حل تحلیلی معادله توزیع غلظت در سیستم‌های چندجزیی

رفیعی، وحید [۱]- **فردکاشانی، محمدرضا**[۱] - **صفدری، سیدجابر***[۲]- **ملاح، محمدحسن**[۲] -**عسکری، محمدحسین** [۱]- **یوسفی نسب، صادق**[1]

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

چکیده:

به علت گسترش کاربردهای ایزوتوپ‌های پایدار در زمینه‌های مختلف تقاضا برای تولید آن‌ها در حال گسترش می‌باشد. سانتریفیوژ گازی یکی از روش‌های جداسازی ایزوتوپ‌های پایدار است. شناخت رفتار گاز درون روتور سانتریفیوژ نیازمند حل معادلات حاکم شامل معادلات جریان (شامل ۱ معادله پیوستگی کلی، ۳ معادله مومنتوم، ۱ معادله انرژی و ۱ معادله حالت) و سپس حل معادله توزیع غلظت ایزوتوپ‌ها می‌باشد. در این مقاله معادله توزیع غلظت داخل سانتریفیوژ در حالت چندجزیی با استفاده از روش تحلیلی استخراج گردید. معادله نفوذ به‌دست‌آمده یک معادله دیفرانسیل جزیی دوبعدی غیرخطی می‌باشد و حل آن به‌طور تحلیلی بسیار مشکل می‌باشد. با روش تقریب میانگین‌گیری شعاعی می‌توان معادله دیفرانسیل جزیی دوبعدی در جهت r و z را به یک معادله دیفرانسیل معمولی در راستای z تبدیل شد. پس از استخراج معادله توزیع غلظت، نتایج کد پیاده‌سازی شده برای گازهای هگزا فلوراید تلوریم، زنون، هگزا فلوراید تنگستن و اسمیم تتراکسید ارائه شد. نتایج مدل‌سازی این مطالعه با مراجع مطابقت بالایی را نشان می‌دهد.

کلید واژه‌ها: سانتریفیوژ گازی، سیستم‌های چندجزیی، پروفایل غلظت، معادله نفوذ

مقدمه:

ایزوتوپ‌های پایدار کاربرد بسیار وسیعی در صنعت، پزشکی، علوم هسته‌ای، زمین‌شناسی، کشاورزی، داروسازی و تحقیقات علمی دارند. در روش سانتریفیوژ گازی جداسازی ایزوتوپ‌ها بر اساس نیروی گریز از مرکز انجام می‌شود. در حالت کلی، تحلیل رفتار گاز درون روتور سانتریفیوژ، نیازمند بررسی و حل هم‌زمان معادلات جریان (شامل ۱ معادله پیوستگی کلی، ۳ معادله مومنتوم، ۱ معادله انرژی و ۱ معادله حالت) و سپس حل معادله توزیع غلظت ایزوتوپ‌ها می‌باشد. برای تحلیل رفتار گاز درون ناحیه پیوسته روتور سانتریفیوژ، در روش‌های تحلیلی با تقریب خوبی می‌توان معادلات ناویر استوکس و انرژی را مستقل از توزیع غلظت ایزوتوپ‌ها در نظر گرفت[۱] . لذا ابتدا به حل معادلات جریان گاز پرداخته می‌شود. مهم‌ترین مشخصات جریان شامل: مؤلفه محوری سرعت، مؤلفه شعاعی سرعت، شار جرمی محوری، توزیع فشار، تابع جریان، جریان چرخشی درون روتور می‌باشد. سپس بعد از حل معادلات جریان، معادله توزیع غلظت گاز حل می‌گردد که حاصل آن پروفایل غلظت ایزوتوپ‌های گاز می‌باشد. معادله نفوذ به‌دست‌آمده یک معادله دیفرانسیل جزیی دوبعدی غیرخطی می‌باشد و حل آن به‌طور تحلیلی بسیار مشکل می‌باشد. با روش تقریب میانگین‌گیری شعاعی می‌توان معادله دیفرانسیل جزیی دوبعدی در جهت r و z را به یک معادله دیفرانسیل معمولی در راستای z تبدیل کرد. این روش اولین بار توسط کوهن معرفی شد و سپس توسط سابرمایر توسعه داده شد[۲و۳]. درنهایت با گسسته سازی معادلات و استفاده از روش تکرار، معادلات حل‌شده و پروفایل غلظت محاسبه می‌شود.

