

## بررسی اثر حضور گاز سبک نیتروژن همراه با گاز زینان در یک روتور سانتریفیوژ با روش مستقیم مونت کارلو و تابع توزیع بولتزمن

صادق یوسفی نسب<sup>(۲)</sup> - مسعود خواجه نوری<sup>(۱)</sup> - سید جابر صفدری<sup>(۲)</sup> - محمد حسن  
ملاح<sup>(۲)</sup> - محمد حسین عسکری<sup>(۱)</sup>

(۱) سازمان انرژی اتمی - شرکت فناوری‌های پیشرفته ایران  
(۲) سازمان انرژی اتمی، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، پژوهشکده چرخه سوخت

### چکیده:

در طی عملیات غنی سازی رطوبت هوا به دفعات و در مکان‌های مختلف زنجیره‌ها به خطوط لوله سیال نشت می کند و باعث برهم زدن خلاء موجود در ماشین و در نهایت باعث کاهش میزان غنی سازی می گردد. در این مقاله تاثیر غلظت و دانسیته داخل یک سانتریفیوژ فرضی با تاثیر یک محرک خطی دمایی روی دیواره روتور بر ایجاد جریان محوری با خوراک گازی دو جزئی ( $Z_{Xe}=95$  و  $Z_{N_2}=5$ ) و ( $Z_{Xe}=90$  و  $Z_{N_2}=10$ ) با روش شبیه سازی مستقیم مونت کارلو (DSMC) و روش تابع توزیع بولتزمن مورد بررسی قرار گرفته است. همچنین تغییرات شار جرم محوری در راستای شعاع سانتریفیوژ با حضور گاز سبک نیتروژن مورد بررسی قرار گرفته شده است.

کلید واژه‌ها: روتور سانتریفیوژ، گاز نیتروژن، DSMC، خوراک گازی

## Investigation into the effect of nitrogen light gas presence along with xenon in a centrifuge rotor using direct Monte Carlo method and Boltzmann distribution function

### Abstract:

During the enrichment operation, air moisture leaks into the fluid pipelines so many times in different places of the cascades which causes the disruption of the vacuum available in the machine, in turn, leading in the decrement of the enrichment value. In this paper, the influence of concentration and density within a hypothetical centrifuge as well as the effect of a thermal linear factor on the rotor wall for generating the axial flow with gaseous two-component feed ( $Z_{Xe} = 95$ ,  $Z_{N_2} = 5$ ) and ( $Z_{Xe} = 90$  and  $Z_{N_2} = 10$ ) have been studied using the direct Monte Carlo Method and Boltzmann distribution function. Furthermore, axial mass flux changes along the centrifuge radius have been investigated with the presence of light nitrogen gas.

**Keywords:** centrifuge rotor, nitrogen gas, DSMC, gaseous feed

**Email:** syousefy@aeoi.org.ir

## ۱- مقدمه :

استفاده فزاینده از ایزوتوپ‌های پایدار و جداسازی ایزوتوپی معمولاً ناشی از تقاضای تحقیقات بنیادی فیزیک، شیمی، روش‌های تشخیص و درمان پزشکی و توسعه مواد جدید است و مصرف آن‌ها روزبه‌روز در حال افزایش می‌باشد [۱-۲]. بنابراین نیاز به توسعه روش‌هایی برای جداسازی ایزوتوپ‌های پایدار وجود دارد. 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 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 [۳-۴]. سابرمایر در سال ۱۹۶۱ به منظور ساده‌سازی بیش‌تر، به طور کامل از اثر کپ‌ها صرف نظر نمود و با فرض اینکه تغییرات جریان در راستای شعاع است، به حل معادلات پرداخت [۵]. اولاندر با مقایسه‌ای که بین این روش‌ها انجام داد، نشان داد که نتایج حاصل، موافقت خوبی با یکدیگر دارند [۶]. با پیشرفت سیستم‌های محاسباتی، روش‌های دقیق‌تری همچون روش‌های لاگرانژی مورد استفاده قرار گرفتند. یکی از این روش‌ها، روش شبیه‌سازی مستقیم مونت کارلو می‌باشد ( $DSMC^1$ ) که برای شبیه‌سازی جریان‌های گاز رقیق مورد استفاده قرار می‌گیرد. با توجه به اینکه در مقالات اثر گاز سبک همراه با خوراک کمتر پرداخته شده است [۷]، در این مقاله برای اولین بار با روش شبیه‌سازی مستقیم مونت کارلو به تاثیر پروفایل جریان و غلظت گاز زینان همراه با گاز نیتروژن در داخل سانتریفیوژ گازی پرداخته شده است. پروفایل‌های غلظت و دانسیته داخل یک سانتریفیوژ فرضی با مقادیر مختلف ۵ و ۱۰ درصد مولی گاز نیتروژن همراه با گاز زینان با روش تابع توزیع بولتزمن مورد مقایسه قرار گرفته است. همچنین تاثیر یک محرک خطی دمایی روی دیواره روتور بر ایجاد جریان محوری (برگشت کامل) یک ماشین سانتریفیوژ و در نتیجه ایجاد تغییرات غلظت برای هر جزء با توجه به جرم مولکولی آن گاز در راستای محوری و نیز تغییرات شار جرم محوری در راستای شعاع سانتریفیوژ مورد بررسی قرار گرفته است.

