طراحی یک آبشار جهت غنی سازی ایزوتوپ های پایدار با استفاده از مدل Q و مقایسه آن با مدل تطبیق یافته R

فاطمه منصورزاده[۱]، سید جابر صفدری[۱]، علی اصغر قربانپور خمسه[۱]، علی نوروزی*[۲]، مجید خواجه‌نوری[۲]،محمد حسن ملاح[۱]

۱- سازمان انرژی اتمی ایران، پژوهشگاه علوم و فنون هسته ای، پژوهشکده مواد و سوخت هسته ای

۲- سازمان انرژی اتمی ایران، شرکت فناوری‌های پیشرفته ایران

چکیده: *یکی از روش‌های مورد استفاده در شبیه‌سازی و طراحی آبشارهای غنی‌سازی برای سیستم‌های چند جزئی استفاده از آبشار مدل Q می‌باشد. در این تحقیق پارامترهای یک آبشار با مدل تحلیلی Q طراحی می‌گردد. سپس نتایج بدست آمده با آبشار مدل تطبیق یافته R مقایسه می‌شوند. مقایسه روش تحلیلی مدل Q با روش عددی مدل R نشان می-دهد که اگر مقدار پارامتر M* برابر مقدار میانگین حسابی دو جزء در ترکیب ایزوتوپی باشد این دو مدل به یک شیوه عمل می کنند. همچنین در صورتی که مقدار پارامتر M* در آبشار Q برابر با ۱۲۹/۹ انتخاب شود آبشار مدل تطبیق یافته R برای دو جزء ۴و۵ به تعداد ماشین های سانتریفیوژ کمتری جهت جداسازی ایزوتوپ‌های زینان نیاز دارد.*

کلید واژه: ایزوتوپ های پایدار، آبشار مدل Q ، پارامتر M*، آبشار مدل تطبیق یاقته R

Designing a cascade for the separation of stable isotopes using the Q-cascade and comparing it with the R-cascade

F. Mansourzadeh[1], J. Safdari[1], A. GH. Khamseh[1,*], A. Norouzi[2], M. Khajenouri[2], M. Mallah[1]

[1]Atomic Energy Organization of Iran, Nuclear Science and Technology Research Institute, Materials and Nuclear Fuel Research School.

[2] Atomic Energy Organization of Iran, Advanced Technology Company.

The Q–cascade is one of the models that are used for designing the cascades to separate the multi-component mixtures. In this research, the parameters of a cascade are designed with the Q analytical model. Then the results are compared with the R-cascade. The comparison of the analytical method of Q–cascade with the numerical method of R-cascade shows that if the parameter M* is equal to the mean value of the two components in the isotope composition, these two models are the same. Also, if the value of the parameter M* in the Q–cascade is equal to 129.9,

the model of the R-cascade for the two components 4 and 5 requires a smaller number of centrifuges to separate xenon isotopes.

۱- مقدمه

از آنجا که ایزوتوپ های عناصری همچون زینان در صنعت، پزشکی و دیگر علوم کاربردهای ویژه‌ای دارند جداسازی ایزوتوپ‌های پایدار از اوایل ۱۹۶۰ مورد توجه قرار گرفت. از جمله مدل‌ها در تحلیل آبشارهای چند جزیی، مدل Q و مدل تطبیق یافته R است. آبشار Q با مدل جریان پیوسته[1]، برای ارزیابی سریع پارامترهای آبشار و بهینه کردن آن‌ها در جداسازی ایزوتوپ‌ها در اواسط دهه ۱۹۶۰ مطرح شد [۱]. اگرچه اساس مدل Q برای آبشارهای با فاکتور جداسازی پایین مشتق شده است، با این وجود برای آبشارهای با فاکتور جداسازی کلی بالا (دلخواه) همانند آبشار شبه ایده‌ال و آبشار تطبیق یافته R، نیز کاربرد دارد [۲]. برای بررسی مدل تطبیق یافته R نیز ابتدا روش های تحلیلی ارائه شد [۳] و پس از آن با پیشرفت محاسبات عددی، روش‌های عددی مختلفی جهت تعیین پارامترهای آبشار در جداسازی ایزوتوپ های چند جزئی ارائه شد. در این مقاله پس از معرفی آبشار Q و آبشار تطبیق یافته R، پارامترهای آبشار مدل Q به روش تحلیلی تعیین می شوند. سپس این پارامترها در آبشار تطبیق یافته R با حل عددی مورد ارزیابی قرار می‌گیرد. در نهایت این دو آبشار در شرایط مشخص مورد مقایسه قرار می گیرند. ماده‌ای که در این تحقیق به عنوان نمونه مورد بررسی قرار می گیرد ایزوتوپ-های عنصر زینان است.