معادلات حاکم:

بردار انتقال ایزوتوپ kام درون روتور با سه پدیده انتقال اساسی برابر می‌باشد [۴و۵]:

۱) انتقال بابت اختلاف فشار در راستای r (Pressure Diffusion)

۲) انتقال بابت اختلاف غلظت در راستای r وz (Concentration Diffusion)

۳) انتقال بابت همرفت در راستای r وz (Convection)

نفوذ فشاری درنتیجه گرادیان فشار شعاعی ناشی از اثر نیروی گریز از مرکز ایجاد می‌گردد. انتقال همرفتی به علت سرعت گاز در جهت شعاعی و محوری ایجاد می‌گردد. نفوذ غلظتی درنتیجه گرادیان غلظت در راستای محوری و شعاعی ایجاد می‌گردد. لازم به ذکر است که از نفوذ دمایی صرف‌نظر شده است و با توجه به فرض سیستم متقارن محوری، انتقال جرم در راستای زاویه‌ای نیز وجود ندارد.

انتقال جرم ناشی از نفوذ فشاری در راستای شعاعی:

$$\vec{J}_k^P = \frac{D_k M_k}{RT}\frac{\partial p_k}{\partial r} \qquad (۱)$$

$$\vec{J}_k^P = \frac{D_k M_k}{RT}\frac{\partial p_k}{\partial r} \qquad (۲)$$

انتقال جرم ناشی از نفوذ غلظتی در راستای شعاعی و محوری:

$$\vec{J}_k^B = \vec{J}_{kr}^B + \vec{J}_{kz}^B = \left(-D_k \frac{\partial \rho_k}{\partial r}\right) + \left(-D_k \frac{\partial \rho_k}{\partial z}\right) \quad (۳)$$

انتقال جرم ناشی از حرکت توده سیال در راستای شعاعی و محوری:

$$\vec{J}_k^C = \vec{J}_{kr}^C + \vec{J}_{kz}^C = (\rho_k u_r) + (\rho_k u_z) \quad (۴)$$

با استفاده از فرضیات ساده کننده‌ای همانند استفاده از توزیع فشار تعادلی و صرف‌نظر کردن از نفوذ غلظتی در راستای شعاعی روابط بالا ساده‌سازی می‌گردند و در نهایت مجموع فلاکس انتقال جرم در راستای شعاعی و محوری به‌صورت زیر به دست می‌آید:

$$\vec{J}_{k,r} = \rho D_k \frac{\omega^2 r}{RT} M_k x_k - \rho D_k \frac{\partial x_k}{\partial r} - \rho D_k \frac{\omega^2 r}{RT} x_k \sum_{j=1}^{n} M_j x_k + \rho x_k u_r \quad (۵)$$

$$\vec{J}_{k,z} = -\rho D_k \frac{\partial x_k}{\partial z} + \rho x_k u_z \quad (۶)$$

در بررسی رفتار جریان ایزوتوپ‌ها، علاوه بر معادلات پیوستگی کل، مومنتوم و انرژی، معادله دیگری نیز به نام معادله پیوستگی جزیی حاکم می‌باشد. معادله پیوستگی در حالت پایا برای ایزوتوپ k ام در مختصات قطبی استوانه‌ای به‌صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\frac{1}{r}\frac{\partial (rJ_{kr})}{\partial r} + \frac{\partial J_{kz}}{\partial z} + \frac{1}{r}\frac{\partial^2 J_{k\theta}}{\partial \theta^2} = 0 \quad (۷)$$

در رابطه بالا مقدار فلاکس جرمی زاویه‌ای J_θ به علت تقارن برابر صفر در نظر گرفته می‌شود. در نهایت معادله نفوذ برای ایزوتوپ k ام با جایگذاری روابط (۵) و **Error! Reference source not found.** در معادله پیوستگی به‌صورت زیر به دست می‌آید:

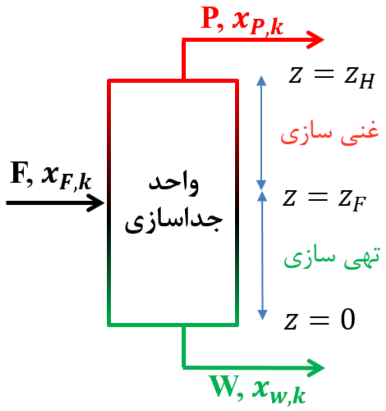
$$\rho u_r \frac{\partial x_k}{\partial r} - \rho D_k \frac{\partial^2 x_k}{\partial z^2} - \rho D_k \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left[r \frac{\partial x_k}{\partial r} - \frac{\omega^2 r^2}{RT}\left(M_k - \sum_{j=1}^{n} M_j x_j\right) x_k\right] + \rho u_z \frac{\partial x_k}{\partial z} = 0 \quad (۸)$$

معادله نفوذ به‌دست‌آمده یک معادله دیفرانسیل جزیی دوبعدی غیرخطی می‌باشد و حل آن به‌طور تحلیلی بسیار مشکل می‌باشد. با روش تقریب میانگین‌گیری شعاعی می‌توان معادله دیفرانسیل جزیی دوبعدی در جهت r و z را به یک معادله دیفرانسیل معمولی در راستای z تبدیل کرد. این روش اولین بار توسط کوهن معرفی شد و سپس توسط سابرمایر توسعه داده شد. در این روش یک کسر مولی میانگین‌گیری شده برای ایزوتوپ k ام به‌صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\bar{x}_k = \frac{1}{\pi a^2} \int_0^a x_k 2\pi r dr$$

(**Error! No text of specified style in document.**۹)

یک واحد جداسازی از جمله ماشین سانتریفیوژ از محل ورود خوراک به دو ناحیه غنی‌سازی و تهی سازی تقسیم‌بندی می‌گردد.



شکل (۱) شماتیکی از یک واحد جداساز

مجموع جریان‌های خروجی در بخش غنی‌سازی که از روتور خارج می‌شود برابر با $Px_{P,k}$ می‌باشد و مجموع جریان‌های خروجی در بخش تهی سازی که از روتور خارج می‌شود برابر با $Wx_{w,k}$ می‌باشد. شکل (۱) شماتیکی از یک واحد جداساز را نشان می‌دهد. معادله غلظت بخش غنی‌سازی و بخش تهی سازی با توجه به مفاهیم ذکرشده در بالا، به فرم زیر تعریف می‌گردند.

بخش غنی‌سازی:

$$\int_0^a J_{k,z} 2\pi r dr = Px_{P,k} = F\theta x_{P,k} \quad (۱۰)$$

بخش تهی سازی:

$$\int_0^a J_{k,z} 2\pi r dr = -Wx_{w,k} = -F(1-\theta)x_{w,k} \quad (۱۱)$$

در نهایت معادلات بخش غنی‌سازی و تهی سازی با استفاده از معادله نفوذ چندجزیی (رابطه ۸) و روش تقریب میان‌گیری شعاعی (رابطه ۹) به‌صورت زیر به دست می‌آید:

معادله توزیع غلظت بخش غنی‌سازی:

$$(1+Y_{2i})\frac{d\bar{x}_k}{ds} = (2\epsilon_i Y_{1i} + \varphi_{pi})\bar{x}_k - \varphi_{pi}\bar{x}_{k,P}$$
$$i=1, 2, \ldots, n\text{-}1$$
$$C_n = 1 - \sum_{i=1}^{n-1} C_k \quad (۱۲)$$

معادله توزیع غلظت بخش تهی سازی:

$$(1+Y_{2i})\frac{d\bar{x}_k}{ds} = (2\epsilon_i Y_{1i} - \varphi_{wi})\bar{x}_k + \varphi_{wi}\bar{x}_{k,w}$$
$$i=1, 2, \ldots, n\text{-}1$$
$$C_n = 1 - \sum_{i=1}^{n-1} C_k \tag{۱۳}$$

ترم‌های بدون بعد معادلات (و(۱۳) به‌صورت زیر تعریف می‌گردند.

