شبیه سازی زنجیره چند جزئی با جریان برگشتی به روش شبه ایده آل به منظور دستیابی به بهترین غلظت ایزوتوپ زنون-۱۳۴

پیری زاد هجراندوست،سمیه [۱]- محمودیان،عادل [۱] - ملاح،محمد حسن* [۲]- صفدری،سیدجابر [۲]

۱- سازمان انرژی اتمی ایران، شرکت فناوری های پیشرفته، معاونت فنی و مهندسی، صندوق پستی ۱۹۸۳۹۶۳۱۱۳

۲- سازمان انرژی اتمی ایران، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، پژوهشکده مواد و سوخت هسته‌ای، صندوق پستی: ۱۴۱۵۵-۱۳۹۹

چکیده:

اولین مرحله در شناخت عملکرد جداسازی آبشارهای چند جزئی، مدلسازی آبشارها می‌باشد. یکی از روش های شبیه سازی زنجیره های چند جزئی با جریان برگشتی بوسیله مدل شبه ایده آل می باشد. در این تحقیق با استفاده از آبشار شبه ایده آل به جداسازی ایزوتوپ های زنون پرداخته شده است و بررسی اثر پارامترهای مختلف برای رسیدن به بهترین غنای Xe-134 در زنجیره شبه ایده آل انجام شده است. در این خصوص ابتدا حدس اولیه برای کلیه مقادیر جریان ها و غلظت ها بوسیله روش تکرار q انجام شده و سپس بوسیله روش تکنیک پیوستگی شبیه سازی بوسیله مدل شبه ایده ال انجام می گیرد..با انجام مطالعه پارامتریک برروی Xe-134 غلظت نهایی به مقدار ۳۳٪ از قسمت پسماند مشاهده می شود.

کلمات کلیدی:آبشار شبه ایده آل، تکنیک پیوسته، روش تکرار q

Abstract

The first step of recognizing the separation performance in multi-component cascade is cascade simulation. One of the simulation methods of multi-component cascade is the quasi-ideal model. In this investigation was proceeded separation of Xe-Isotope by quasi-Ideal cascade and the effect of different parameters to get the best concentration of Xe-134 was considered. Initial value for all concentration and flow was carried out by q-iteration method, then continuation technique was implemented to stimulate the quasi-ideal cascade. Parametric study of Xe-134 shoes the concentration of %33 from stripping section.
Keywords: quasi-ideal cascade, continuation technique, q-iteration method.

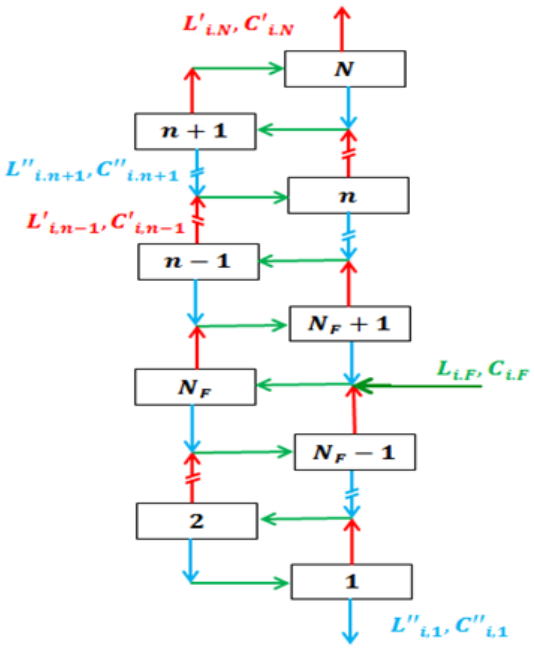
مقدمه :

اولین مرحله در شناخت عملکرد جداسازی آبشارهای چند جزئی، مدلسازی آبشارها می‌باشد. فرض اصلی و اساسی در طراحی یک آبشار عملی بودن آن است. زنجیره شبه ایده ال ابتدا در سال ۱۹۶۸ توسط Apellblad و همکاران شبیه سازی گردید. در آن کار که به صورت دو جزئی به مقایسه و بررسی زنجیره شبه ایده ال پرداخته شده است. در این مقاله اشاره شده است که مجموع جریان های میان مرحله ای در زنجیره ایده آل

