Archive of SID

مجله علوم و فنون هسته‌ای، جلد ۹۸، شماره ۴، زمستان ۱۴۰۰

Journal of Nuclear Science and Technology
Vol. 98, No. 1, 2022

مدل‌سازی و شبیه‌سازی رفتار گاز داخل یک روتور سانتریفیوژ گازی در حضور گاز سبک هیدروژن فلوراید با استفاده از روش ترکیبی DSMC و انساگر-پنکیک

مسعود خواجه نوری[۱]، سید جابر صفدری[۲]، علی حقیقی اصل*[۱]، علی نوروزی[۳]

۱. دانشکده مهندسی شیمی، نفت و گاز، دانشگاه سمنان، صندوق پستی: ۳۶۳-۳۵۱۹۵، سمنان - ایران
۲. پژوهشکده چرخه سوخت هسته‌ای، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، سازمان انرژی اتمی ایران، صندوق پستی: ۸۴۸۶-۱۱۳۶۵، تهران- ایران
۳. شرکت فناوری‌های پیشرفته ایران، سازمان انرژی اتمی، صندوق پستی: ۵۹۳۱-۱۴۳۹۹۵، تهران- ایران
*Email: ahaghighi@semnan.ac.ir

مقاله‌ی پژوهشی

تاریخ دریافت مقاله: ۹۹/۱/۴ تاریخ پذیرش مقاله: ۹۹/۳/۱

چکیده

رفتار گاز در ماشین سانتریفیوژ را می‌توان به دو قسمت مولکولی و پیوسته تقسیم کرد. معادله بولتزمن روشی دقیق برای بررسی رفتار گاز در تمام نواحی ماشین سانتریفیوژ به شمار می‌رود. یکی از روش‌های حل این معادله، روش DSMC می‌باشد. تاکنون چشمه جرمی مورد استفاده در معادله انساگر- پنکیک در ناحیه پیوسته یک چشمه فرضی بوده و پژوهشگران زیادی چشمه‌های جرمی فرضی مختلفی را ارایه داده‌اند. در پژوهش حاضر، شکل رسیدن خوراک به ناحیه پیوسته و اثرگذاری آن در مرز دو ناحیه به‌صورت چشمه جرمی با روش مستقیم مونت‌کارلو محاسبه شده و با چشمه جرمی فرضی گانزبرگر مقایسه شده است. سپس چشمه جرمی حاصل از حضور گاز سبک هیدروژن فلوراید در خوراک به‌صورت یک مخلوط دو جزیی (Z_{UF_6}=۰/۹۷ و Z_{HF}=۰/۰۳)، (Z_{UF_6}=۰/۹۳ و Z_{HF}=۰/۰۷) و (Z_{UF_6}=۰/۹ و Z_{HF}=۰/۱) در مرز دو ناحیه محاسبه شده است. با جای‌گذاری تابع جریان حاصل در معادلات نفوذ انساگر- کوهن، توزیع غلظت در طول روتور محاسبه شده و در نهایت پارامترهای جداسازی و توان جداسازی محاسبه شده است. نتایج نشان می‌دهد که با افزایش مقدار گاز سبک در خوراک ورودی به ماشین فاکتور و توان جداسازی کاهش می‌یابد.

کلیدواژه‌ها: مدل‌سازی، مونت‌کارلو، ناحیه مولکولی، چشمه جرمی

Modeling and simulation of the gas behavior in a gas centrifuge rotor in the presence of hydrogen fluoride light gas by DSMC and Onsager-pancake

M. Khajenoori[1], S.J. Safdari[2], A. Haghighi Asl*[1], A. Norouzi[3]

1. Faculty of Chemical, Gas and Petroleum Engineering, Semnan University, P.O.Box: 35195-363, Semnan - Iran
2. Nuclear Fuel Cycle Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute, AEOI, P.O.Box: 11365-8486, Tehran-Iran
3. Iran Advanced Technologies Compony, AEOI, P.O.Box: 143995-5931, Tehran-Iran

Research Article
Received 23.3.2020, Accepted 21.5.2020

Abstract

The gas behavior within a centrifuge machine can be divided into molecular and continuum. The Boltzmann equation is an accurate method for studying the behavior of gas in all areas of a centrifuge. DSMC is one of the methods for solving the Boltzmann equation. In the literature published so far, a presumptive source has been considered the mass source used in the Onsager-Pancake equation in the continuum region. The researchers have presented various presumptive mass sources. In the present work, the feed reaching form to continuum region and its effect on the border between the two areas in the mass source form was calculated using the direct Monte Carlo method. The results were compared with Gunzburger's presumptive mass source. Moreover, the mass source obtained from the presence of hydrogen fluoride light gas in the feed was calculated at the border of two regions as a two-component mixture (Z_{UF6}=0.97, Z_{HF}=0.03), (Z_{UF6}=0.93, Z_{HF}=0.07) and (Z_{UF6}=0.9, Z_{HF}=0.1). The concentration distribution along the rotor was calculated by inserting the obtained flow function into the Onsager-Cohen diffusion equations. Finally, the separation parameters and the separation power were calculated. The results show that the separation factor and the separation power decrease by increasing the light gas amount in the feed entering the machine.