$$L \equiv \frac{1}{2}\int_0^a |\rho u_z|\, 2\pi r dr$$
$$\epsilon_i \equiv \frac{\omega^2}{RT}(\bar{M} - M_{k)}) \int_0^a \frac{\psi r}{L} dr$$
$$\varphi_{pi} \equiv \frac{\theta F}{\pi a D_k}$$
$$\varphi_{wi} \equiv \frac{(1-\theta)F}{\pi a \rho D_k}$$
$$Y_{1i} \equiv \frac{1}{a^3 \pi \rho D_k}\int_0^a \psi r\, dr$$
$$Y_{2i} \equiv \frac{1}{2(\pi a \rho D_k)^2}\int_0^a \frac{\psi^2}{r} dr \tag{۱۴}$$

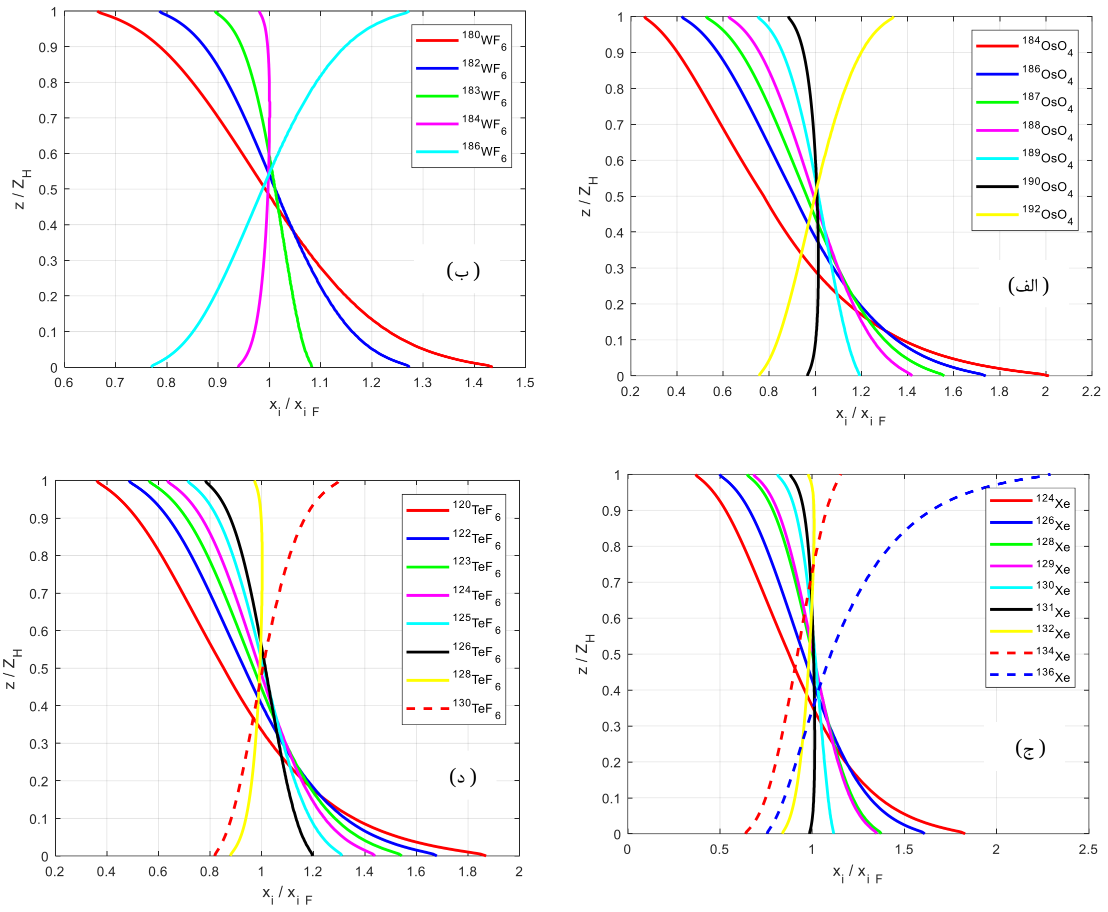
لازم به ذکر است در این مقاله برای معادلات جریان، از معادله انساگر همگن استفاده شده است و برای محاسبه ضریب نفوذ از رابطه زیر استفاده‌شده است.