نسبت به زنجیره های دیگر کمترین مقدار می باشد در حالیکه در زنجیره شبه ایده ال مجموع جریان های میان مرحله‌ای کمی بیشتر از زنجیره ایده ال می باشد [۱]. در سال ۲۰۰۰ Sazykin و همکاران با فرض برش جزk ام در مراحل ثابت به حل تحلیلی زنجیره شبه ایده ال پرداخته اند [۲]. ولی این فرض اساسی برای حل زنجیره شبه ایده ال نمی‌باشد و می تواند در مراحل مختلف نیز متفاوت فرض شود. در سال ۲۰۱۱Zeng و همکاران به بررسی حل عددی زنجیره شبه ایده آل پرداخته اند [۳] .وی در ابتدا به وسیله روش تکرارq حدس اولیه برای کلیه مقادیر غلظت ها رابدست آورد[۴]، و سپس به وسیله روش تکنیک پیوستگی به حل عددی زنجیره شبه ایده ال پرداخت. شایان ذکر است تاکنون در هیچ یک از مقالات ارائه شده در خصوص زنجیره شبه ایده آل به بررسی و مطالعه پارامتریک این زنجیره و انتخاب پارامترهای برتر برای بیشترین جداسازی یک جزء پرداخته نشده است. در این مقاله به جداسازی ایزوتوپ های زنون با استفاده از آبشار شبه ایده آل پرداخته شده است، و مطالعه پارامتریک برروی مقادیر $\theta_{k,n}$ و همچنین برروی جزء k برای جداسازی ایزوتوپ هشتم از این گاز انجام شده است.

روش کار :

بر خلاف زنجیره‌های دوجزئی، مدل ها و تئوری‌های مختلفی برای جداسازی ایزوتوپهای چندجزئی وجود دارد که از جمله آنها می‌توان به آبشار شبه ایده آل اشاره کرد که در ادامه به بررسی و شرح کامل این مدل پرداخته می‌شود. در شکل(۱) نمایی از یک آبشار چند جزئی با جریان برگشتی مشاهده می شود.



شکل شماره (۱): شماتیکی از یک آبشار جداسازی سیستم چندجزئی N مرحله ای

در یک زنجیره چند جزئی تعداد مجهولات در هر مرحله برابر 3Nc+3 می‌باشد (Nc تعداد ایزوتوپها می‌باشد) که از این تعداد ۳ مجهول مربوط به جریانهای خوراک، محصول و پسماند بوده و 3Nc مجهول مربوط به غلظت کلیه ایزوتوپها در جریانهای فوق می‌باشد. بنابراین در مجموع تعداد N(3Nc+3) مجهول در یک زنجیره چند جزئی N مرحله‌ای وجودخواهد داشت. بنابراین در ادامه به بیان معادلات حاکم بر زنجیره چند جزئی پرداخته می شود. با نوشتن موازنه جرم در هر مرحله معادله زیر بدست می آید.

$$C_{i,n}L_n - C'_{i,n}L'_n - C''_{i,n}L''_n = 0 \qquad (۱)$$

که در این معادله به ترتیب جریان‌های محصول، پسماند، و خوراک, L''_n L'_n , Ln می‌باشند، و مقدار غلظت های اجزا به ترتیب در محصول و پسماند و خوراک $C_{i,n}$،$C''_{i,n}$،$C'_{i,n}$ می باشند.

از موازنه جرم حول گره در هر مرحله معادله زیر حاصل می شود:

$$C_{i,n}L_n - C'_{i,n-1}L'_{n-1} - C''_{i,n+1}L''_{n+1} = \delta(n, N_F)C_i^F F \qquad (۲)$$

همچنین معادله دیگر حاکم بر آبشار با استفاده از تعریف فاکتور جداسازی بدست می‌آید که در این رابطه فاکتور جداسازی در آبشار جداسازی چند جزئی به فرم معادله زیر بیان می‌گردد:

$$\alpha_{ij,n} = \frac{C'_{i,n}/C'_{j,n}}{C''_{i,n}/C''_{j,n}} = \alpha_{0,n}^{M_j - M_i} \quad (i = j-1, j = 2, \dots, N_c) \qquad (۳)$$

که در آن i همان جزء کلیدی است که معمولاً به عنوان جزء سبک‌تر در نظر گرفته می‌شود. پارامتر $\alpha_{0,n}$ نیز، ضریب جداسازی برای اختلاف جرم واحد است. M_j و M_i به ترتیب جرم مولی جزءهای j و i می‌باشند. اجزاء طوری مرتب شده‌اند که اگر i<j باشد $M_i < M_j$ است. اگرچه مقدار ضریب جداسازی پایه می‌تواند از یک مرحله به مرحله دیگر تغییر کند اما برای سادگی روش حل، این مقدار ثابت و برابر در نظر گرفته می شود.

