x$  به دست آمده از شبیه سازی با حلگر HAC، برای دو محدوده زمانی  $(50-100)\tau$  و  $(1000-2000)\tau$  وابسته به گذشت زمان در شکل ۴ نشان داده شده است.

نمودار تغییرات سرعت در جهت  $x$  با حلگر HAC بر اساس ترکیب دو روش MD و CFD و مقایسه با حل تحلیلی رابطه (۲۲) در شکل ۵ نشان داده شده است. همان طوری که مشاهده می‌شود با گذشت زمان سرعت گاز متأثر از سرعت سطوح متحرک و ثابت، رفتار خطی به خود می‌گیرد به گونه‌ای که گاز در مجاورت سطح متحرک سرعتی معادل با سطح و با نزدیک شدن به سطح ثابت سرعت آن به سمت صفر نزدیک می‌شود. سپس بر اساس نتایج به دست آمده، مطابق با روابط ۱۵ تا ۱۷، مقادیر ضریب انطباق مومنتوم، از شیب خط سرعت مماسی در کنار دیواره متحرک تعیین شدند. بر این اساس برای برهم‌کنش گاز هگزافلوراید اورانیم با سطح DGEBA/TETA به ترتیب برای نادسن کوچک‌تر از  $0.1$  و بزرگ‌تر از  $0.1$  متناسب با فشار گاز کنار دیواره روتور و کپ‌های بالا و پایین روتور، مقادیر ضرایب انطباق مطابق با جدول ۲ تعیین شدند.

شکل‌گیری توزیع عدد نادسن درون روتور، این ضرایب برای روتور و کپ‌های بالا و پایین مقادیر متفاوتی خواهند داشت که مقدار آن نیز وابسته به عدد نادسن است. عدد نادسن محلی درون روتور با استفاده از رابطه زیر تعیین می‌شود:

$$Kn_{Local} = \lambda \times \max\left(\frac{|\nabla V|}{V}, \frac{|\nabla T|}{T}, \frac{|\nabla \rho|}{\rho}\right) \quad (19)$$

که در این رابطه  $V, T, \rho$  به ترتیب برایند مؤلفه‌های سرعت، دما و چگالی می‌باشند و  $\lambda$  میانگین پویس آزاد مولکولی می‌باشد که برابر است با:

$$\lambda = \frac{k_B T}{\sqrt{2}(\pi d^2) p} \quad (20)$$

در این رابطه  $d, k_B, p$  به ترتیب ثابت بولتزمن، قطر مولکولی و فشار سیستم می‌باشند. در انتها مقدار توان جداسازی ماشین بر اساس تابع جریان به دست آمده از شبیه سازی DSMC درون روتور تعیین می‌شود. ترم حایز اهمیت که دربردارنده کمیت‌های هیدرودینامیک می‌باشد و به صورت مستقیم در تئوری جداسازی وارد می‌شود تابع جریان می‌باشد که از رابطه زیر قابل استخراج است:

$$F(r, z) = 2\pi \int_0^r \rho v_z(r', z) r' dr' \quad (21)$$

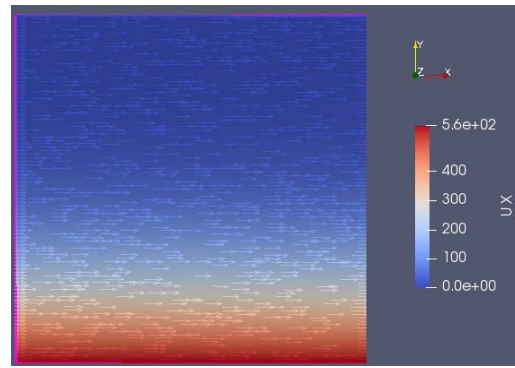
که در این رابطه  $r$  و  $z$  به ترتیب موقعیت‌های شعاعی و محوری روتور و  $v_z$  نیز سرعت محوری گاز درون روتور می‌باشند.