۲- تئوری

در این بخش به تئوری‌های مربوط به دو مدل Q و تطبیق یافته R اشاره می‌شود. در مدل Q هدف دستیابی به بهترین مقادیر از پارامترهای آبشار در تعیین مقادیر طراحی است. معادلات (۱) و (۲) مربوط به تغییرات غلظت در مراحل غنی‌سازی و تهی‌سازی می‌باشند. در این روابط y و x به مقدار غلظت ایزوتوپ iام در جریانهای بالادستی و پایین دستی اشاره دارند. y_i^P و x_i^W نیز غلظت ایزوتوپ iام را در جریان محصول و پسماند نشان می-دهند. همچنین مقادیر P، W بیانگر نرخ جریان در محصول و پسماند آبشار می‌باشند که Z مقدار جریان ورودی به مراحل مختلف آبشار را نشان می‌دهد. به منظور حل این معادلات عبارت $x_i(n)$ با $\varphi_i(n)$ که معادله موازنه جرم در آبشار را به معادله انتگرالی (۳) تبدیل می‌کند جایگزین می شود[۴-۷].

[1] Model Cascades of Continuous Profile

$$\frac{dy_i}{dn} = -y_i \sum_{j=1}^{N_c} \alpha_{i,j} y_j + \frac{2P}{Z(n)} (y_i{}^P - y_i) \qquad (۱)$$

$$0 \le n \le n_E ; i = 1,2,...,N_C - 1$$

$$\frac{dx_i}{dn} = x_i \sum_{j=1}^{N_c} \alpha_{i,j} x_j + \frac{2W}{Z(n)} (x_i{}^W - x_i) \qquad (۲)$$

$$0 \le n \le n_s ; i = 1,2,...,N_C - 1$$

$$\varphi_i(n) + \sum_{j=1}^{N_c} \frac{2Py_{j,P}}{Z(n)} \int_0^{n_E} \varphi_i(t) \exp[\alpha_{ij}(n-t)] dt = \sum_{j=1}^{N_c} \frac{Z_F y_{i,F}}{Z(n)} \exp(\alpha_{ij} n) \qquad (۳)$$

در رابطه (۳)، α_{ij}، فاکتور جداسازی سازی کلی برای جفت ایزوتوپ i و j ، n_E طول بخش غنی‌سازی و n_E طول بخش تهی‌سازی آبشار است. یک مدل مناسب و کاربردی برای حل تحلیلی معادلات فوق به صورت رابطه (۴) ارائه شده است که در آن پارامتر Q برای ایزوتوپ iام از رابطه (۵) قابل محاسبه است:

$$\varphi_i(n) = \exp(Q_i n) \qquad (۴)$$

$$Q_i = \alpha_0 (M^* - M_i) \qquad (۵)$$

M* یک جزء فرضی است که جداسازی ایزوتوپ‌ها بر اساس آن سنجیده می‌شود. در این شرایط اجزاء سبک‌تر از آن به سمت محصول، و اجزاء سنگین‌تر از آن به سمت پسماند غنی می‌شوند. در صورتی که مقدار M* برابر با میانگین حسابی جرم مولکولی ایزوتوپ‌های k_1 و k_2 باشد آبشار Q همانند آبشار تطبیق یافته مدل R می‌باشد.

در آبشار مدل تطبیق یافته R برای دو جزء k_1 و k_2 متناسب با پارامترهای موجود در آبشار، جزء k_1 و ایزوتوپ-های سبکتر از آن در بخش محصول غنی می‌شوند و همچنین جزء k_2 و ایزوتوپ‌های سنگین‌تر از آن در بخش پسماند غنی می‌شوند. در این آبشار شرط انطباقی زیر بین نسبت‌های فراوانی اجزاء k_1 و k_2 در یک نقطه تلاقی در نظر گرفته می‌شود که در آن رابطه مربوط به نسبت‌های فراوانی مطابق رابطه (۷) می‌باشد. با در نظر گرفتن جداسازی متقارن بین جزءهای k_1 و k_2 رابطه (۸) برقراراست [۸]:

$$R'_{(k_1,k_2),n-1} = R''_{(k_1,k_2),n+1} = R_{(k_1,k_2),n} \qquad (۶)$$

$$R'_{(k_1,k_2)} = \frac{y_{k1}}{y_{k2}} \qquad R''_{(k_1,k_2)} = \frac{x_{k1}}{x_{k2}} \qquad (۷)$$

$$\beta_{(k1,k2)} = \gamma_{(k1,k2)} = \sqrt{\alpha_{(k1,k2)}} \qquad (۸)$$

که تعریف β و γ برابر است با:

$$\beta_{(k1,k2)} = \frac{y_{k1}/y_{k2}}{z_{k1}/z_{k2}} , \gamma_{(k1,k2)} = \frac{z_{k1}/z_{k2}}{x_{k1}/x_{k2}} \qquad (۹)$$

۳-روش کار

در این تحقیق ابتدا یک آبشار با استفاده از مدل Q به منظور دستیابی به غنای مشخص یک ایزوتوپ خاص در محصول و پسماند آبشار طراحی می‌شود. سپس نتایج بدست آمده با نتایج حاصل از مدلسازی آبشار مدل R در تعداد مراحل و محل ورود خوراک یکسان با آبشار Q مورد مقایسه و ارزیابی قرار می‌گیرد. سپس نشان داده می-شود در حالتی که مقدار M* برابر میانگین حسابی دو ایزوتوپ مشخص باشد آبشار Q معادل آبشار R می باشد. ابتدا با در نظر گرفتن یک مقدار مشخص M* و تعیین پارامتر Q، تعداد مراحل غنی سازی (n_E) و تهی سازی (n_S) در آبشار با استفاده از معادلات (۱۱) و (۱۲) تعیین می شود. سپس می‌توان غلظت دیگر ایزوتوپ‌ها و نرخ جریان در تمام مراحل را محاسبه نمود.

$$y_i^P = \frac{1-\exp(Q_i n_s)}{\exp(-Q_i n_E)-\exp(Q_i n_s)} Z_{iF} \Big/ \sum_{j=1}^{N_c} \left(\frac{1-\exp(Q_j n_s)}{\exp(-Q_j n_E)-\exp(Q_j n_s)} Z_{iF}\right) \quad (۱۱)$$

$$x_i^W = \frac{\exp(-Q_i n_E)-1}{\exp(-Q_i n_E)-\exp(Q_i n_s)} Z_{iF} \Big/ \sum_{j=1}^{N_c} \left(\frac{\exp(Q_j n_E)-1}{\exp(-Q_j n_E)-\exp(Q_j n_s)} Z_{iF}\right) \quad (۱۲)$$

$$\frac{P}{F} = \sum_{j=1}^{N_c} \left(\frac{\exp(Q_j n_s)-1}{\exp(Q_j n_S)-\exp(-Q_j n_E)} Z_{iF}\right) \quad (۱۳)$$

$$\frac{W}{F} = \sum_{j=1}^{N_c} \left(\frac{\exp(Q_j n_E)-1}{\exp(-Q_j n_E)-\exp(Q_j n_s)} Z_{iF}\right) \quad (۱۴)$$

در روش حل عددی آبشار مدل تطبیق یافته R ابتدا جریان در مراحل مختلف آبشار به عنوان حدس اولیه در نظر گرفته می شود. سپس با استفاده از روش تکرار Q مقدار غلظت تمام ایزوتوپ ها در جریان‌های مختلف محاسبه می شود. پس از آن با استفاده از روش حل معادلات غیر خطی ناحیه اطمینان و روش کمکی تکنیک پیوسته تمام پارامترها در آبشار مدل تطبیق یافته R محاسبه می شوند.

۴-نتایج

در این تحقیق محاسبات برای یک آبشار با نرخ جریان خوراک ۸۰(gr/hr) ، نرخ جریان ورودی بهینه به ماشین ۲۲(gr/hr) و فاکتور جداسازی کل برای اختلاف جرم واحد ۱/۱ انجام شده است. در جدول (۱) نتایج برای طراحی آبشار مدل Q ارائه شده است. در این طراحی هدف دستیابی به ایزوتوپ ۴ام با غلظت ۰/۴۶ در جریان محصول و غلظت ۰/۲۱ در جریان پسماند می‌باشد. مقدار M* آبشار Q برابر با ۱۲۹/۹ در نظر گرفته شده است.