با کمک معادله زیر شرط محدودیت غلظت‌ها نیز به صورت زیر اعمال می‌شود که مفهوم آن این است که مجموع غلظت همه ایزوتوپ ها در هر مرحله برابر یک می باشد.

$$\sum_i C_{i,n} = \sum_i C'_{i,n} = \sum_i C''_{i,n} = 1 \qquad (۴)$$

از مجموع معادلات فوق (3Nc+2) معادله در هر مرحله از آبشار به وجود می آید که نیاز به یک معادله دیگر جهت حل معادلات وجود خواهد داشت در نتیجه از مدل آبشار شبه ایده آل معادله زیر برای تکمیل معادلات فوق در نظر گرفته می‌شود تا تعداد معادلات و مجهولات مسئله برابر شود.

$$\theta_{k,n} = \frac{C'_{k,n} * L'_{k,n}}{C_{k,n} * L_{k,n}} \qquad (۵)$$

ابتدا معلومات مسئله به عنوان ورودی داده می‌شود که عبارتند از تعداد مراحل آبشار، مرحله ورود خوراک، تعداد اجزاء به همراه جرم مولی و ترکیب درصد آن‌ها در خوراک ورودی به آبشار، دبی خوراک آبشار و همچنین پارامترهای k و α_0. برای محاسبه دبی جریان‌ها به یک حدس اولیه از برش یا معلوم بودن بعضی دبی‌ها احتیاج می باشد که معمولاً با توجه به سادگی حدس مقادیر برش از آن استفاده می شود، زیرا محدوده تغییرات برش مشخص و محدود می‌باشد. پس از آن به وسیله روش تکرار q به محاسبه غلظت ها در کل آبشار پرداخته می شود. مقادیر محاسبه شده برای جریان ها و غلظت ها به عنوان حدس اولیه برای شروع روش تکنیک پیوستگی مورد استفاده قرار می گیرد.

در ابتدا جداسازی گاز زنون طبیعی به عنوان خوراک آبشار شبه ایده ال ۱۵ مرحله‌ای با مرحله ورود خوراک ۵ و دبی ۱۰۰۰ گرم بر ساعت در نظر گرفته می شود. در این حالت جزء k و برش آن به ترتیب ۳ و ۰/۳ منظور می‌شود. سپس مطالعه پارامتریک برای انتخاب جزء k و مقدار برش مناسب آن برای رسیدن به بالاترین غلظت Xe-134 ، انجام می شود. در کلیه شبیه سازی ها ضریب جداسازی پایه α_0 برابر ۱/۲ در نظر گرفته می‌شود.

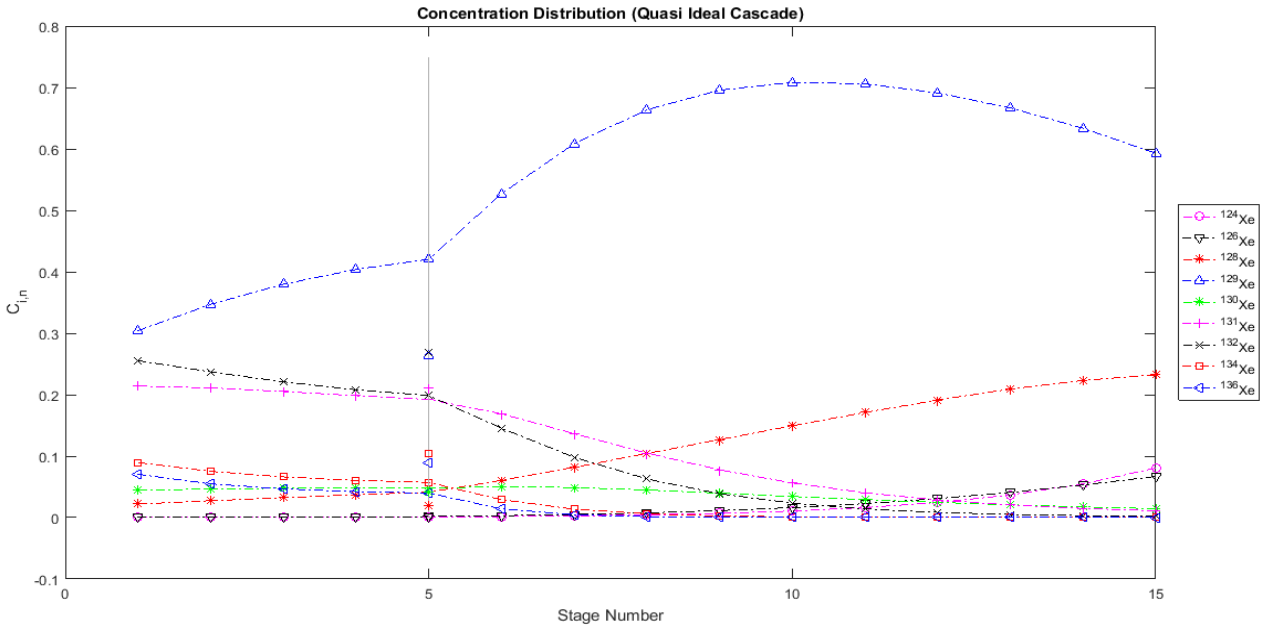
نتایج:

در جدول زیر به ترتیب مقادیر غلظت های ایزوتوپ های زنون برای شبیه سازی وارد شده است.