Keywords: Modeling, Monte Carlo, Molecular reign, Mass source

www.SID.ir

Archive of SID

۱. مقدمه

طراحی مجدد سانتریفیوژها برای تحقیقات بنیادی فیزیک، شیمی، روش‌های تشخیص و درمان پزشکی و توسعه مواد جدید، با استفاده از مدل‌های محاسباتی بر مبنای مدل‌سازی جریان داخلی روزبه‌روز در حال افزایش است [۱-۳]. از ابتدای توسعه سانتریفیوژ، روش‌های جایگزینی مانند روش انساگر برای حل معادلات حاکم بر جریان گاز درون لایه استوارتسون[1] روتور (لایه‌های نازک کنار دیواره روتور که جرم غالب گاز در آن قرار دارد) ارایه شد و سپس با استفاده از معادله پیوستگی جرم و استفاده از روش تقریب میانگین شعاعی، تغییرات غلظت در راستای محوری برای انواع ایزوتوپ‌های گازی توسط کهن حل گردید [۴-۵]. سابرمایر در سال ۱۹۶۱ به‌منظور ساده‌سازی بیش‌تر، از اثر کپ‌ها به‌طور کامل صرف‌نظر نمود و با فرض این‌که تغییرات جریان در راستای شعاع است، به حل معادلات پرداخت [۶]. اولاندر با مقایسه‌هایی که بین این فرضیات انجام داد، نشان داد که نتایج حاصل، توافق خوبی با یک‌دیگر دارند [۷]. گانزبرگر و وود در سال ۱۹۸۲، با استفاده از روش المان محدود[2] به حل تقریبی معادله انساگر[3] همگن پرداختند. این سانتریفیوژ شامل دو جریان ورودی و دو جریان خروجی در دو انتهای کپ‌ها و در خلاف جهت یک‌دیگر بود. حل معادلات انساگر همگن برای دو حالتی که گرادیان دمای خطی دیواره و محرک جریان محوری اعمال شود انجام گرفته است [۸]. گانزبرگر و همکارانش روش حل المان محدود را برای حل تقریبی معادله انساگر- پنکیک[4] استفاده کردند [۸، ۹]. در سال ۱۹۸۴، روش المان محدود برای حل معادله انساگر- پنکیک با چشمه و چاه[5] جرمی در یک سانتریفیوژ گازی توسعه داده شد [۱۰]. زینگ و وود در سال ۲۰۱۳ حل میدان جریان در حضور یک چشمه و چاه جرمی را با جزییات توصیف کرده و با استفاده از روش تحلیلی، معادله انساگر- پنکیک را حل نمودند [۱۱]. مدل انساگر تعمیم‌یافته[6] برای لایه مرزی شعاعی و مدل کریر و ماسلن[7] تعمیم‌یافته برای ترکیب مومنتوم زاویه‌ای خوراک گازی برای گاز تک‌جزیی در سال ۲۰۱۱ به‌وسیله پرادهان و همکارانش توسعه یافت [۱۲]. کامران و همکاران در سال ۲۰۱۴ راه‌حل تحلیلی برای معادلات انساگر تعمیم‌یافته برای یک گاز تک‌جزیی را به دست آوردند [۱۳]. شرایط مرزی بین دو ناحیه گاز رقیق و پیوسته با استفاده از روش شبیه‌سازی مستقیم مونت‌کارلو (DSMC[8]) توسط روبلین و همکارانش در سال ۲۰۰۱ مورد مطالعه قرار گرفت؛ آن‌ها نتیجه گرفتند که معرفی خوراک گازی نقش مهمی در ایجاد جریان‌های ثانویه محوری ایفا می‌کند [۱۴]. وود در سال ۱۹۹۴ سه مدل خوراک گازی را به‌عنوان چشمه جرمی[9] در یک سانتریفیوژ گازی معرفی کرد [۱۵]. در مدل اول خوراک (F۱)، خوراک گازی به عنوان شار جرم شعاعی معرفی شد، در مدل دوم خوراک (F۲)، به‌وسیله تابع دلتای دایرک[10] (δ) معرفی شد و مدل سوم خوراک (F۳) با F۲ یکسان بود، به‌جز این‌که در این مدل مؤلفه سرعت محوری برابر با سرعت چرخش جسم صلب درنظر گرفته شده بود. برای هر سه مدل خوراک، موقعیت خوراک تقریباً در وسط محور بود. نتایج نشان داد که هر یک از این مدل‌ها مقادیر مشابهی را برای عملکرد جداسازی بهینه در مقدار خوراک یکسان ایجاد می‌کند، اما هر یک از توابع مربوطه (F۱، F۲ و F۳) دارای خطوط جریان مخصوص به خود می‌باشند. این واقعیت موجب تمایز بین عملکرد جداسازی با توجه به نرخ خوراک برای هر مدل خوراک (F۱، F۲ و F۳) شده است. بنابراین محاسبه چشمه جرمی از اهمیت زیادی برخوردار است. هم‌چنین تأثیر خوراک بر عملکرد جداسازی با کار مشابه که توسط راتز، که از مدل بسیار ساده‌تر استفاده کرده بود، مقایسه شده است [۱۵-۱۶]. در حل روش‌های تحلیلی و عددی برای جریان خوراک، مقدار چشمه جرمی ($\mathcal{M}$) فرضی می‌باشد [۱۰، ۱۱، ۱۵، ۱۶]. از آن‌جایی که چشمه جرمی ($\mathcal{M}$) از ناحیه رقیق وارد ناحیه پیوسته شده است، بنابراین تحلیل صحیحی از چشمه جرمی وجود ندارد. با پیشرفت سیستم‌های محاسباتی، روش‌های دقیق‌تری هم‌چون روش‌های لاگرانژی مورد استفاده قرار گرفتند. یکی از این روش‌ها، روش شبیه‌سازی مستقیم مونت‌کارلو است که برای شبیه‌سازی جریان‌های گاز رقیق مورد استفاده قرار می‌گیرد. یکی از روش‌های محاسبه چشمه جرمی، استفاده از روش DSMC می‌باشد. برای این کار، مقدار جرم ورودی به ناحیه پیوسته‌ی گاز به‌صورت تابعی از شعاع، ارتفاع و قدرت چشمه درنظر گرفته می‌شود.

در این مقاله چشمه جرمی با روش مستقیم مونت‌کارلو محاسبه شده و با چشمه جرمی فرضی گانزبرگر و همکارانش مورد مقایسه قرار گرفته است. هم‌چنین چشمه جرمی حاصل

1. Stewartson Layer
2. Finite Element
3. Onsager Equation
4. Onsager's Pancake Equation
5. Source and Sink
6. Generalized Onsager Model
7. G.F. Carrier and S.H. Maslen
8. Direct Simulation Monte Carlo
9. Mass Source
10. Dirac Delta Function

www.SID.ir

Archive of SID

شده از حضور گاز سبک هیدروژن فلوراید در خوراک به‌صورت یک مخلوط دو جزیی (Z_{UF_6}=۰/۹۷ و Z_{HF}=۰/۰۳)، (Z_{UF_6}=۰/۹۳ و Z_{HF}=۰/۰۷) و (Z_{UF_6}=۰/۹ و Z_{HF}=۰/۱) در مرز دو ناحیه محاسبه شده است. با محاسبه تابع جریان حاصل از معادله انساگر- پنکیک با چشمه جرمی و جای‌گذاری آن در معادله نفوذ اصلاح شده انساگر-کوهن[1]، غلظت ۲۳۵-UF_6 در طول روتور محاسبه شده و پارامترهای جداسازی و توان جداسازی حاصل از حضور مقدار مختلف گازهای سبک هیدروژن فلوراید همراه گاز هگزافلوراید اورانیم محاسبه شده است. نتایج نشان می‌دهد با افزایش مقدار گاز سبک هیدروژن فلوراید همراه خوراک، پارامترهای جداسازی و توان جداسازی کاهش می‌یابد.

۲.تئوری

۱.۲ روش مستقیم مونت‌کارلو در ناحیه رقیق

روش شبیه‌سازی مستقیم مونت‌کارلو اولین بار توسط برد [۱۷] ارایه شد. در این روش برخورد بین مولکولی و حرکت مولکول‌ها در یک بازه زمانی از هم جدا می شوند، به‌طوری‌که این بازه زمانی باید کوچک‌تر از متوسط زمان برخورد مولکول‌ها باشد. سرعت، مختصات مکانی و انرژی درونی هر یک از مولکول‌ها در کامپیوتر ذخیره شده و با حرکت مولکول‌ها در طی زمان تغییر می‌کند. در این روش تعداد زیادی از مولکول‌های مدل به‌منظور شبیه‌سازی مولکول‌های واقعی به کار می‌روند که تعداد آن‌ها به مراتب کم‌تر از مولکول‌های واقعی است. بنابراین هر مولکول مدل، بیان‌گر تعداد زیادی از مولکول‌های واقعی است. در حالت واقعی، مولکول‌ها در حال حرکت با هم برخورد می‌کنند ولی در روش DSMC این فرایند از هم جدا می‌شود. به‌عبارت دیگر، ابتدا حرکت مولکول‌ها درنظر گرفته شده و سپس برخورد آن‌ها به یک‌دیگر صورت پذیرفته است. در این مرحله جهت حرکت و اندازه سرعت مولکول‌ها (ذرات) تغییر می‌کند. در روش DSMC دامنه محاسباتی به تعداد زیادی سلول[2] و زیرسلول[3] تقسیم می‌شود. یکی از عوامل مهم برای سرعت بخشیدن به اجرای برنامه با روش DSMC، روشی مناسب برای شبکه‌بندی ذرات و تعیین شماره سلول‌ها به‌وسیله مختصات ذرات است. برای این منظور، برد [۱۷] از شبکه‌بندی کاهشی در جهت شعاع استفاده کرده است.