## ۵. نتایج

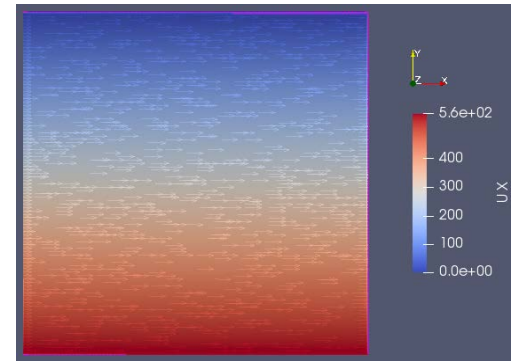
در این قسمت، برای تعیین ضرایب انطباق مومنتوم بین سیال گاز هگزافلوراید اورانیم و سطح پلیمری، ابتدا جریان گاز هگزافلوراید اورانیم در فضای بین دو صفحه موازی از جنس پلیمر با استفاده از حلگر HAC شبیه سازی گردید. در این شبیه سازی دامنه اتمی ناحیه از  $(0, -7.7, 0)$  نانومتر تا  $(12.7, 5, 12.7)$  نانومتر را دربرمی‌گیرد در حالی که محدوده پیوسته ناحیه از  $(0, 0, 0)$  نانومتر تا  $(12.7, 12.7, 0)$  نانومتر را دربرمی‌گیرد. بنابراین ناحیه مشترک شامل  $40\%$  از ناحیه اتمی که برابر با  $5$  نانومتر در جهت  $y$  می‌باشد را تشکیل می‌دهد. این ابعاد معادل با  $440 \times 440 \times 440$  در سه جهت  $x, y$  و  $z$  می‌باشد که در آن  $\sigma$  بر اساس میانگین  $\sigma$  دو اتم اورانیم و



پس از تعیین مقدار ضریب انطباق مومنوم، با به کارگیری این ضرایب در شرط مرزی سرسیگناتی- لمپیس- لرد، شبیه سازی گاز درون روتور یک ماشین سانتریفیوژ با استفاده از روش DSMC صورت پذیرفت. شکل ۶ پروفایل تابع جریان شکل گرفته برای یک ماشین سانتریفیوژ که نتایج تجربی آن موجود است را نشان می دهد. محل تزریق خوراک ارتفاع  $z/Z_H=0.58$  در نظر گرفته شده است. همان طوری که در شکل مشاهده می شود تابع جریان در نزدیکی دیواره روتور مقداری منفی به خود گرفته است و در کنار دیواره و در محدوده مرکزی روتور مقداری نزدیک به صفر دارد. این مقدار منفی در نزدیکی دیواره روتور نشان دهنده یک جریان رفت و برگشتی است که به دلیل حضور محرک های درون روتور شکل گرفته است و موجب افزایش میزان جدایش ایزوتوپی گاز درون روتور می شود. تغییر رفتار در تابع جریان برای محدوده مرکزی روتور نزدیک دیواره، به دلیل حضور بیلوز می باشد.

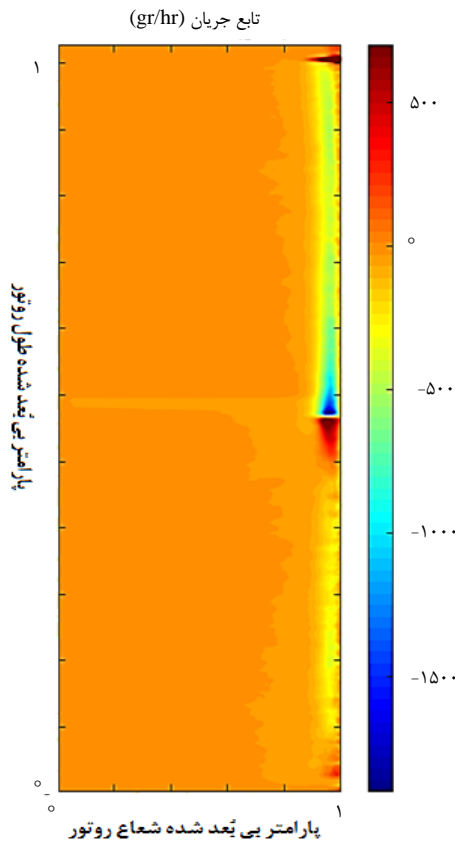


(الف)