آبشار طراحی شده شامل ۱۶ مرحله می باشد که خوراک در مرحله ۵ به آن وارد می‌شود. در آبشار مدل R ایزوتوپ های ۴و۵ انتخاب شده‌اند. در جدول (۲) نیز غلظت ایزوتوپ‌های زینان در جریان های محصول و پسماند برای این دو آبشار مقایسه شده‌اند. مقدار دبی جریان میان مرحله‌ای در آبشار مدل تطبیق یافته R برابر با ۴۰۷۳/۶ (gr/hr) است در حالی که برای آبشار مدل Q برابر با ۴۲۰۱ (gr/hr) می باشد. به عبارتی دیگر در صورتی که مقدار M^* در آبشار Q برابر با ۱۲۹/۹ در نظر گرفته شود آبشار مدل R به تعداد ماشین‌های سانتریفیوژ کمتری نسبت به آبشار مدل Q نیاز دارد. در بخش بعدی آبشار مدل Q با پارامتر M^* برابر با ۱۲۹/۵ طراحی شده است. آبشار شامل ۱۷ مرحله می باشد و خوراک در مرحله ۶ به آن وارد می شود. همانطور که از جداول (۳) و (۴) دیده می شود در این حالت تمام پارامترهای این دو مدل با یکدیگر همخوانی زیادی دارند. در شکل های (۱)، (۲) نیز به ترتیب برش و تعداد ماشین‌ها در تمام مراحل، و تغییرات غلظت ایزوتوپ ها در جریان ورودی به مراحل برای هر دو مدل Q و R نشان داد شده است.

جدول ۱- مشخصات و پارامترهای بدست آمده برای آبشار Q در M^* برابر با ۱۲۹/۹ و آبشار تطبیق یافته R برای دو جزء ۴و۵

Stages. No	Q Cascade			R Cascade		
	machine	Cut of Stages	Z(g/hr)	machine	Cut of Stages	Z(g/hr)
1	6	0.4784	121.0074	6	0.4747	123.9923
2	11	0.4805	232.9406	11	0.476	236.6143
3	16	0.4814	337.5449	16	0.4771	339.9557
4	20	0.4828	436.2463	20	0.4782	435.6936
5	25	0.4839	530.2231	24	0.4793	525.1871
6	22	0.4854	465.8561	21	0.4809	456.2136
7	19	0.4869	407.8883	18	0.4824	395.1085
8	17	0.4882	355.1116	16	0.4838	340.3856
9	14	0.4894	306.5588	14	0.485	290.8713
10	12	0.4906	261.4486	12	0.4862	245.6305
11	10	0.4916	219.1441	10	0.4873	203.9122
12	9	0.4927	179.1204	8	0.4883	165.1075
13	7	0.4936	140.94	6	0.4892	128.718
14	5	0.4945	104.2339	5	0.4901	94.3316
15	4	0.4953	68.6861	3	0.4909	61.6037
16	2	0.4963	34.02221	2	0.4917	30.243

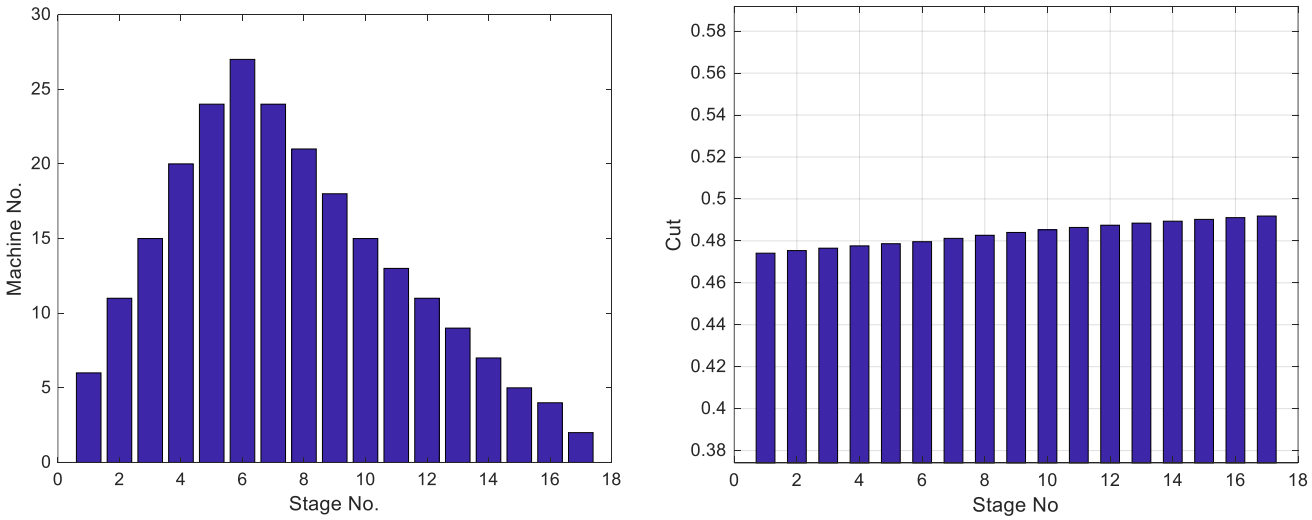
جدول ۲- مقایسه غلظت ایزوتوپ ها در جریان پسماند و محصول برای دو آبشار مدل Q و R

