بهینه‌سازی آبشار Q برای ایزوتوپ‌های پایدار تنگستن با الگوریتم نیوتون-رافسون

INC29-1182

محمدمهدی شادمان*، ولی اله غضنفری، فاطمه منصور زاده

پژوهشکده چرخه سوخت هسته‌ای، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، سازمان انرژی اتمی ایران، صندوق پستی: ۸۴۸۶-۱۱۳۶۵، تهران- ایران

چکیده:

آبشار مدل Q برای ارزیابی سریع پارامترهای آبشار و بهینه کردن آن‌ها در جداسازی ایزوتوپ‌ها مطرح شده است. محاسبه طراحی چنین آبشارهای جداسازی برای مقادیر معین غلظت برای یک جزء هدف در محصول و جریان پسماند شامل یافتن تعداد مراحل در بخش‌های غنی‌سازی و تهی سازی، توزیع جریان در مراحل آبشار و همچنین تعیین مقادیر محصول یا جریان پسماند است. در این مطالعه، هدف جداسازی ایزوتوپ‌های تنگستن با استفاده از آبشار Q است. مقدار بهینه پارامتر M^*، در یک آبشار Q برای مقادیر مشخص از یک ایزوتوپ هدف در جریان محصول و پسماند محاسبه شد. با توجه به ماهیت غیرخطی بودن معادلات حاکم، الگوریتم حل نیوتن-رافسون برای این بهینه‌سازی پیشنهاد شد. الگوریتم ارائه‌شده، همگرایی زیادی در نتایج به دست داد. نتایج مدل نشان می‌دهد با افزایش غلظت جزء هدف تنگستن-۱۸۲ در جریان محصول و جزء هدف تنگستن-۱۸۴ در جریان پسماند، به ترتیب پارامتر M^* کاهش و افزایش می‌یابد. این در حالی است که تعداد کل مراحل تهی سازی و غنی‌سازی با افزایش غلظت جزء هدف در جریان محصول و پسماند، افزایش می‌یابد.

کلیدواژه‌ها: ایزوتوپ‌های پایدار، پارامتر M^*، آبشار Q

Q cascade optimization for tungsten stable isotopes with Newton-Raphson algorithm

Mohamad Mahdi Shadman*, Valiyollah Ghazanfary, Fatmeh Mansourzadeh

Nuclear Fuel Cycle Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute, P.O.BOX: 11365-8486, Tehran, Iran,

Abstract:

The design calculation of the cascades to achieve a certain concentration for a target component in the product and waste stream includes finding the number of stages in the enrichment and depletion sections, the flow distribution in the stages of the cascade, and also determining the values of the product or waste stream. This study aims to investigate the separation of the tungsten isotopes using the Q-cascade. The optimal value of the M^* parameter was calculated in a Q-cascade for a certain concentration of a target isotope in the product and waste streams. Due to the nonlinear nature of the governing equations, the Newton-Raphson solution algorithm was proposed for this optimization. This algorithm had a great convergence in the results. The results of the model show that with increasing concentration of W-182 as the target component in the product stream and W-184 as the target component in the waste stream, the parameter M^* decreases and increases, respectively. Meanwhile, the total number of depletion and enrichment stages increases with the increase in the concentration of the target component in the product and waste stream.

Keywords: Stable isotopes, M^* parameter, Q-cascade

۱. مقدمه

آبشارهای جداسازی مخلوط‌های چند جزئی شامل مراحل جداسازی (عناصر) با ضریب غنی‌سازی کلی ε_{ij} بسیار کمتر از یک، نقش مهمی در عملکرد جداسازی مخلوط دارند. محاسبه طراحی چنین آبشارهای جداسازی برای مقادیر معین غلظت برای یک جزء هدف در محصول و جریان پسماند شامل جستجوی تعداد کل مراحل جداسازی در یک آبشارN، تعداد مراحل در بخش‌های غنی‌سازی S_p و تهی سازی S_w توزیع جریان در مراحل آبشار $L(s)$ و همچنین تعیین مقادیر محصول یا جریان پسماند است. درعین‌حال مجموعه پارامترهای یافت شده باید با مقادیر بهینه مطابقت داشته باشد. در تئوری جداسازی مخلوط، این مسئله از طریق مفهوم مدل آبشار پروفایل پیوسته (MCCP) حل می‌شود. با استفاده از این ابزار، عبارات پارامترهای آبشاری به‌صورت تحلیلی به دست می‌آید. این محاسبات، زمینه را برای محاسبه بیشتر آبشارهای مربعی یا مربعی شده و بهینه‌سازی پارامترهای آن‌ها ارائه می‌دهد[۱-۳]. مدل‌های مختلفی برای طراحی آبشارها در جداسازی ایزوتوپ‌های چند جزئی ارائه شده است. آبشار مدل Q برای ارزیابی سریع پارامترهای آبشار و بهینه کردن آن‌ها در جداسازی ایزوتوپ‌ها مطرح شده است. اگرچه آبشار مدل Q برای آبشارهای با فاکتور جداسازی پایین صادق است، بااین‌وجود برای آبشارهای با فاکتور جداسازی بالا نیز کاربرد دارد[۴]. ایده اصلی محاسباتی در مدل آبشار پروفایل پیوسته MCCP، شامل جایگزینی غلظت‌های اجزا $C_i(s)$ در مخلوط تحت جدایش به‌جای برخی از توابع مشخصه $\varphi_i(s)$ است که باعث می‌شود که معادله انتقال جرم در یک آبشار به‌صورت فرم انتگرالی زیر دربیایید.