برای انجام محاسبات برخورد در زیرسلول از روش NTC[4] معرفی شده توسط برد استفاده شده است [۱۷]. احتمال برخورد بین دو مولکول شبیه‌سازی شده در یک بازه زمانی برابر است با:

$$P = F_n \sigma_T C_r \Delta t / V_c \qquad (۱)$$

F_n بیان‌گر تعداد مولکول‌های واقعی که توسط یک مولکول مدل جانشین شده است، V_c حجم سلول، σ_T سطح‌مقطع برخورد کل که تابعی از سرعت نسبی بین دو مولکول است و C_r سرعت نسبی بین دو مولکول می‌باشد. بیش‌ترین احتمال برخورد به‌صورت زیر تعریف می‌شود:

$$P_{\max} = F_n (\sigma_T C_r)_{\max} \Delta t / V_c \qquad (۲)$$

nV_c بیان‌گر متوسط تعداد مولکول‌های واقعی در هر سلول است. بنابراین متوسط تعداد مولکول‌های شبیه‌سازی شده به‌صورت زیر تعریف می‌شود:

$$N = nV_c / F_n \qquad (۳)$$

n چگالی عددی گاز واقعی می‌باشد. در روش DSMC تعداد بیشینه جفت‌های انتخاب شده در یک بازه زمانی برابر است با:

$$۰/۵ \bar{N} N F_n (\sigma_T C_r)_{\max} \Delta t / V_c \qquad (۴)$$

$\bar{N}$ بیان‌گر متوسط مقدار N است. انتخاب جفت مولکول برخوردکننده با احتمال زیر صورت می‌گیرد:

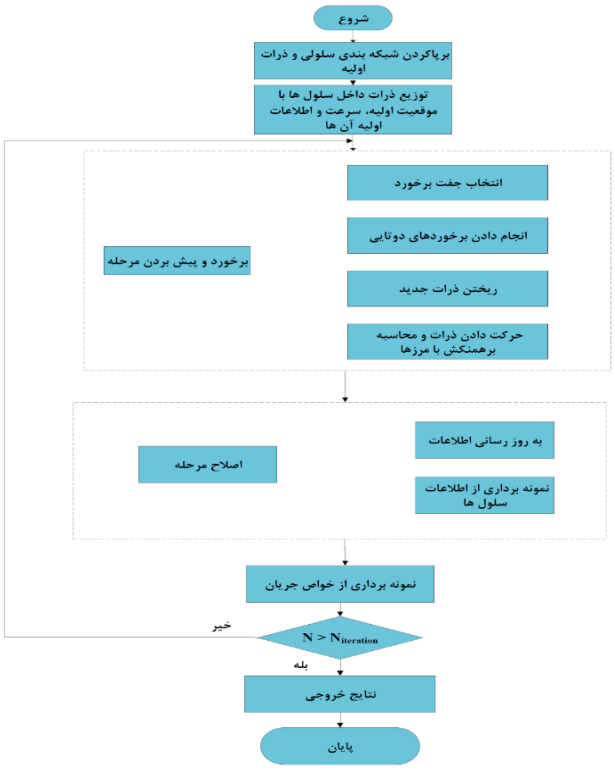
$$\sigma_T C_r / (\sigma_T C_r)_{\max} \qquad (۵)$$

از میان بیشینه جفت‌های ممکن، تنها جفتی انتخاب می‌شود که نسبت بالا برای آن بزرگ‌تر از عدد تصادفی R_f انتخاب شده باشد. شکل ۱ الگوریتم روش DSMC را نشان می‌دهد.

1. Onsager-Cohen Solution Method
2. Cell
3. Subcell
4. Non Time Counter

www.SID.ir

Archive of SID



شکل ۱. الگوریتم روش DSMC.

به‌طور کلی روش DSMC به مراحل زیر تقسیم می‌شود:

۱- مقداردهی اولیه

۲- شبکه‌بندی ناحیه محاسباتی

۳- حرکت دادن ذرات و برخورد با سطح

۴- برخورد ذرات با یک‌دیگر

۵- نمونه‌گیری

۶- برگشت به مرحله سوم.

۲.۲ روش تفاضل محدود برای ناحیه پیوسته

معادله دیفرانسیل انساگر- پنکیک برای حل دوبعدی رفتار گاز حاکم در ناحیه پیوسته سانتریفیوژ گازی مناسب است [۱۰-۱۳]. از جمله مزایای این معادله سرعت حل بالای آن می‌باشد که در مسایل مدل‌سازی می‌توان از آن استفاده کرد. برای تحلیل ناحیه پیوسته در این مقاله، از معادلات انساگر- پنکیک ناهمگن استفاده شده است. این معادلات به‌صورت زیر می‌باشند (برای جزییات بیش‌تر به مراجع [۱۰-۱۱] مراجعه شود):

$$(e^{x}(e^{x}X_{xx})_{xx})_{xx}+B^{2}X_{yy}=F(x,y);$$
$$0<x<x_T\ ,\ 0<y<y_T \qquad (۶)$$
$$F(x,y)=-\frac{B^{2}}{4A^{4}}\int_{x}^{x_T}\int_{\xi}^{x_T}M_y\,d\xi'd\xi \qquad (۷)$$