## ۲- تئوری

### ۲-۱ روش شبیه‌سازی مستقیم مونت کارلو

روش شبیه‌سازی مستقیم مونت کارلو اولین بار توسط برد [۸، ۹] ارائه شد. در این روش تعداد زیادی از مولکول‌های مدل به منظور شبیه‌سازی مولکول‌های واقعی بکار می‌روند که تعداد آن‌ها به مراتب کمتر از

<sup>1</sup> Direct Simulation Monte-Carlo

مولکول‌های واقعی است. بنابراین هر مولکول مدل، بیانگر تعداد زیادی از مولکول‌های واقعی است. دامنه محاسباتی به تعداد زیادی سلول و زیر سلول تقسیم می‌شود. برای انجام محاسبات برخورد در زیر سلول از روش  $NTC$  معرفی شده توسط برد استفاده شده است [۸، ۹]. احتمال برخورد بین دو مولکول شبیه سازی شده در یک بازه زمانی برابر است با:

$$P = F_n \sigma_T C_r \Delta t / V_c \quad (2)$$

$F_n$  بیانگر تعداد مولکول‌های واقعی که توسط یک مولکول مدل جانشین شده است،  $V_c$  حجم سلول،  $\sigma_T$  سطح مقطع برخورد کل که تابعی از سرعت نسبی بین دو مولکول می‌باشد،  $C_r$  سرعت نسبی بین دو مولکول می‌باشد. حداکثر احتمال برخورد به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$P_{max} = F_n (\sigma_T C_r)_{max} \Delta t / V_c \quad (3)$$

$nV_c$  بیانگر متوسط تعداد مولکول‌های واقعی در هر سلول است. بنابراین متوسط تعداد مولکول‌های شبیه سازی شده به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$N = nV_c / F_n \quad (4)$$

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

$$0.5 \bar{N} N F_n (\sigma_T C_r)_{max} \Delta t / V_c \quad (5)$$

$\bar{N}$  بیانگر متوسط مقدار  $N$  می‌باشد. انتخاب جفت مولکول برخورد کننده با احتمال زیر صورت می‌گیرد:

$$\sigma_T C_r / (\sigma_T C_r)_{max} \quad (6)$$

از میان حداکثر جفت‌های ممکن تنها جفتی انتخاب می‌شود که نسبت بالا برای این جفت بزرگتر از عدد تصادفی  $R_f$  انتخاب شده باشد. به طور کلی روش  $DSMC$  شامل مراحل: ۱- مقدار دهی اولیه، ۲- شبکه بندی ناحیه محاسباتی، ۳- حرکت دادن ذرات و برخورد با سطح، ۴- برخورد ذرات با یکدیگر، ۵- نمونه گیری و ۶- بازگشت به مرحله سوم می‌باشد.

## ۲-۲ روش تابع توزیع بولتزمن

با استفاده از تابع توزیع بولتزمن برای چگالی عددی یک ذره، چگالی عددی در راستای شعاعی به صورت زیر قابل محاسبه می‌باشد.

$$n(r) = A \exp\left(-\frac{U(r)}{kT}\right) = A \exp\left(-\frac{m r^2 \omega^2}{2k_B T}\right) \quad (7)$$

که در آن فاکتور نرمال سازی  $A$  بصورت زیر بدست می‌آید.

$$A = \frac{Nm\omega^2}{2\pi kT} \left[ \exp\left(\frac{mR^2\omega^2}{2k_B T}\right) - 1 \right]^{-1} \quad (8)$$