$$\varphi_i(s) + \sum_{j=1}^{m} \frac{2PC_{j,P}}{L(s)} \int_0^{S_P} \varphi_i(t) exp\big(\varepsilon_{ij}(S-t)\big)dt = \sum_{j=1}^{m} \frac{C_{i,F}L_F}{L(s)} exp\big(\varepsilon_{ij}S\big) \quad i = 1, \dots, m \qquad (1)$$

که در این معادله P جریان محصول آبشار، $C_{j,P}$ غلظت جزء j در جریان محصول، $L(s)$ جریان خوراک با مرحله S، $C_{i,F}$ غلظت جزء i در جریان خوراک، F جریان خوراک آبشار و L_F جریان خوراک ورودی به مرحله خوراک است[۵, ۶].

Borisevich و همکاران به بررسی جداسازی ایزوتوپ‌های کادمیم ۱۱۴ و ۱۱۶ با استفاده از آبشار Q پرداختند و تعداد مراحل لازم جهت مینیمم سازی جریان‌های بین مرحله‌ای را به دست آوردند[۱]. منصور زاده و همکاران به بررسی جداسازی ایزوتوپ‌های تلوریم با استفاده از آبشار Q پرداختند[۷]. در این مطالعه معادلات و روش حل مدل آبشار پروفایل پیوسته MCCP برای ایزوتوپ‌های تنگستن معرفی شده است.

۲. روش کار

مدل‌سازی

۲. ۱. توصیف مدل و معادلات حاکم

یکی از توابع ریاضی که می‌تواند به تابع مشخصه $\varphi_i(s)$ اختصاص یابد به فرم معادله (۲) است[۱].

$$\varphi_i(l) = exp(Q_i l) \qquad (۲)$$

که پارامتر Q_i و Q_j به‌صورت معادله (۳) باهم ارتباط دارند.

$$Q_i - Q_j = \varepsilon_{ij} \qquad (۳)$$

پارامتر جداسازی کلی ε_{ij} ε_{ij} (معادل با لگاریتم α_{ij} که همان فاکتور جداسازی است) به‌صورت زیر تعریف می‌شود.

$$\varepsilon_{ij} = \varepsilon_0(M_j - M_i) \qquad (۴)$$

که M_i و M_j جرم مولی جزء i و j می‌باشند. ε_0 فاکتور جداسازی اختلاف جرم واحد و پارامتر Q_i برای ایزوتوپ i ام از معادله (۵) قابل‌محاسبه است[۱]:

$$Q_i = \varepsilon_0(M^* - M_i) \qquad (۵)$$

که M^* در آن عدد جرمی یک جزء فرضی است و جداسازی‌ها بر اساس آن سنجیده می‌شوند. اجزاء خوراک با عدد جرمی کمتر از M^* $(M_i < M^*)$ در جریان سبک و اجزاء با عدد جرمی بیشتر از M^* $(M^* < M_i)$ در جریان سنگین آبشار قرار می‌گیرند. با برقراری موازنه جرم کلی و موازنه جرم جزئی و همچنین شرط $\sum_{j=1}^{m} C_j = 1$ توزیع غلظت اجزا در جریان محصول و پسماند به‌صورت معادلات (۶) و (۷) به دست می‌آیند[۱].