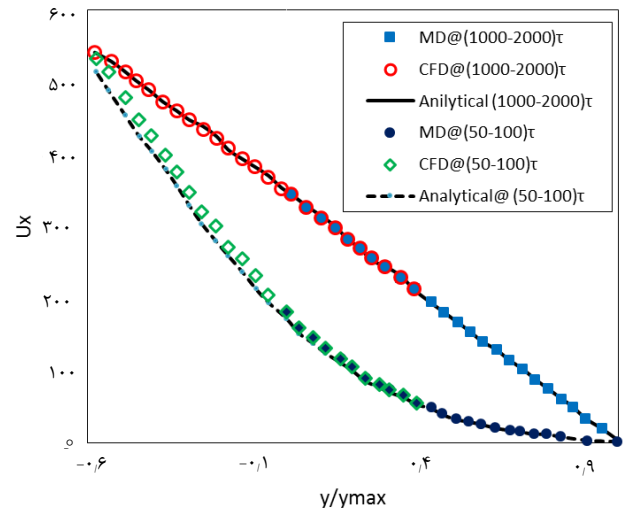


(ب)

شکل ۴. پروفایل های سرعت در جهت X در شبیه سازی جریان کوئیت با حلگر HAC برای دو بازه زمانی الف)  $(50-100)\tau$  و ب)  $(2000-1000)\tau$ .



شکل ۶. تغییرات تابع جریان شکل گرفته درون روتور برحسب gr/hr از شبیه سازی ماشین سانتریفیوژ به دست آمده از روش DSMC با به کارگیری ضرایب انطباق مومنوم در آن.

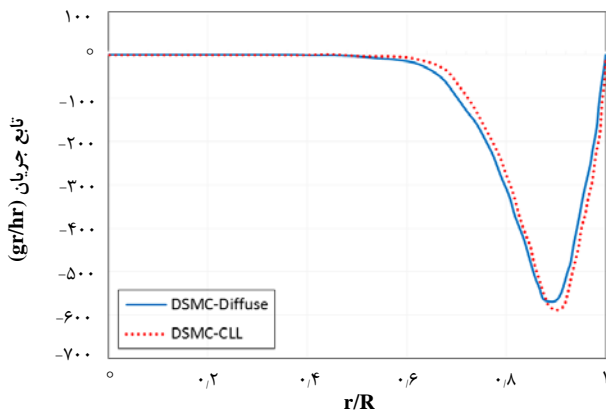


شکل ۵. تغییرات سرعت در جهت X برای یک جریان کوئیت و مقایسه با نتایج حل تحلیلی برای دو محدوده زمانی  $(50-100)\tau$  و  $(2000-1000)\tau$ .

جدول ۲. مقادیر ضریب انطباق مومنوم مناسبی برای سطوح مختلف روتور یک ماشین سانتریفیوژ در شرایط مختلف عملیاتی

نوع سطح	$\sigma$
کنار دیواره چرخان روتور ( $Kn \sim 0.01$ )	۰.۹۹۱
کپ بالا و پایین روتور ( $Kn > 0.1$ )	۰.۸۲۶





شکل ۷. توابع جریان در ارتفاع  $Z/Z_H=0.75$  از روتور، به دست آمده از شبیه سازی با روش DSMC برای دو حالت: اعمال شرط مرزی انتشاری (بدون در نظر گرفتن ضرایب انطباق مومنتوم) و شرط مرزی سرسیگناتی-لمپیس-لرد (با در نظر گرفتن مقادیر ضرایب انطباق مومنتوم).