$$D_{AB} = 2.628 \times 10^{-7} \frac{T^{\frac{3}{2}}\sqrt{\frac{(M_A + M_B)}{(2M_A M_B)}}}{P\Omega\sigma^2} \tag{۱۵}$$

$$D_{Am} = \frac{1 - x_A}{\sum_{j=B}^{n} \frac{x_j}{D_{Aj}}} \tag{۱۶}$$

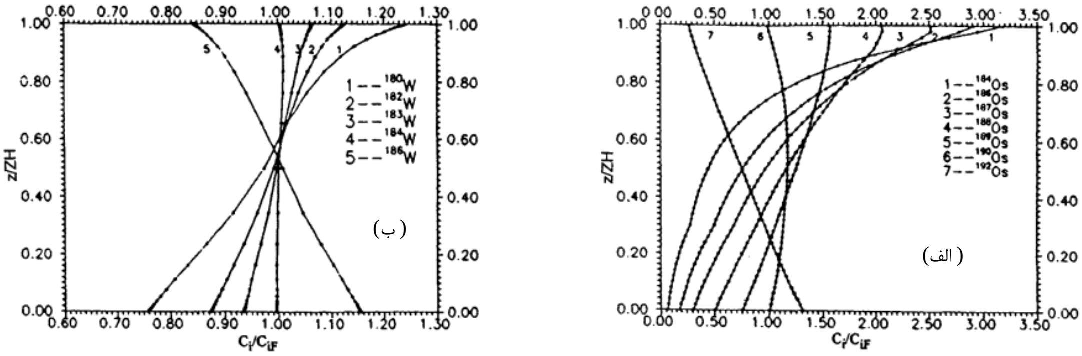
نتایج

سانتریفیوژ فرضی مورد بررسی، استوانه‌ای به طول ۰/۳ متر و شعاع ۰/۱ متر است که با سرعت زاویه‌ای ثابت ۶۰۰ متر بر ثانیه در حال چرخش است. به‌منظور حل معادله غلظت،گازهای چندجزیی TeF_6 ، Xe، WF_6 و OsO_4 انتخاب‌شده است. شکل (۲) تغییرات غنای ایزوتوپ‌های سیستم‌های چندجزیی را در طول روتور نشان می‌دهد. محور عمودی طول روتور و محور افقی ، تغییرات غلظت ایزوتوپ‌های گازها را نشان می‌دهد.



شکل(۲) تغییرات غنای ایزوتوپ‌های گازهای چندجزیی در طول روتور (الف) گاز OsO_4 (ب) گاز WF_6 (ج) گاز Xe (د) گاز TeF_6

شکل (۳) نمودار تغییرات غنای ایزوتوپ‌های گازهای چندجزیی در طول روتور مطابق با مرجع [۴] را نشان می‌دهد که مشاهده می‌شود روند شکل (۲) و شکل (۳) با یکدیگر مطابقت دارد.



شکل(۳) تغییرات غنای ایزوتوپ‌های گازهای چندجزیی در طول روتور (الف) گاز OsO_4 (ب) گاز WF_6

بحث و نتیجه‌گیری

در این مقاله معادله توزیع غلظت داخل سانتریفیوژ در حالت چندجزیی با استفاده از روش تحلیلی استخراج گردید. پس از استخراج معادله توزیع غلظت، نتایج کد پیاده‌سازی شده با زبان متلب ارائه گردید. پروفایل غلظت گازهای هگزا فلوراید تلوریم، زنون، هگزا فلوراید تنگستن و اسمیم تتراکسید با حل معادله توزیع غلظت به دست آمد. نتایج مدل‌سازی این مطالعه با مراجع مطابقت بالایی را نشان می‌دهد.

مراجع

[1] S. Villani, “Uranium Enrichment “, (1979)

[2] K. Cohen, “The Theory of Isotope Separation as Applied to the Large Scale Production of UTM.” pp.103-125, (1951)

[3] Soubbaramayer. “Centrifugation”, Applied Physics, vol.35, pp. 183-244, (1979)

[4] G. Zhixiong, Y. Chuntong, H. G. Wood, “Solution of the Diffusion Equations in a Gas Centrifuge for Separation of Multicomponent Mixtures.” Separation Science and Technology, vol. 31, no. 18, pp. pp. 2455-2471, (1996)

[5] H. G. Wood, T. C. Mason and Soubbaramayer, “Multi-Isotope Separation in a Gas Centrifuge Using Onsager’s Pancake Model.” Separation Science and Technology, vol. 31, no. 9, pp. 1185-1213, (1996)