جدول شماره(۱): مقادیر غلظت های ایزوتوپ های زنون

Xe	124	126	128	129	130	131	132	134	136
C_f(wt%)	93e-5	9e-4	1917e-5	2644e-4	408e-4	2118e-4	2689e-4	1044e-4	887e-4

نتایج شبیه‌سازی حاصل از کد تهیه شده در شکل(۲) نشان داده شده است.



شکل شماره (۲): غلظت های خروجی از آبشار شبه ایده آل

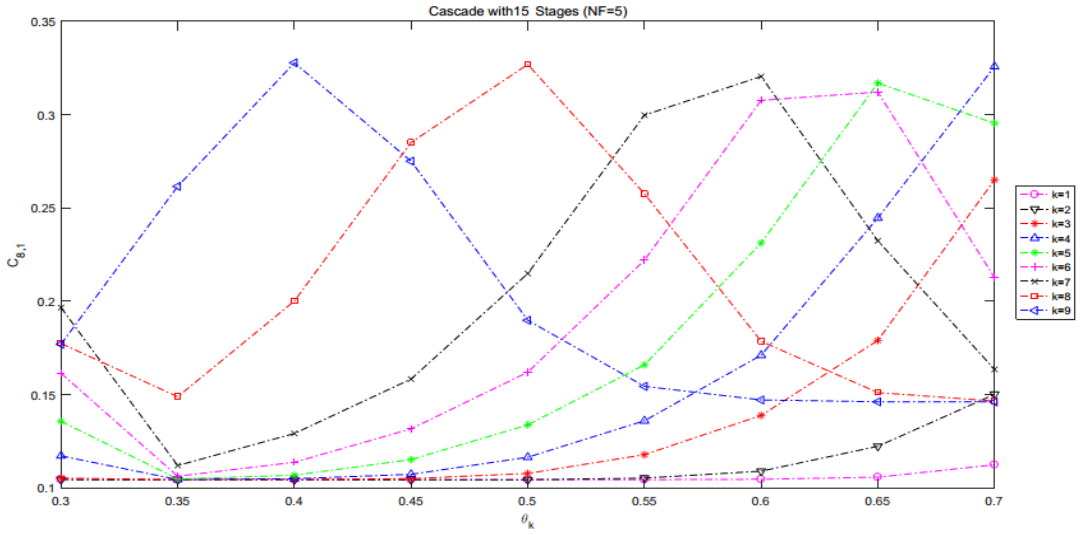
همانگونه که در این شکل مشخص می‌باشد به دلیل اینکه ایزوتوپXe-134جزء ایزوتوپهای سنگین می‌باشد غلظت آن در جریان پسماند بیشتر است و مقدار آن برابر ۱۰ درصد می‌باشد.

علاوه بر این برای جداسازی ایزوتوپ ^{134}Xe یک مطالعه پارامتریک بر روی مقادیر $\theta_{k,n}$ و همچنین برروی جزء k انجام شده تا بتوان در یک زنجیره شبه ایده آل بهترین خروجی را برای این ایزوتوپ بدست آورد. در این خصوص ورودی های این مطالعه پارامتریک به شرح جدول زیر می باشد.

جدول شماره(۲): مقادیر ورودی جهت مطالعه پارامتریک گاز زنون

N	N_f	α_0	F	$\theta_{k,n}$	k
15	5	1.2	1000	$0.3 \leq \theta_{k,n} \leq 0.7$	$1 \leq k \leq 9$