$$C_{i,P} = \frac{1-exp(Q_iS_W)}{exp(-Q_jS_P)-exp(Q_jS_W)}C_{i,F}/\sum_{j=1}^{N_c}(\frac{1-exp(Q_jS_W)}{exp(-Q_jS_P)-exp(Q_jS_W)}C_{j,F}) \quad (۶)$$

$$C_{i,W} = \frac{exp(-Q_iS_P)-1}{exp(-Q_jS_P)-exp(Q_jS_W)}C_{i,F}/\sum_{j=1}^{N_c}(\frac{exp(-Q_iS_P)-1}{exp(-Q_jS_P)-exp(Q_jS_W)}C_{j,F}) \quad (۷)$$

که نسبت جریان محصول به خوراک طبق معادله (۸) و نسبت جریان پسماند به خوراک طبق معادله (۹) به دست می‌آیند[۱].

$$\frac{P}{F} = \sum_{j=1}^{m}(\frac{exp(Q_jS_W)-1}{exp(Q_jS_W)-exp(-Q_jS_P)}C_{j,F}) \quad (۸)$$

$$\frac{W}{F} = \sum_{j=1}^{N_c}(\frac{1-exp(-Q_jS_P)}{exp(Q_jS_W)-exp(-Q_jS_P)}C_{j,F}) \quad (۹)$$

مقدار نرخ جریان میان مرحله‌ای کل نیز با استفاده از معادله (۱۰) تعیین می‌شود[۱].

$$\sum L = 2\sum_{i=1}^{m}\left\{\frac{PC_{i,P}[exp(-Q_iS_P)-1]+WC_{i,W}[exp(Q_iS_W)-1]}{Q_i^2}+\frac{PC_{i,p}S_P-WC_{i,W}S_W}{Q_i}\right\} \quad (۱۰)$$

۲. ۲. الگوریتم حل

در این مطالعه، هدف جداسازی ایزوتوپ‌های تنگستن با استفاده از آبشار Q است. به‌منظور یافتن مقدار بهینه پارامتر M^*، تابع $\frac{\sum L\varepsilon_0^2}{2P}$ در یک آبشار Q برای مقادیر مشخص از یک ایزوتوپ هدف در جریان محصول و پسماند محاسبه می‌شود. در اینجا الگوریتم حل به‌صورت مراحل زیر می‌باشد.

الف-جزء هدف (n) انتخاب می‌گردد و مقادیر به $C_{n,P}$ و $C_{n,W}$ تخصیص می‌یابد.

ب- مقداری برای فاکتور جداسازی انتقال جرم واحد ε_0 در نظر گرفته می‌شود.

ج-درصورتی‌که تعداد کل ایزوتوپ‌ها برابر m باشد، پارامتر M^* در محدود M_1 تا M_m انتخاب می‌شود.

د-با توجه به مشخص بودن $C_{n,P}$ و $C_{n,W}$، معادلات (۶) و (۷) برای ایزوتوپ هدف n در نظر گرفته می‌شود و مقادیر S_P و S_W حل می‌گردد. ماهیت معادلات (۶) و (۷) غیرخطی می‌باشند که امکان حل تحلیلی آن‌ها وجود ندارد. همچنین باید توجه داشت درصورتی‌که M^* دقیقاً برابر با یکی از اجزا M_1 تا M_m در نظر گرفته شود، پاسخ معادلات (۶) و (۷) واگرا می‌شوند. به‌منظور غلبه بر این مشکلات محاسباتی، الگوریتم حل نیوتن-رافسون برای این دستگاه دو معادله غیرخطی پیشنهاد شد که مطابق با معادلات زیر می‌باشد.

$$F_1(S_P,S_W) = C_{n,P} - \frac{1-exp(Q_nS_W)}{exp(-Q_nS_P)-exp(Q_nS_W)}C_{n,F}/\sum_{j=1}^{N_c}(\frac{1-exp(Q_jS_W)}{exp(-Q_jS_P)-exp(Q_jS_W)}C_{j,F}) \quad (۱۱)$$

$$F_2(S_P,S_W) = C_{n,W} - \frac{exp(-Q_nS_P)-1}{exp(-Q_nS_P)-exp(Q_nS_W)}C_{n,F}/\sum_{j=1}^{N_c}(\frac{exp(-Q_iS_P)-1}{exp(-Q_jS_P)-exp(Q_jS_W)}C_{j,F}) \quad (۱۲)$$

$$\begin{bmatrix}S_P\\S_W\end{bmatrix}^{(k+1)} = \begin{bmatrix}S_P\\S_W\end{bmatrix}^{(k)} - \begin{bmatrix}\frac{\partial F_1}{\partial S_P} & \frac{\partial F_1}{\partial S_W}\\ \frac{\partial F_2}{\partial S_P} & \frac{\partial F_2}{\partial S_W}\end{bmatrix}^{-1} \times \begin{bmatrix}F_1(S_P,S_W)\\F_2(S_P,S_W)\end{bmatrix}^{(k)} \quad (۱۳)$$