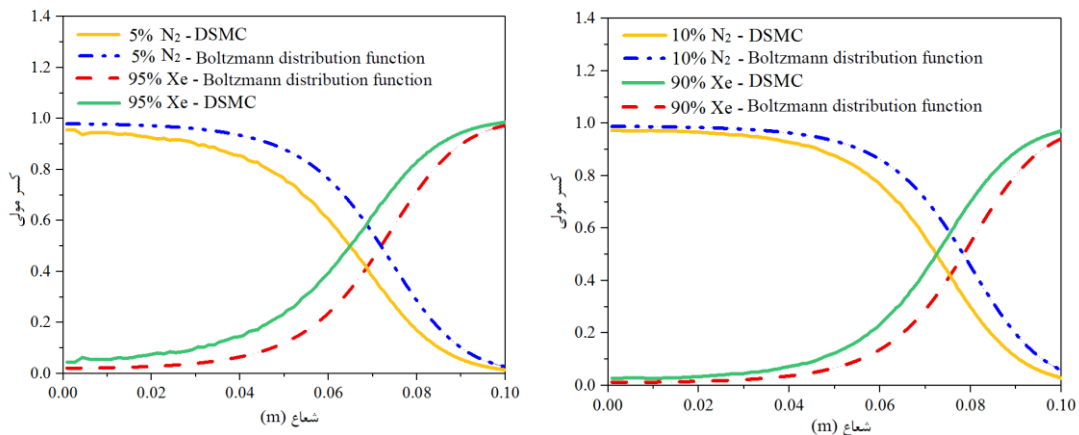
با محاسبه  $A$  چگالی عددی نسبت به شعاع یک ماشین سانتریفیوژ به صورت زیر نوشته می‌شود.

$$n(r) = \frac{Nm\omega^2}{2\pi k_B T L} \frac{\exp\left(\frac{m r^2 \omega^2}{2k_B T}\right)}{\exp\left(\frac{m R^2 \omega^2}{2k_B T}\right) - 1} \quad (9)$$

در روابط بالا،  $N$  تعداد کل مولکول‌ها،  $m$  جرم مولکول گاز،  $M$  جرم مولکولی گاز (حاصلضرب جرم مولکول در عدد آووگادرو)،  $\omega$  سرعت زاویه‌ای،  $k_B$  ثابت بولتزمن،  $T$  دمای مطلق،  $L$  طول استوانه،  $R$  شعاع استوانه،  $R_G$  ثابت جهانی گازها و  $r$  مسیر شعاعی می‌باشد [۱۰].

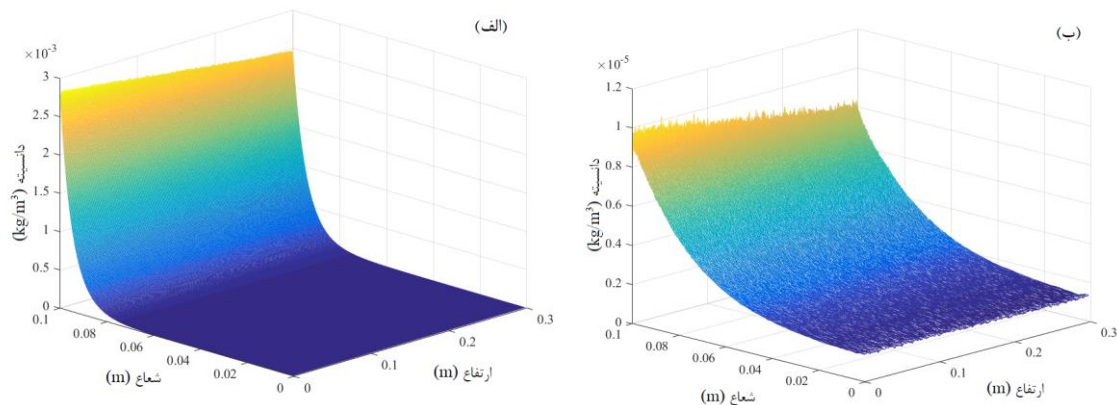
### ۳- نتایج:

سانتریفیوژ فرضی مورد بررسی، استوانه‌ای به طول ۰/۳ متر و شعاع ۰/۱ متر است که با سرعت زاویه‌ای ثابت ۶۰۰۰ دور بر دقیقه یا ۶۰۰ متر بر ثانیه در حال چرخش است. مخلوط گازی درون استوانه حاوی مخلوط دو جزئی ( $Z_{Xe}=90$  و  $Z_{N2}=10$ ) و ( $Z_{Xe}=90$  و  $Z_{N2}=5$ ) انتخاب شده است. تعداد مولکول‌های شبیه‌سازی در این تحقیق برابر ۵۰۰/۰۰۰ مولکول شبیه سازی شده می‌باشد و تعداد کل مولکول‌ها بر واحد حجم که به طور یکنواخت در محیط شبیه سازی قرار می‌گیرند برابر  $10^{21} \times 1/60$  انتخاب گردیده است. دمای اولیه مولکول‌های گاز ۳۰۰ کلین در نظر گرفته شده است. شکل (۱) تغییرات غلظت مخلوط گازی ۹۵ درصد گاز زینان و ۵ درصد نیتروژن، ۹۰ درصد گاز زینان و ۱۰ درصد نیتروژن در راستای شعاعی ماشین سانتریفیوژ با روش  $DSMC$  و حل تابع توزیع بولتزمن (با توجه به رابطه (۹)) را نشان می‌دهد. با افزایش میزان گاز سبک و کاهش مقدار جز سنگین‌تر نمودار غلظت روش  $DSMC$  به روش تابع توزیع بولتزمن نزدیکتر می‌شود اختلاف تغییرات غلظت به دست آمده از روش حل تابع توزیع بولتزمن با نتایج روش  $DSMC$  می‌تواند به دلیل عدم در نظر گرفتن اثرات واقعی سطح مقطع برخورد، ضریب نفوذ و اثرات ضریب ویسکوزیته در محاسبه قطر موثر در حل‌های تابع توزیع بولتزمن دانست که در روش  $DSMC$  تمامی این اثرات به صورت میکروسکوپی لحاظ گردیده است لذا می‌توان گفت که نتایج به دست آمده از روش  $DSMC$  نتایج قابل قبول‌تری نسبت به نتایج حل تابع توزیع بولتزمن می‌باشند.



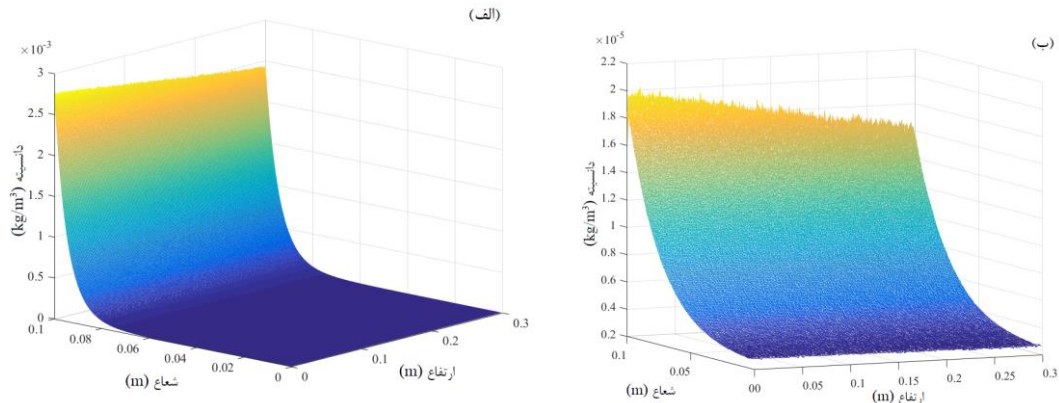
شکل (۱): تغییرات شعاعی غلظت مخلوط گازی ۹۵ درصد گاز زینان و ۵ درصد گاز نیتروژن و همچنین ۹۰ درصد گاز زینان و ۱۰ درصد گاز نیتروژن در یک ماشین سانتریفیوژ با روش DSMC و روش تابع توزیع بولتزمن

شکل (۲) تغییرات دانسیته مخلوط گازی اجزاء (الف) ۹۵ درصد گاز زینان و (ب) ۵ درصد نیتروژن و در شکل (۳) مخلوط گازی اجزاء (الف) ۹۰ درصد گاز زینان و (ب) ۱۰ درصد نیتروژن در راستای شعاعی داخل روتور ماشین سانتریفیوژ با روش DSMC را نشان می‌دهد. دانسیته ذرات در جهت شعاعی در طول دیواره از بالا به پایین افزایش می‌یابد. ایجاد گرادیان خطی روی دیواره روتور سبب تغییر دانسیته بر روی دیواره گردیده است بطوریکه در بالای روتور بیشترین مقدار دانسیته ایجاد شده است.