در رابطه فوق M چشمه یا چاه جرمی، X پتانسیل مستر، که رابطه آن با تابع جریان ψ به‌صورت $\psi=2A^{2}Xx$ تعریف شده است، x شعاع گسترش یافته می‌باشد. مختصات بی‌بعد شده محور y به‌صورت تابعی از شعاع سانتریفیوژ (a) تعریف شده است. اعداد بی‌بعد شده در معادله به‌صورت $B=\mathrm{Re}S^{\frac{1}{2}}/4A^{6}$، $\mathrm{Re}=\rho_w\Omega a^{2}/\mu$، $S=1+\mathrm{Pr}A^{2}(\gamma-1)/2\gamma$، $A^{2}=(a\Omega)^{2}/2RT_0$ و $\mathrm{Pr}=c_p\mu/k$ تعریف شده است. در اینجا ρ_W چگالی گاز در دیواره روتور، T_0 دمای میانگین گاز، R ثابت جهانی گازها، Ω سرعت چرخش روتور و μ، c_p، γ به ترتیب ویسکوزیته گاز، گرمای ویژه در فشار ثابت و نسبت گرمای ویژه در فشار ثابت به حجم ثابت می‌باشد. هم‌چنین معادله انساگر- پنکیک با روابط زیر گسسته شده است:

$$\left.\frac{\partial X}{\partial x}\right|_j^i\cong\frac{X_{i+1}^{j}-X_{i-1}^{j}}{2h} \qquad (۸)$$
$$\left.\frac{\partial^{2}X}{\partial x^{2}}\right|_j^i\cong\frac{X_{i+1}^{j}-2X_{i}^{j}+X_{i-1}^{j}}{h^{2}} \qquad (۹)$$
$$\left.\frac{\partial}{\partial x}(e^{x}\frac{\partial x^{2}}{\partial x^{2}})\right|_j^i=(e^{x_{i+1}}x_{i+2}^{j}-2e^{x_{i+1}}x_{i+1}^{j}+(e^{x_{i+1}}-e^{x_{i-1}})X_{i+2}^{j}+2e^{x_{i-1}}x_{i-1}^{j}-e^{x_{i-1}}x_{i-2}^{j})/2h^{3} \qquad (۱۰)$$

با توجه به این‌که معادلات و شرایط مرزی دارای مشتق‌های مرتبه بالایی هستند، در حل این معادلات از سه نقطه اضافی کمکی در راستای شعاعی در هر طرف و یک نقطه اضافی در بالا و پایین استفاده شده است. برای حل معادله انساگر- پنکیک ناهمگن از روش تفاضل محدود استفاده شده است. این معادله دارای درجه ۶ در راستای شعاع و درجه ۲ در راستای ارتفاع است، لذا دارای ۸ شرط مرزی می‌باشد. اگر فرض کنیم فاصله‌ی بین نقاط در راستای شعاعی به طول h و در راستای ارتفاع به طول t و i, j نشان‌دهنده‌ی مکان نقطه‌ی موردنظر در شبکه‌بندی دوبعدی باشند، در این صورت سمت چپ رابطه ۶ را می‌توان به‌صورت زیر نوشت:

$$\frac{\partial^{2}}{\partial x^{2}}(e^{x}\frac{\partial^{2}}{\partial x^{2}}(\frac{\partial X^{2}}{\partial x^{2}}))\Big|_j^i$$
$$+B^{2}\left.\frac{\partial X^{2}}{\partial y^{2}}\right|_j^i\cong\frac{1}{h^{6}}\{e^{x_{i+1}+x_{i+2}}x_{i+3}^{j}$$
$$-2(e^{x_i+x_{i+1}}+e^{x_{i+1}+x_{i+2}}+e^{2x_{i+1}})X_{i+2}^{j}$$
$$+(e^{x_{i+1}+x_{i+2}}+4e^{2x_{i+1}}+e^{x_i+x_{i+1}}+e^{x_{i-1}+x_i}+4e^{x_i+x_{i+1}}+4e^{2x_i})X_{i+1}^{j}$$
$$-2(e^{2x_{i+1}}+e^{x_i+x_{i+1}}+e^{x_{i-1}+x_i}+e^{2x_{i-1}}+e^{x_i+x_{i+1}}+4e^{2x_i}+e^{x_{i-1}+x_i})X_i^{j}$$

www.SID.ir

Archive of SID

$$+(e^{x_{i-1}+x_i}+4e^{2x_{i-1}}+e^{x_{i-2}+x_{i-1}}+e^{x_i+x_{i+1}}+4e^{2x_i}+4e^{x_{i-1}+x_i})X^{j}_{i-1}$$
$$-2(e^{x_{i-1}+x_i}+e^{2x_{i-1}}+e^{x_{i-2}+x_{i-1}})X^{j}_{i-2}+e^{x_{i-2}+x_{i-1}}X^{j}_{i-2}\}$$
$$+\frac{B^2}{t^2}(X_i^{j+1}-2X_i^{j}+X_i^{j-1}) \qquad (11)$$

گانزبرگر و همکارانش فرض کردند تابع چشمه جرمی (M) به شکل تابع گوسی[1] باشد [۱۰].

$$M=S_0 e^{(-a((x'-x_s)^2+(y'-y_s)^2))} \qquad (12)$$

در رابطه فوق x_s و y_s محل مرکز چشمه است و x'، y' به‌ترتیب به مختصات شعاع و ارتفاع اشاره دارند. مقدار α طوری در نظر گرفته می‌شود که در دایره‌ای به شعاع یک $((x'-x_s)^2+(y'-y_s)^2=1)$، M، دارای مقدار ثابت S_0 برابر 10^{-6} باشد. مقدار S_0 نیز به مقدار ورود خوراک بستگی دارد. اگر فرض کنیم $\iiint M\,dv=1$، مقدار S_0 برابر ۴٫۳۹ به دست می‌آید.

$$F(x',y')=\frac{B^2\sqrt{\alpha\pi}S_0}{4A^4}(y'-y_s)_e^{(-a(y'-y_s)^2)}$$
$$[(x-x_s)E(x_T-x_s)-(x-x_s)E(x-x_s)$$
$$+\frac{1}{\sqrt{\alpha\pi}}\left[e^{(-a((x_T-x_s)^2))}-e^{(-a((x-x_s)^2))}\right]],\ E(x)=erf(\sqrt{a}x) \qquad (13)$$

تاکنون پژوهشگران چشمه‌های فرضی مختلفی برای ارتباط ناحیه رقیق و پیوسته پیشنهاد داده‌اند [۱۵-۱۶]. در این پژوهش، چشمه دقیق جرمی با روش DSMC محاسبه شده است و در معادلات انساگر ناهمگن مورد استفاده قرار گرفته است. با استفاده از روش DSMC، ناحیه رقیق شبیه‌سازی شده و اثر خوراک در مرز دو ناحیه به‌صورت چشمه جرمی محاسبه شده است. با حل معادله انساگر- پنکیک ناهمگن خطوط جریان حاصل از چشمه جرمی DSMC و چشمه جرمی فرضی گانزبرگر و همکارانش مقایسه شده است. هم‌چنین چشمه جرمی حاصل از حضور گاز سبک هیدروژن فلوراید در خوراک به‌صورت یک مخلوط دو جزیی ((Z_{UF_6}=۰٫۹۷ و Z_{HF}=۰٫۰۳)، (Z_{UF_6}=۰٫۹۳ و Z_{HF}=۰٫۰۷) و (Z_{UF_6}=۰٫۹ و Z_{HF}=۰٫۱)) در مرز دو ناحیه محاسبه شده و با حل معادله انساگر- پنکیک ناهمگن با روش تفاضل محدود، تابع جریان مناسب از رابطه زیر محاسبه شده است:

$$F(x,\eta)=\frac{-\pi\alpha^2}{A^2}\int_{A^2}^{\xi}\rho_{eq}w(x,\eta)dx \qquad (14)$$

با جای‌گذاری تابع فوق در معادله نفوذ انساگر- کوهن و حل آن، غنای $^{235}UF_6$ در طول روتور و پارامترهای جداسازی درون روتور محاسبه شده است.