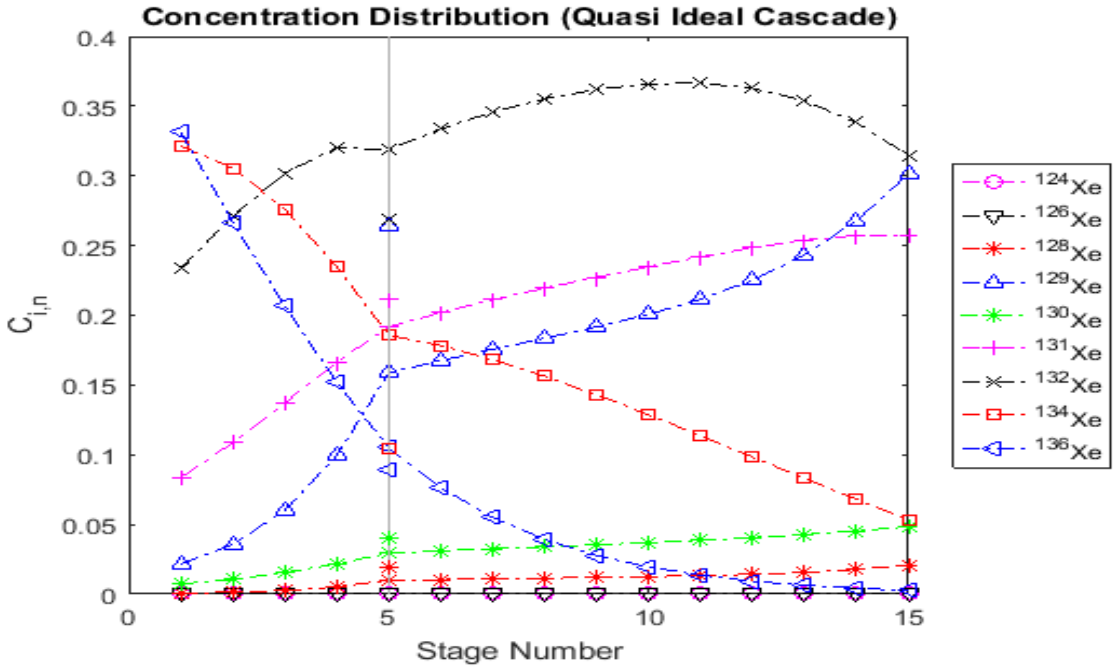
در شکل زیر غلظت های جریان خروجی از سمت پسماند مشاهده می شود.



شکل شماره (۳): غلظت های خروجی از سمت پسماند

همانطور که درشکل شماره (۳) دیده می شود با انتخاب k=8 و $\theta_{k,n}$=0.5 ایزوتوپ Xe-134 بـه حـدود ۳۳٪ در جریان پسماند خواهد رسید.

در انتها یک زنجیره شبه ایده آل با انتخاب مقادیر$\theta_{k,n}$=0.5, k=8 بـرای کلیـه ایزوتـوپ هـای زنـون شـبیه سازی شده است که نمودار آن به صورت زیر می باشد.



شکل شماره (۴): غلظت های خروجی کلیه ایزوتوپ های زنون

بحث و نتیجه گیری:

همانگونه که در شکل (۳) مشخص می‌باشد برای k های مختلف حداقل یک $\theta_{k,n}$ وجود دارد که با ازای آن غلظت جزء مطلوب به بیشترین مقدار خود می‌رسد. از آنجا که در صورت انتخاب $\theta_{k,n}$ های نزدیک به ۰/۳ و یا نزدیک به ۰/۷ جریانهای زنجیره جریانهای مناسبی نمی باشد k ای انتخاب شده است که $\theta_{k,n}$ متناظر با آن نزدیک به ۰/۵ باشد. با استفاده از نمودارهای بدست آمده می توان نتیجه گرفت که برای بدست اوردن بالاترین غلظت ایزوتوپ Xe-134 ازسمت پسماند، باید k=8 و $\theta_{k,n}$=0.5 انتخاب گردد. در این حالت غلظت ایزوتوپ Xe-134 به حدود۳۳٪ در جریان پسماند خواهد رسید. جزئیات بیشتر نتایج بعداً ارائه خواهد شد.

مراجع :

[1] A.Apelblat, Ilamed-Lehrer, “The Theory of A Real Isotope Enriching Cascade “ Journal of Nuclear Energy,Vol,22, pp 1-14, 1968.
[2] Sazikin,A.A., "Thermodynamic approach to isotope separation.” In:Baranov,V.Yc,ISOTOPE-Property Production, and Application. Izad,Moscow. 2000.
[3] Shi Zeng, Lu Cheng, Dongjun Jiang, Valentin D. Borisevich, Georgy A. Sulaberidze, “A Numerical Method Of Cascade Analysis And Design For Multi-component Isotope Separation”, Chemical Engineering Research And Design, Vol. 92, Pp 2649-2658, 2014.
[4] Shi Zeng, Chotong Ying, “A Robust and Efficient Calculation Procedure for Determining Concentration Distribuation of Multicomponent Mixture”, Sepration Science and Technology,Vol 35, pp .613-622,2000.