Isotope	$z_{i,f}$	Q Cascade		R Cascade	
		x_w	y_p	x_w	y_p
Xe-124	0.00093	0.00028	0.0034	0.00029	0.0037
Xe-126	0.0009	0.00041	0.0027	0.00043	0.0029
Xe-128	0.01917	0.0129	0.0425	0.0134	0.0443
Xe-129	0.2644	0.2095	0.4694	0.2151	0.4803

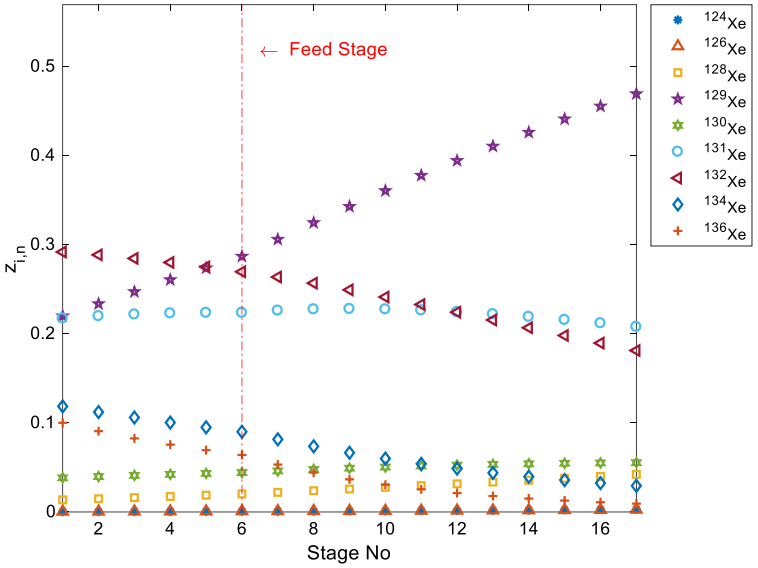
Xe-130	0.0408	0.0370	0.0552	0.0375	0.0553
Xe-131	0.2118	0.2130	0.2072	0.2137	0.2033
Xe-132	0.2689	0.2924	0.1811	0.2905	0.1743
Xe-134	0.1044	0.1245	0.0293	0.1220	0.0274
Xe-136	0.0887	0.1099	0.0092	0.1070	0.0084

جدول ۳– مشخصات و پارامترهای بدست آمده برای آبشار مدل Q در M^* برابر با ۱۲۹/۵ و مدل تطبیق یافته R برای دو جزء چهارم و پنجم

Stages. No	Q Cascade			R Cascade		
	machine	Cut of Stages	Z(g/hr)	machine	Cut of Stages	Z(g/hr)
1	6	0.4732	119.9866	6	0.4741	120.2594
2	11	0.4755	228.7547	11	0.4754	229.2256
3	15	0.4763	328.362	15	0.4765	328.9698
4	20	0.4777	420.4581	20	0.4776	421.1517
5	24	0.4785	506.3783	24	0.4786	507.1145
6	27	0.4797	587.2147	27	0.4796	587.9561
7	24	0.4813	510.7465	24	0.4812	511.2477
8	21	0.4828	442.8465	21	0.4827	443.1612
9	18	0.4842	381.9084	18	0.484	382.0799
10	15	0.4854	326.6607	15	0.4853	326.7246
11	13	0.4866	276.0887	13	0.4864	276.0746
12	11	0.4876	229.3754	11	0.4875	229.3084
13	9	0.4886	185.8569	9	0.4885	185.7588
14	7	0.4895	144.9888	7	0.4894	144.8786
15	5	0.4905	106.3196	5	0.4903	106.2145
16	4	0.4912	69.47119	4	0.4911	69.3868
17	2	0.4922	34.12299	2	0.4918	34.0739