۳.۲ حل معادله نفوذ و محاسبه پارامترهای جداسازی

معادله نفوذ دو بعدی در مقالات مختلف به‌صورت زیر بیان شده است [۷، ۱۸، ۱۹]:

$$\rho_{eq}w\frac{\partial X}{\partial z}=\frac{\rho D}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left[r\frac{\partial X}{\partial r}+\frac{\Delta M\,\Omega^2}{RT_{eq}}r^2X(1-X)\right]+\rho D\frac{\partial^2 X}{\partial z^2} \qquad (15)$$

در این رابطه، X غنای جزء مطلوب، D ضریب نفوذ دوتایی، ΔM اختلاف جرم مولکولی $^{235}UF_6$ و $^{238}UF_6$، w' سرعت محوری گاز، T_{eq} دمای گاز و R ثابت جهانی گازها می‌باشد. برای حل معادله فوق، دو شرط مرزی در راستای شعاع و دو شرط مرزی در راستای محور مورد نیاز است. عدم انتقال جرم شعاعی بر روی دیواره، عدم انتقال جرم شعاعی در مرز لایه استوارتسون، عدم تغییر غلظت در انتهای محفظه جدایش و عدم تغییر غلظت در ابتدای محفظه جدایش به‌ترتیب به‌عنوان شروط مرزی برای حل معادله نفوذ با روابط زیر درنظر گرفته شده است [۷].

$$\left[\frac{\partial X}{\partial r}+\frac{\Delta M\,\Omega^2}{RT_{eq}}rX(1-X)\right]_{r=rw}=0 \qquad (16)$$

$$\left[\frac{\partial X}{\partial r}+\frac{\Delta M\,\Omega^2}{RT_{eq}}rX(1-X)\right]_{r=r_0}=0 \qquad (17)$$

$$\left(\frac{\partial X}{\partial Z}\right)_{z=Z}=0 \qquad (18)$$

$$\left(\frac{\partial X}{\partial Z}\right)_{z=0}=0 \qquad (19)$$

حل معادله توزیع غلظت با شرایط مرزی مذکور توسط انساگر و کهن پیشنهاد شد. تابع غلظت بخش غنی‌سازی در حل انساگر- کهن با تعریف کمیت‌های بدون بعد، به فرم زیر ارایه شده است [۷]:

$$\frac{dY}{d\eta}=g_p(\eta)\left[Y(1-Y)-\gamma_p(\eta)P(Y_p-Y)\right] \qquad (20)$$

1. Gaussian Function

www.SID.ir

Archive of SID

در رابطه ۲۰، Y غنای جزء مطلوب در بخش غنی‌سازی می‌باشد. پارامترهای $g_p(\eta)$ و $\gamma_p(\eta)$ از به‌صورت زیر محاسبه شده است:

$$g_p(\eta)=2(\frac{\Delta M}{M})(\frac{Z}{r_w})\int_0^{A^2}\left[F(x,\eta)-Pe^{-x}\right]dx\ /((2\pi\rho\alpha D)+\frac{1}{2\pi\rho r_w DA^2}$$
$$\int_0^{A^2}(\left[F(x,\eta)-Pe^{-x}\right]\left[F(x,\eta)-P(1-\frac{x}{A^2})\right])/(1-\frac{x}{A^2}))dx \quad (۲۱)$$

$$\gamma_p(\eta)=\left\{(\frac{\Delta M}{M})\int_0^{A^2}\left[F(x,\eta)-Pe^{-x}\right]dx\right\}^{-1} \quad (۲۲)$$

تابع غلظت بخش تهی‌سازی در حل انساگر-کهن به فرم زیر ارایه شده است.

$$\frac{dX}{d\eta}=g_w(\eta)\left[X(1-X)-\gamma_w(\eta)W(X-X_w)\right] \quad (۲۳)$$

که در آن X غنای جزء مطلوب در بخش تهی‌سازی می‌باشد. در این رابطه پارامترهای بدون بعد $g_w(\eta)$ و $\gamma_w(\eta)$ از معادلات زیر محاسبه شده است.

$$g_w(\eta)=2(\frac{\Delta M}{M})(\frac{z}{r_w})\int_0^{A^2}\left[F(x,\eta)-Pe^{-x}\right]dx\ /((2\pi\rho aD)+\frac{1}{2\pi\rho r_w DA^2}$$
$$\int_0^{A^2}(\left[F(x,\eta)-Pe^{-x}\right]\left[F(x,\eta)-(-W)(1-\frac{x}{A^2}\right])/(1-\frac{x}{A^2}))dx \quad (۲۴)$$

$$\gamma_w(\eta)=\left\{(\frac{\Delta M}{M})\int_0^{A^2}\left[F(x,\eta)-(-W)e^{-x}\right]dx\right\}^{-1} \quad (۲۵)$$

در روابط فوق X_w، Y_p و Z_f به‌ترتیب جزء مطلوب در پسماند، محصول و خوراک می‌باشند. فاکتور جداسازی، غنی‌سازی و تهی‌سازی به‌ترتیب با روابط زیر محاسبه شده است:

$$\alpha=\frac{Y_p/(1-Y_p)}{Y_w/(1-X_w)}$$
$$\beta=\frac{Y_p/(1-Y_p)}{Z_f/(1-Z_f)}$$
$$\gamma=\frac{Z_f/(1-Z_f)}{X_w/(1-X_w)} \quad (۲۶)$$

توان جداسازی برای یک المان جداسازی برحسب تابع ارزش به‌صورت زیر است [۷]:

$$\delta U=W(2X_w-1)\ln\frac{X_w}{1-X_w}+$$
$$P(2Y_p-1)\ln\frac{Y_p}{1-Y_p}-F(2Z_f-1)\ln\frac{Z_f}{1-Zf} \quad (۲۷)$$

۳. نتایج

در این مقاله فرض شده است که استوانه‌ای چرخان با سرعت خطی ۶۹۰ m/s و با شعاع ۹ cm در ناحیه خلأ قرار دارد و گاز UF_6 با دمای ۳۰۰ K و دبی ۲۰ mg/s از وسط استوانه به داخل سانتریفیوژ وارد می‌شود. در این صورت می‌توان استوانه را در دو بعد شعاع و ارتفاع شبیه‌سازی کرد. شعاع مولکول ۵٫۵ آنگستروم درنظر گرفته شده است. مولکول‌ها در سیستم شبکه‌بندی با توزیع نرمال، توزیع شده‌اند. سرعت اولیه مولکول‌ها بر اساس توزیع تعادلی ماکسولین انتخاب شده است. مدل برخورد مولکول‌ها بر اساس مدل کره سخت متغیر (VHS) با روش DSMC به دست آمده است [۱۷].