همچنین توزیع غلظت شکل گرفته درون روتور از روش میانگین تقریب شعاعی برای معادله یک بعدی اونساگر-کهن تعیین شده است [۳۱]. این مقایسه نشان می دهد که با استفاده از مقادیر ضرایب انطباق مومنتوم در روش DSMC، مقدار اختلاف توان جداسازی ماشین با تست تجربی ۲/۸ درصد و در صورت عدم استفاده از این ضرایب در شرایط مرزی مورد استفاده در روش DSMC، این اختلاف به حدود ۱۱ درصد افزایش پیدا می کند. در نتیجه می توان گفت استفاده از حلگر HAC موجب افزایش حدود ۸ درصدی در دقت نتایج به دست آمده از روش DSMC در تحلیل رفتار گاز درون یک ماشین سانتریفیوژ می شود.

### ۶. نتیجه گیری

در این مقاله به تحلیل رفتار گاز درون یک روتور ماشین سانتریفیوژ با استفاده از روش DSMC پرداخته شد. با توجه به حاکم بودن گاز رقیق داخل یک ماشین سانتریفیوژ، همواره مقدار انتقال ضرایب مومنتوم مماسی با سطوح روتور، مقادیر غیرواحد به خود می گیرند. در نتیجه استخراج مقدار ضرایب انطباق مومنتوم برای استفاده در شرط مرزی های مورد استفاده در روش DSMC یک امر ضروری به حساب می آید. شرط مرزی مناسب در روش DSMC برای استفاده از ضرایب انطباق مومنتوم، شرط مرزی سرسیگناتی-لمپیس-لرد می باشد که در صورت استفاده از ضرایب انطباق مومنتوم برابر با یک در آن، این شرط مرزی به شرط مرزی انتشاری تبدیل می شود. یکی از روش های استخراج این ضرایب، استفاده از روش چند مقیاسی با ترکیب روش های CFD و MD می باشد. در این مطالعه برای

استفاده از ضرایب انطباق مومنتوم در شبیه سازی DSMC موجب تغییراتی در تابع جریان شکل گرفته درون روتور به ویژه در نزدیک دیواره روتور خواهد شد. برای مشاهده بهتر این میزان اختلاف، نمودار تابع جریان شکل گرفته درون روتور در ارتفاع  $Z/Z_H=0.75$  و در دو حالت استفاده از ضرایب انطباق مومنتوم و بدون استفاده از این ضرایب، در شکل ۷ نشان داده شده است. مقدار اختلاف بین دو نمودار به دلیل اعمال ضرایب انطباق مومنتوم به دست آمده از روش HAC می باشد که این اختلاف اثر خود را در انتها در عملکرد جداسازی ماشین به خوبی نشان خواهد داد.

برای بررسی میزان افزایش دقت نتایج در به کارگیری ضرایب انطباق مومنتوم تعیین شده با حلگر HAC در روش DSMC (استفاده از شرط مرزی سرسیگناتی-لمپیس-لرد)، نسبت به عدم به کارگیری از این ضرایب ( $\sigma=1$  که معادل با استفاده از شرط مرزی انتشاری می باشد)، در ادامه مقایسه ای بین کار جداسازی به دست آمده با استفاده از روش DSMC با شرط مرزی سرسیگناتی-لمپیس-لرد، شرط مرزی انتشاری و همچنین نتایج تست تجربی موجود صورت گرفته است. مقدار کار جداسازی بر اساس رابطه وُود [۳۰] مطابق رابطه زیر تعیین شده است:

$$\delta U_{ij} = F \left[ \frac{(\gamma_{ij} - 1)\beta_{ij} \ln \beta_{ij} - (\beta_{ij} - 1) \ln \gamma_{ij}}{\beta_{ij} \gamma_{ij} - 1} x_{F,i} - \frac{(\beta_{ij} - 1)\gamma_{ij} \ln \gamma_{ij} - (\gamma_{ij} - 1) \ln \beta_{ij}}{\beta_{ij} \gamma_{ij} - 1} x_{F,j} \right] \quad (23)$$

که

$$\gamma_{ij} = \frac{x_{F,i} / x_{W,i}}{x_{F,j} / x_{W,j}} \quad (24)$$

$$\alpha_{ij} = \frac{x_{P,i} / x_{W,i}}{x_{P,j} / x_{W,j}} \quad (25)$$

$$\beta_{ij} = \frac{x_{P,i} / x_{F,i}}{x_{P,j} / x_{F,j}} \quad (26)$$

در این روابط  $x_i$  غلظت جزء  $F$  نشان دهنده خوراک،  $P$  نشان دهنده محصول و  $W$  نشان دهنده پسماند می باشند.