شکل ۱– برش و تعداد ماشینهای سانتریفیوژ در تمام مراحل آبشارهای مدل R و Q



شکل ۲– غلظت تمام ایزوتوپ ها در جریان ورودی به مراحل برای دو آبشار مدل R و Q

جدول ۴– مقایسه غلظت ایزوتوپ ها در جریان پسماند و محصول برای دو آبشار مدل Q و R

Isotope	$z_{i,f}$	Q Cascade		R Cascade	
		x_w	y_p	x_w	y_p
Xe-124	0.00093	0.00023	0.0036	0.00023	0.0036
Xe-126	0.0009	0.00034	0.0029	0.00034	0.0029
Xe-128	0.01917	0.0125	0.0444	0.0125	0.0444
Xe-129	0.2644	0.2064	0.4827	0.2066	0.4827
Xe-130	0.0408	0.0369	0.0556	0.0369	0.0556
Xe-131	0.2118	0.2140	0.2034	0.2140	0.2034
Xe-132	0.2689	0.2944	0.1729	0.2943	0.1729
Xe-134	0.1044	0.1251	0.0266	0.1250	0.0266
Xe-136	0.0887	0.1101	0.0080	0.1101	0.0080

۵-بحث و نتیجه گیری

در این تحقیق عملکرد جداسازی آبشار مدل Q مورد ارزیابی قرار گرفت. در این راستا یک کد محاسباتی برای تجزیه و تحلیل و تعیین پارامترهای آبشار مدل Q و مدل تطبیق یافته R تهیه شد. در این تحقیق از مقایسه روش تحلیلی مدل Q با روش عددی مدل R نشان داده می‌شود در صورتی که مقدار پارامتر M* برابر میانگین حسابی دو جزء در ترکیب ایزوتوپی باشد عملکرد این دو مدل یکسان است. همچنین در صورتی که مقدار پارامتر M* در آبشار Q برابر با ۱۲۹/۹ انتخاب شود آبشار تطبیق یافته R برای دو جزء k_1 و k_2 به تعداد ماشین‌های سانتریفیوژ کمتری جهت غنی سازی ایزوتوپ چهارم زینان نیاز دارد. از مزایای مدلسازی به روش Q امکان تخمین اولیه مناسب برای پارامترهای آبشار است. در ضمن همانطور که ملاحظه می شود با انتخاب مناسب

پارامتر*M امکان طراحی آبشاری فراهم می شود که در آن برش مراحل به یکدیگر نزدیک بوده و امکان استفاده از ماشینهای یکسان در آبشار به راحتی فراهم می‌شود.

۶-مراجع

[1]. Kucherov. R. “Theory ofcascades for separating of multicomponent isotope mixture”, Atomic Energy, 19, 1965.
[2]. Sulaberidze. G .A, Borisevich. V. D, “Cascades for separation of multicomponent isotope mixture”, “, Separation Science and technology, vol 36, 2001.
[3]. De la Garza, A., “A generalization of the matched abundance-ratio cascade for multicomponent isotope separation”, Chem. Eng. Sci. 18, 1963.
[4]. Kolokoltsov. N. A, “Design of Cascades for separating isotope mixtures”, UDC 621.039.3, 1970.
[5]. Zeng. Sh, et al, “the Q- Cascade Explanation “, Separation Science and technology, vol, 2012.
[6]. Zeng. Sh, et al, “New approach to optimize Q- Cascade”, Chemical Engineering Science, vol 66, 2011.
[7]. Zeng. Sh, et al, “Further optimization of Q- Cascades”, Chemical Engineering Research and Design, 2015.
[8]. Zeng. Sh, Cheng. Y, “A numerical method of cascade analysis and design for multi-component isotope separation”, chemical engineering research and design, 2014.