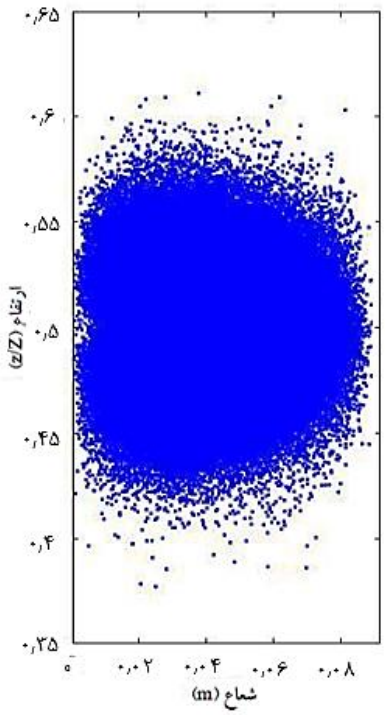
برای محاسبه چشمه دقیق جرمی در مرز دو ناحیه، باید توزیع فراوانی ذرات در مرز دو ناحیه محاسبه شود. برای این منظور می‌بایست موقعیت ذرات بعد از خارج شدن از خوراک تا رسیدن به ناحیه پیوسته محاسبه شود. از آن‌جا که سرعت شعاعی جریان گاز در محور (ورود خوراک به ناحیه محاسباتی) در حدود ۱۵۰ m/s می‌باشد، بنابراین زمان رسیدن به مرز دو ناحیه ۰٫۶ ms است. شکل ۲ موقعیت ذرات را پس از ۰٫۶ ms در جریان ورودی نشان می‌دهد.

با داشتن موقعیت ذرات در مرز دو ناحیه، توزیع فراوانی ذرات چشمه جرمی فرضی گانزبرگر و همکارانش و چشمه جرمی حاصل از روش DSMC به‌ترتیب در شکل‌های ۳ الف و ۳ ب ترسیم شده است.

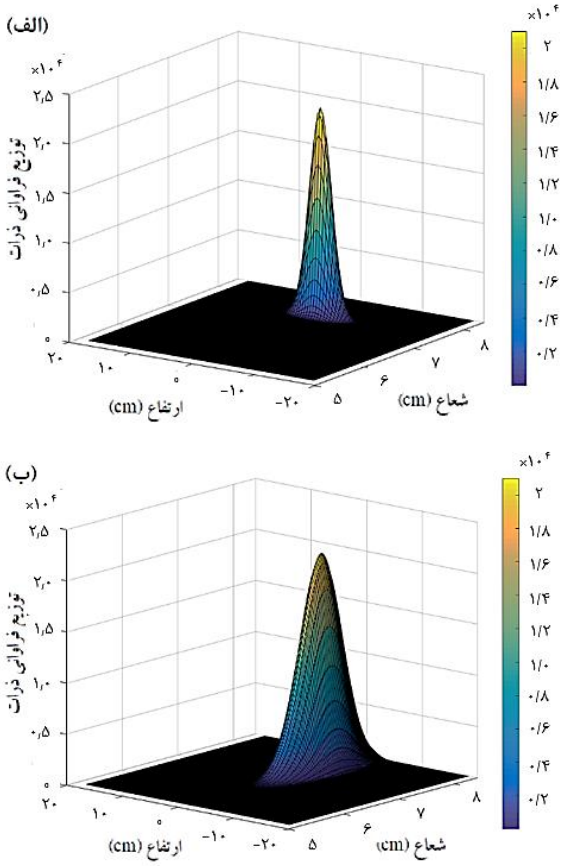
با ایجاد برش‌های افقی از نمودار توزیع فراوانی، کانتور توزیع فراوانی ذرات حاصل از چشمه جرمی فرضی گانزبرگر و همکارانش و روش DSMC به‌ترتیب در شکل‌های ۴ الف و ۴ ب ترسیم شده است.

www.SID.ir

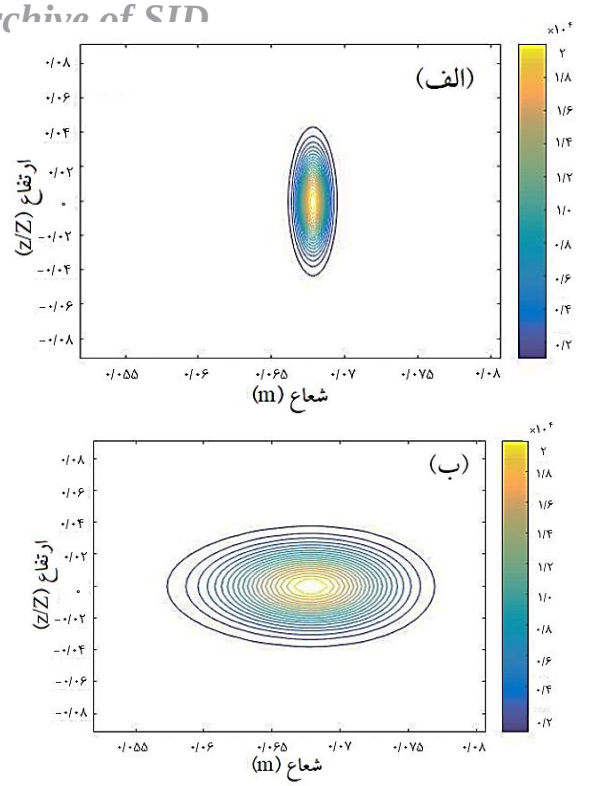
Archive of SID



شکل ۲. موقعیت ذرات پس از ۰٫۶ ms در خوراک ورودی.



شکل ۳. توزیع فراوانی ذرات (الف) گانزبرگر و همکارانش (ب) روش DSMC.



شکل ۴. برش افقی از تابع فراوانی (الف) گانزبرگر و همکارانش (ب) روش DSMC.

کانتور ایجاد شده به‌صورت تابع گوسی می‌باشد که می‌توان با رابطه زیر معرفی نمود:

$$M_{\circ} = S_{\circ} e^{(-(a_1(x-x_s)^2 + a_2(y-y_s)^2))} \qquad (۲۸)$$

در رابطه فوق $M_{\circ}$ چشمه جرمی با روش DSMC می‌باشد. مطابق شکل ۳، مقدار $S_{\circ}$ ارتفاع قله می‌باشد که با توجه به مقدار گازی که در واحد زمان وارد می‌شود، محاسبه می‌گردد. مقادیر α_1 و α_2 با توجه به شکل ۴ ب در جدول ۱ گزارش شده است. x_s و y_s مختصات محل ورود خوراک یا مرکز آن در نظر گرفته شده است.

با جای‌گذاری چشمه جرمی با روش DSMC در رابطه ۷، معادله نهایی به صورت زیر حاصل شده است:

$$F(x,y) = -\frac{B^2\sqrt{\alpha_1\pi}S_{\circ}}{4A^4}(y-y_s)e^{(-\alpha_2(y-y_s)^2)}$$
$$\left[(x-x_s)E(x_T-x_s) - (x-x_s)E(x-x_s) + \frac{1}{\sqrt{\alpha_1\pi}}\left[e^{(-\alpha_1((x_T-x_s)^2))} - e^{(-\alpha_1((x-x_s)^2))}\right]\right] \qquad (۲۹)$$

پس از محاسبه چشمه دقیق جرمی با روش DSMC در مرز دو ناحیه، سانتریفیوژی با مشخصات جدول ۲ در نظر گرفته شده است. این ماشین سانتریفیوژ یک ماشین پیشنهاد شده در مراجع است [۱۰، ۷، ۱۱، ۱۳].

www.SID.ir

Archive of SID

جهت بررسی تأثیر حضور گاز سبک به‌همراه خوراک، ترکیب مخلوط دو جزیی ((Z_UF۶=۰/۹۷ و Z_HF=۰/۰۳)، (Z_UF۶=۰/۹۳ و Z_HF=۰/۰۷) و (Z_UF۶=۰/۹ و Z_HF=۰/۱)) در نظر گرفته شده است. پارامترهای تابع گوسی برای مقادیر مختلف گاز سبک هیدروژن فلوراید همراه خوراک در جدول ۳ ارایه شده است.