13. S. O'Connell, P. Thompson, *Molecular dynamics-continuum hybrid computations: a tool for studying complex fluid flows*, *Phys Rev E*, **52(6)**, 5792-5795, (1995).
14. N.G. Hadjiconstantinou, A.T. Patera, *Heterogeneous Atomistic-Continuum Representations for Dense Fluid Systems*, *Int. J. Mod. Phys. C*, **8(4)**, 967-976 (1997).
15. E. Flekkøy, G. Wagner, J. Feder, *Hybrid Model for Combined Particle and Continuum Dynamics*, *Europhys. Lett*, **52(3)**, 271-279 (2000).
16. R. Delgado-Buscalioni, P. Coveney, *Continuum-Particle Hybrid Coupling for Mass, Momentum, and Energy Transfers in Unsteady Fluid Flow*, *Phys. Rev. E*, **67(4)**, 046704 (2003).
17. X.B. Nie, S.Y. Chen, M.O. Robbins, *A Continuum and Molecular Dynamics Hybrid Method for Micro- and Nano-Fluid Flow*, *J. Fluid Mech*, **500**, 55-64 (2004).
18. X. Nie, S. Chen, M.O. Robbins, *Hybrid Continuum-Atomistic Simulation of Singular Corner Flow*, *Phys. Fluids*, **16(10)**, 3579-3591 (2004).
19. X. Nie, M.O. Robbins, S. Chen, *Resolving Singular Forces in Cavity Flow: Multiscale Modeling From Atomic to Millimeter Scales*, *Phys. Rev. Lett*, **96(13)**, 134501 (2006).
20. I.A. Cosden, J.R. Lukes, *A hybrid atomistic-continuum model for fluid flow using LAMMPS and OpenFOAM*, *Computer Physics Communications*, **184**, 1958-1965 (2013).
21. S. Yousefi-Nasab, et al, *Molecular dynamics simulations on the scattering of heavy gases on the composite surfaces*, *Vacuum*, **183**, 109864 (2021).
22. K.K. Kamara, R. Kumar, *Development of empirical relationships for surface accommodation coefficients through investigation of nano-poiseuille flows using molecular dynamic method*, *Microfluidics and Nanofluidics*, **24(9)**, 1-14 (2020).
23. L.F.G. Marcantoni, J.P. Tamagno, S.A. Elaskar, *High speed flow simulation using openFOAM*, *Mecanica Computacional*, **31(16)**, 2939-2959 (2012).
24. M.W. Tysanner, A.L. Garcia, *Measurement bias of fluid velocity in molecular simulations*, *Journal of Computational Physics*, **196(1)**, 173-183 (2004).
25. Q. Wang, et al, *Coupling strategies investigation of hybrid atomistic-continuum method based on state variable coupling*, *Advances in Materials Science and Engineering*, **2017**, 1-21 (2017).
26. Y. Mao, Y. Zhang, C.L. Chen, *Atomistic-Continuum Hybrid Simulation of Heat Transfer Between Argon Flow and Copper Plates*, *Journal of Heat Transfer*, **137(9)**, 091011 (2015).
27. T.H. Yen, C.Y. Soong, P.Y. Tzeng, *Hybrid molecular dynamics-continuum simulation for nano/mesoscale channel flows*, *Microfluidics and Nanofluidics*, **3(6)**, 665-675 (2007).
28. Q. Wang, et al, *Coupling Strategies Investigation of Hybrid Atomistic-Continuum Method Based on State Variable Coupling*, *Adv. Master. Sci. Eng*, **2017**, 1014636 (2017).

برهم‌کنش گاز هگزافلوراید اورانیم با سطح کامپوزیتی دیواره روتور یک ماشین سانتریفیوژ، یک مقیاس نانومتری از این سطح انتخاب و سپس با استفاده از حلگر HAC نوشته شده، مقادیر ضرایب انطباق مومنتوم برای آن استخراج شده است. بر این اساس مشاهده شد که در صورت استفاده از ضرایب انطباق مومنتوم در روش DSMC، دقت این روش برای تعیین مقدار توان جداسازی یک ماشین تا ۸ درصد افزایش پیدا می‌کند.