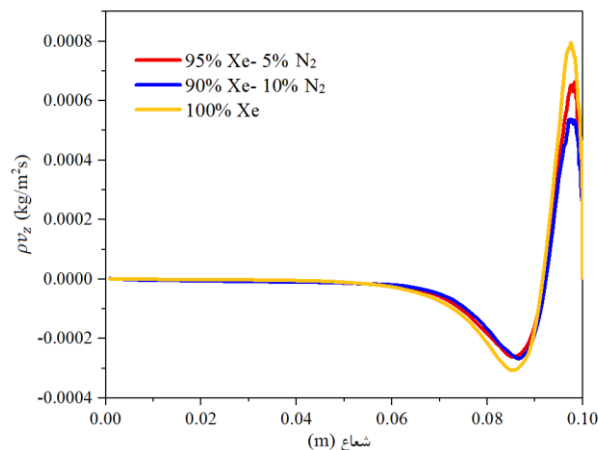
شکل (۲): تغییرات دانسیته مخلوط گازی اجزاء (الف) ۹۵ درصد گاز زینان و (ب) ۵ درصد گاز نیتروژن با روش DSMC در یک ماشین سانتریفیوژ

همچنین در شکل (۳) مخلوط گازی اجزاء (الف) ۹۰ درصد گاز زینان و (ب) ۱۰ درصد نیتروژن در راستای شعاعی داخل روتور ماشین سانتریفیوژ با روش DSMC را نشان می‌دهد.



شکل (۳): تغییرات دانسیته مخلوط گازی اجزاء (الف) ۹۰ درصد گاز زینان و (ب) ۱۰ درصد گاز نیتروژن با روش DSMC در یک ماشین سانتریفیوژ

شکل (۴) تغییرات فلاکس جرمی محوری در جهت شعاع برای مقادیر مختلف گاز سبک نیتروژن همراه گاز زینان در ارتفاع ۱۵ سانتی متری با روش DSMC را نشان می‌دهد. با توجه به اعمال گرادیان دمایی روی دیواره روتور، جریان در نزدیک دیواره به سمت بالا و در ابتدای لایه استوارتسون به سمت پایین حرکت می‌کند. این جریان رفت و برگشتی به سمت بالا و پایین روتور حاکی از ایجاد یک جریان چرخشی در لایه استوارتسون می‌باشد. همچنین با افزایش مقدار درصد مولی گاز سبک، فلاکس جرمی محوری در جهت شعاع در نزدیک دیواره (در لایه استوارتسون) کاهش یافته است.



شکل (۴): تغییرات فلاکس جرمی محوری در جهت شعاع برای مقادیر مختلف گاز سبک نیتروژن همراه با گاز زینان با روش DSMC

#### ۴- بحث و نتیجه گیری

نتایج نشان داد که افزایش حضور گاز سبک باعث نزدیک شدن نمودار غلظت با روش توزیع بولتزمن به روش DSMC می‌گردد. با اعمال یک محرک حرارتی 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 دیواره روتور تا بالای روتور می‌گردد در نتیجه در یک ماشین سانتریفیوژ با اعمال یک محرک حرارتی بر روی دیواره روتور آن، می‌توان علاوه بر جدایش شعاعی، به یک جدایش محوری نیز دست یافت. حضور گاز سبک همراه با گاز زینان باعث کاهش شار جرم محوری در جهت شعاع سانتریفیوژ می‌گردد و با افزایش میزان گاز های سبک، شار جرمی محوری در لایه استوارتسون کاهش می‌یابد.

#### ۵- مراجع

- [1] A. Norouzi, A.H. Minuchehr, F. Zolfaghari, A. Hagighattab, *Separation science and technology* 46(14) (2011) 2223–2230.
- [2] J. Safdari, A. Noroozi, R. Toumari, *Separation Science and Technology*, article in press (2017) <http://www.tandfonline.com/loi/lsst20>.
- [3] Wood, H. G, and Morton, J. B., " Onsager's pancake approximation for the fluid dynamics of a gas centrifuge", *J. Fluid Mech*, pp.1–31,299-311(1980).
- [4] K. Cohen, "The Theory of Isotope Separation as Applied to the Large Scale Production of UTM." Pp.103-125, (1951).
- [5] Soubbaramayer. "Centrifugation", *Applied Physics*, vol.35, pp. 183-244, (1979)
- [6] D.R. Olander, *Progress in Nuclear Energy* 8(1) (1981) 1-33.
- [7] P. Roblin, F. Doneddu, *Rarified gas dynamics: 22nd International Symposium*, (2001) 169 - 173.
- [8] Bird, G. A., "The DSMC method," *The University of Sydney*, pp.208-211, (2013).
- [9] G.A. Bird, *Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows*, Oxford University Press, New York, 1994.
- [10] C. Cercignani, "The Boltzman equation and its applications", *Lectures series in mathematics*. 68, Berlin, New York, Springer-Verlag.