با محاسبه چشمه جرمی برای یک مخلوط دو جزیی ((Z_UF۶=۰/۹۷ و Z_HF=۰/۰۳)، (Z_UF۶=۰/۹۳ و Z_HF=۰/۰۷) و (Z_UF۶=۰/۹ و Z_HF=۰/۱)) در مرز دو ناحیه و جای‌گذاری در معادله انساگر- پنکیک ناهمگن و حل آن با روش تفاضل محدود، شار جرمی محوری محاسبه شده است. شکل ۵ شار جرمی محوری مخلوط را نشان می‌دهد.

جدول ۱. مشخصات چشمه جرمی

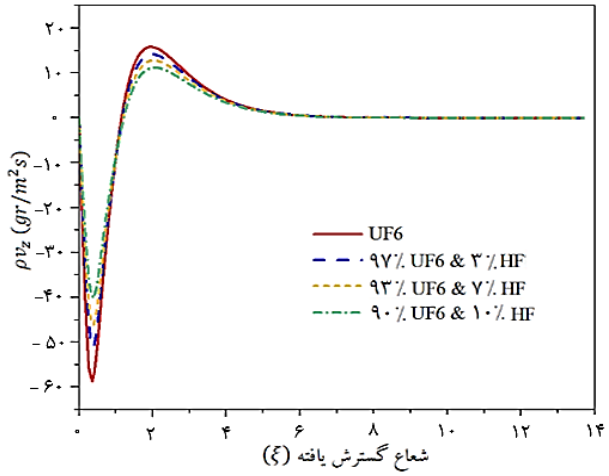
شماره	نوع گاز	چشمه جرمی	α_1	α_2	S_0
۱	UF_6	گانزبرگر و همکارانش	۱۳/۸۱	۱۳/۸۱	$2/1\times10^4$
۲	UF_6	DSMC	۰/۴	۱۸	$2/1\times10^4$

جدول ۲. مشخصات سانتریفیوژ فرضی

کمیت	مقدار
طول	۳/۳۹۳ متر
شعاع	۹/۱۴۵ سانتی‌متر
سرعت خطی روتور	۷۰۰ متر بر ثانیه
دبی خوراک	۱۰۰ گرم بر ساعت
برش	۰/۴
فشار دیواره	۱۰۰ تور
دمای متوسط	۳۰۰ کلوین
گرادیان دمای دیواره	۱ کلوین بر متر

جدول ۳. پارامترهای تابع گوسی برای مخلوط گازی با روش DSMC

شماره	نوع گاز	α_1	α_2	S_0
۱	Z_UF۶=۰/۹۷ و Z_HF=۰/۰۳	۰/۱۹	۳۳	$1/91\times10^4$
۲	Z_UF۶=۰/۹۳ و Z_HF=۰/۰۷	۰/۰۹	۱۵	$1/82\times10^4$
۳	Z_UF۶=۰/۹۰ و Z_HF=۰/۱	۰/۰۹	۲۷	$1/73\times10^4$



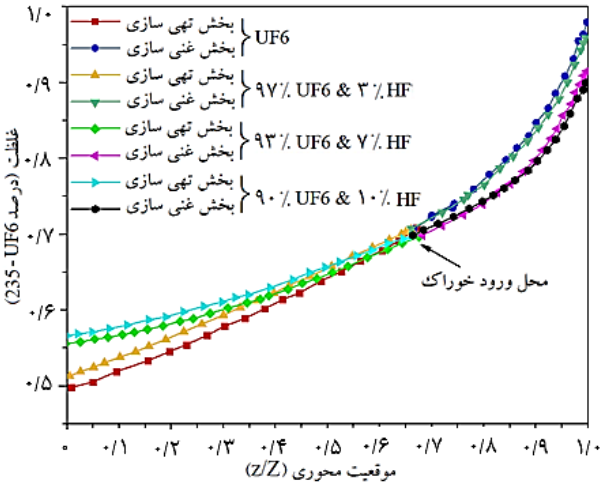
شکل ۵. شار جرمی محوری برای یک مخلوط (Z_UF۶=۰/۹۷ و Z_HF=۰/۰۳)، (Z_UF۶=۰/۹۳ و Z_HF=۰/۰۷) و (Z_UF۶=۰/۹ و Z_HF=۰/۱).

با توجه به شکل ۵، شار جرمی محوری با افزایش مقدار گاز سبک کاهش یافته است. بنابراین حضور گاز سبک باعث کاهش جریان محوری در روتور می‌گردد که با افزایش مقدار گاز سبک شار جرمی محوری کاهش می‌یابد. با جای‌گذاری تابع جریان حاصل از معادله انساگر- پنکیک ناهمگن در معادله نفوذ انساگر- کوهن، غلظت مخلوط در طول روتور حاصل شده است. هم‌چنین جزء UF_6 به‌صورت دو ایزوتوپ $^{235}UF_6$ و $^{238}UF_6$ درنظر گرفته شده است. شکل ۶ غلظت مخلوط در طول روتور را نشان می‌دهد.

با توجه به شکل ۶ برای محاسبه پروفایل غلظت مخلوط در طول روتور، جزء UF_6 به‌صورت دو ایزوتوپ $^{235}UF_6$ و $^{238}UF_6$ درنظر گرفته شده است. غلظت $^{235}UF_6$ با افزایش مقدار گاز سبک همراه خوراک در طول روتور در قسمت بالا (محصول) و در قسمت پایین (پسماند) روتور به‌ترتیب کاهش و افزایش یافته است. هم‌چنین محل خوراک بهینه برای مخلوط گازی مختلف یکسان می‌باشد. با محاسبه غنای جز مطلوب ($^{235}UF_6$) در محصول و پسماند با استفاده از روابط ۴۰ و ۴۱، پارامترهای جداسازی و توان جداسازی محاسبه شده است. در جدول ۴ پارامترهای جداسازی محاسبه شده برای مخلوط گازی ۱. (Z_UF۶=۱/۰۰ و Z_HF=۰/۰۰)، ۲. (Z_UF۶=۰/۹۷ و Z_HF=۰/۰۳)، ۳. (Z_UF۶=۰/۹۳ و Z_HF=۰/۰۷) و ۴. (Z_UF۶=۰/۹ و Z_HF=۰/۱) گزارش شده است.

www.SID.ir

Archive of SID



شکل ۶. غلظت مخلوط گازی (Z_{UF_6}=۰٫۹۷ و Z_{HF}=۰٫۰۳)، (Z_{UF_6}=۰٫۹۳ و Z_{HF}=۰٫۰۷) و (Z_{UF_6}=۰٫۹ و Z_{HF}=۰٫۱) در طول روتور.