## مراجع

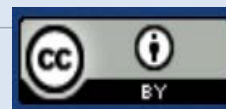
1. M. Benedict, T.H. Pigford, *Nuclear chemical engineering*, *McGraw-Hill*, (1957).
2. H.G. Wood, J.B. Morton, *Onsager's pancake approximation for the fluid dynamics of a gas centrifuge*, *Journal of Fluid Mechanics*, **101(1)**, 1-31 (1980).
3. H.G. Wood, T.C. Mason, Soubbaramayer, *Multi-isotope separation in a gas centrifuge using Onsager's pancake model*, *Separation Science and Technology*, **31(9)**, 1185-1213 (1996).
4. T. Kai, K. Hasegawa, *Numerical calculation of flow and isotope separation for SF6 gas centrifuge*, *Journal of Nuclear Science and Technology*, **37(2)**, 153-165 (2000).
5. P. Omnes, *Numerical and physical comparisons of two models of a gas centrifuge*, *Computers & Fluids*, **36(6)**, 1028-1039 (2007).
6. G.A. Bird, *Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows*, *Oxford Univ. Press*, New York, (1994).
7. S. Pradhan, V. Kumaran, *The generalized Onsager model for the secondary flow in a high-speed rotating cylinder*, *Journal of Fluid Mechanics*, **686**, 109-159 (2011).
8. S. Yousefi-Nasab, et al, *Investigation of the effect of bellows on the separation power in a gas centrifuge using DSMC method*, *Annals of Nuclear Energy*, **169**, 108955, (2022).
9. V. Ghazanfari, et al, *Investigation of the continuum-rarefied flow and isotope separation using a hybrid CFD-DSMC simulation for UF6 in a gas centrifuge*, *Annals of Nuclear Energy*, **152**, 107985 (2021).
10. M. Khajenoori, et al, *Modeling gas-granular flow in molecular using the DSMC method and continuum regions by Onsager's pancake equation with mass sources and sinks in a rotating cylinder*, *Granular Matter*, **21(3)**, 1-15 (2019).
11. C. Cercignani, M. Lampis, *Kinetic models for gas-surface interactions*, *Transport Theory and Statistical Physics*, **1(2)**, 101-114 (1971).
12. R.G. Lord, *Some extensions to the Cercignani-Lampis gas-surface scattering kernel*, *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics*, **3(4)**, 706-710 (1991).



29. Y.C. Wang, G.W. He, *A Dynamic Coupling Model for Hybrid Atomistic-Continuum Computations*, *Chem. Eng. Sci.*, **62** (13), 3574-3579 (2007).
30. H. Wood, T. Mason, Soubbaramayer, *Multi-isotope separation in a gas centrifuge using Onsager's pancake model*, *Separation Science and Technology*, **31**(9), 1185-1213 (1996).
31. H. Wood, et al, *Estimation of overall separation factor of a gas centrifuge for different multicomponent mixtures by separation theory for binary case*, *Separation Science and Technology*, **37**(2), 417-430 (2002).

**COPYRIGHTS**

©2021 The author(s). This is an open access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution (CC BY 4.0), which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, as long as the original authors and source are cited. No permission is required from the authors or the publishers.



## استناد به این مقاله

صادق یوسفی نسب، جواد کریمی ثابت، سید جابر صفدری (۱۴۰۲)، استفاده از روش دینامیک مولکولی نرم‌افزار LAMMPS در نرم‌افزار متن باز OpenFOAM جهت تحلیل یک ماشین سانتریفیوژ گازی، ۱۰۵، ۵۶-۶۸

DOI: [10.24200/nst.2022.1057.1713](https://doi.org/10.24200/nst.2022.1057.1713)

Url: [https://jonsat.nstri.ir/article\\_1463.html](https://jonsat.nstri.ir/article_1463.html)