جدول ۴. پارامترهای جداسازی برای مخلوط گازی

نوع گاز	غنای جزء مطلوب در محصول (Y_p)	غنای جزء مطلوب در پسماند (X_w)	فاکتور جداسازی (α)	ضریب غنی سازی (β)	توان جداسازی (kg UF$_6$ SWU/yr)
۱	۰٫۰۰۹۸	۰٫۰۰۵۰	۱٫۹۹۶۱	۱٫۴۰۳۸	۲۳٫۷۸۶۲
۲	۰٫۰۰۹۶	۰٫۰۰۵۱	۱٫۸۹۷۷	۱٫۳۷۴۳	۲۱٫۱۶۹۹
۳	۰٫۰۰۹۲	۰٫۰۰۵۶	۱٫۶۷۱۳	۱٫۳۱۰۳	۱۲٫۸۹۷۸
۴	۰٫۰۰۹۰	۰٫۰۰۵۷	۱٫۶۱۲۹	۱٫۲۸۸۴	۱۱٫۶۰۴۶

با توجه به جدول ۴، با افزایش مقدار گاز سبک هیدروژن فلوراید همراه گاز هگزافلوراید اورانیم، مقدار غنای جزء مطلوب در محصول و پسماند به‌ترتیب کاهش و افزایش یافته است. فاکتور جداسازی و ضریب غنی‌سازی نیز با افزایش مقدار گاز سبک کاهش یافته است. هم‌چنین با توجه به جدول ۴، مقدار توان جداسازی با افزایش مقدار گاز سبک کاهش یافته است.

۴. بحث و نتیجه‌گیری

ناحیه گاز رقیق و قسمتی از ناحیه پیوسته به عنوان ناحیه محاسباتی برای تعیین چشمه جرمی در نظر گرفته شد. با استفاده از یک شرط مرزی جدید، چشمه جرمی در محل اتصال دو ناحیه رقیق و پیوسته با روش DSMC محاسبه و با چشمه جرمی فرضی گانزبرگر و همکارانش مقایسه شد. هم‌چنین اثر حضور مقادیر مختلف گاز سبک هیدروژن فلوراید همراه با گاز هگزافلوراید اورانیم در خوراک بر چشمه جرمی در مرز دو ناحیه مورد بررسی قرار گرفت. نتایج نشان داد که افزایش میزان گاز سبک هیدروژن فلوراید تا ۱۰ درصد همراه خوراک باعث کاهش شار جرمی محوری می‌گردد. افزایش مقدار گاز سبک هیدروژن فلوراید همراه خوراک باعث شد غنای جزء مطلوب در محصول و پسماند به ترتیب کاهش و افزایش یابد. هم‌چنین افزایش حضور گاز سبک هیدروژن فلوراید در خوراک باعث کاهش توان جداسازی و فاکتور جداسازی گردید. بنابراین با استفاده از روش به کار رفته در این مقاله، ضمن استفاده از روش DSMC و کاهش خطای شبیه‌سازی در ناحیه رقیق، رفتار گاز سبک در تمام نواحی ماشین سانتریفیوژ مورد بررسی قرار گرفت.

مراجع

1. A. Norouzi, et al, *Parameters optimization of a counter-current cascade based on using a real coded genetic algorithm*, Separation Science and Technology, **46 (14)**, 2223–2230 (2011).
2. J. Safdari, A. Noroozi, R. Toumari, *Using a real coded PSO algorithm in the design of a multi-component countercurrent cascade*, Separation Science and Technology, **52 (18)**, 2855-2862 (2017).
3. V.D. Borisevich, et al, *On ideal and optimum cascades of gas centrifuges with variable overall separation factors*, Chemical Engineering Science, **116 (6)**, 465–472 (2014).
4. K. Cohen, *The theory of isotope separation as applied to the large scale production of U235*, McGraw-Hill, 103-125 (1951).
5. L.D. Cloutman, R.A. Gentry, *Numerical simulation of the countercurrent flow in a gas centrifuge*, Los Alamos Scientific Laboratory Rep. LA-UR-81-1821, Los Alamos (1981).
6. Soubbaramayer, Centrifugation, Applied Physics, **35**, 183-244 (1979).
7. D.R. Olander, *The theory of uranium enrichment by the gas centrifuge*, Progress in Nuclear Energy, **8**, 1-33 (1981).
8. M.D. Gunzburger, H.G. Wood, *A finite element method for the Onsager pancake equation*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, **31**, 43–59 (1982).
9. H.G. Wood, J.B. Morton, *Onsager's pancake approximation for the fluid dynamics of a gas centrifuge*, Journal of Fluid Mechanics, **101**, 1-31 (1980).

www.SID.ir

Archive of SID

10. M.D. Gunzburger, H.G. Wood, J.A. Jordan, *A finite element method for gas centrifuge flow problems*, Journal on Scientific and Statistical Computing, **5**, 78-94 (1984).
11. S. Zeng, H.G. Wood, *Analytical solution of Onsager's Pancake equation with mass sources and sinks*, Separation Science and Technology, **50 (4)**, 611-617 (2015).
12 S. Pradhan, V. Kumaran, *The generalized Onsager model for the secondary flow in a high-speed rotating cylinder*, Journal of Fluid Mechanics, **686**, 140-142 (2011).
13. V. Kumaran, S. Pradhan, *The generalized Onsager model for a binary gas mixture*, Journal of Fluid Mechanics, **753**, 307-359 (2014).
14. P. Roblin, F. Doneddu, *Direct Monte-Carlo simulations in a gas centrifuge*, Department Des Precedes d'Enrichissement, 196-170 (2001).
15. H.G. Wood, *Analysis of feed effects on a single-stage gas centrifuge cascade*, Separation Science and Technology, **30 (13)**, 2631-2657 (1995).
16. E. Ratz, *One-Stage enrichment with centrifuges*, Proceedings of the sixth workshop an gases in strong, Rotation, Tokyo, 621-654 (1985).
17. G.A. Bird, *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*, Oxford Univ. Press, New York (1994).
18. D.R. Olander, *Technical basis of the gas centrifuge*, Advances in Nuclear Science & Technology, **6**, 105-174 (1972).
19. W.H. Furry, R.C. Jones, L. Onsager, *On the theory of isotope separation by thermal diffusion*, Physical Review, **55**, 1083-1095 (1939).

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
مسعود خواجه نوری، سید جابر صفدری، علی حقیقی اصل، علی نوروزی (۱۴۰۰)، مدل‌سازی و شبیه‌سازی رفتار گاز داخل یک روتور سانتریفیوژ گازی در حضور گاز سبک هیدروژن فلوراید با استفاده از روش ترکیبی DSMC و انساگر- پنکیک، ۹۸، ۴۴-۵۳
DOI: 10.24200/nst.2021.1314
Url: https://jonsat.nstri.ir/article_1314.html

www.SID.ir