که در حل فوق k مرحله محاسبات است. باید توجه داشت درصورتی‌که در یک مقدار M^* مشخص درصورتی‌که حل واگرا شود باید بازه مقدار M^* را تغییر داد. حلگرهای مختلفی برای معادلات (۱۱) و (۱۲) ازجمله Solve در نرم‌افزار Matlab

بررسی شد که حل‌های واگرا به دست می‌آمد. از بین روش‌های بررسی‌شده، روش حل نیوتن-رافسون همگرایی زیادی داشت و به مقدار کمی به حدس اولیه وابسته است.

ه-با داشتن S_P و S_W ، مقادیر $C_{i,P}$ و $C_{i,W}$ از معادلات (۶) و (۷) محاسبه می‌شود.

د-مقدار $\frac{\sum L\varepsilon_0^2}{2P}$ با استفاده از معادلات (۸)، (۹) و (۱۰) محاسبه می‌شوند.

۲. ۳. پارامترهای موردنیاز

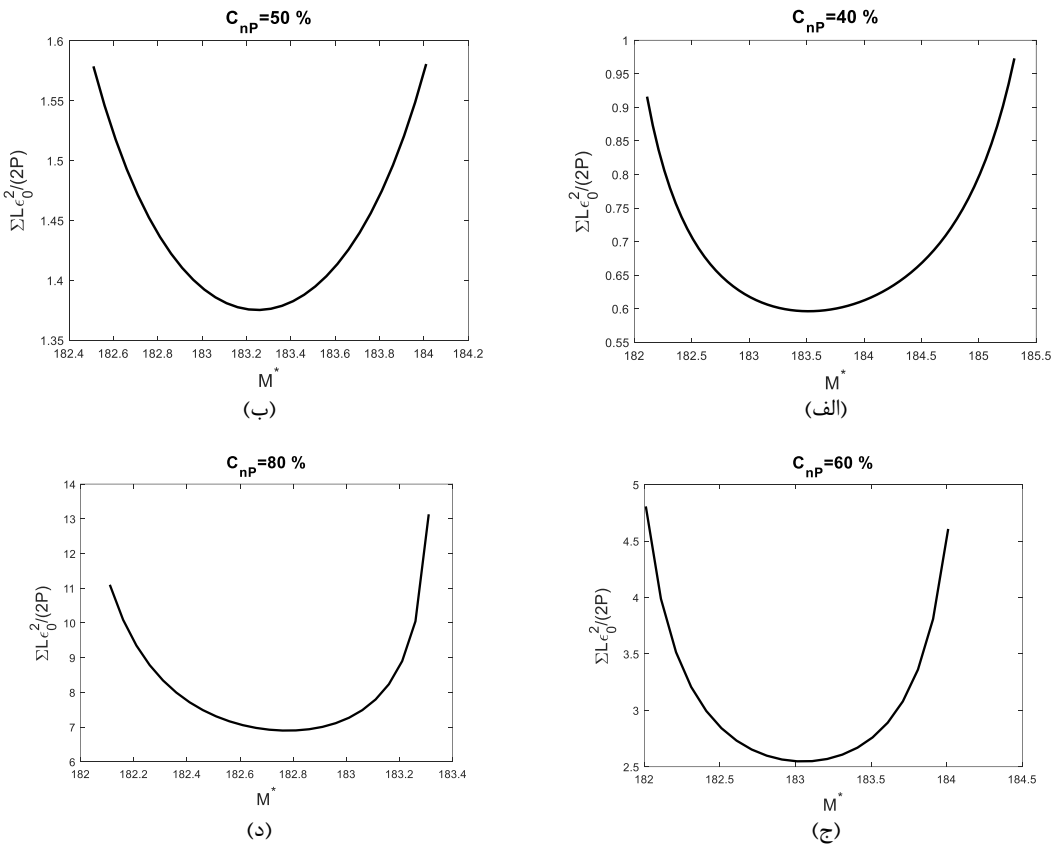
در جدول ۱ غلظت‌های طبیعی ایزوتوپ‌های تنگستن نشان داده شده است. مقدار فاکتور ε_0 (فاکتور جداسازی اختلاف جرم واحد) برابر با ۰/۰۸۷۵ در نظر گرفته‌شده است.

جدول ۱. غلظت طبیعی ایزوتوپ‌های تنگستن

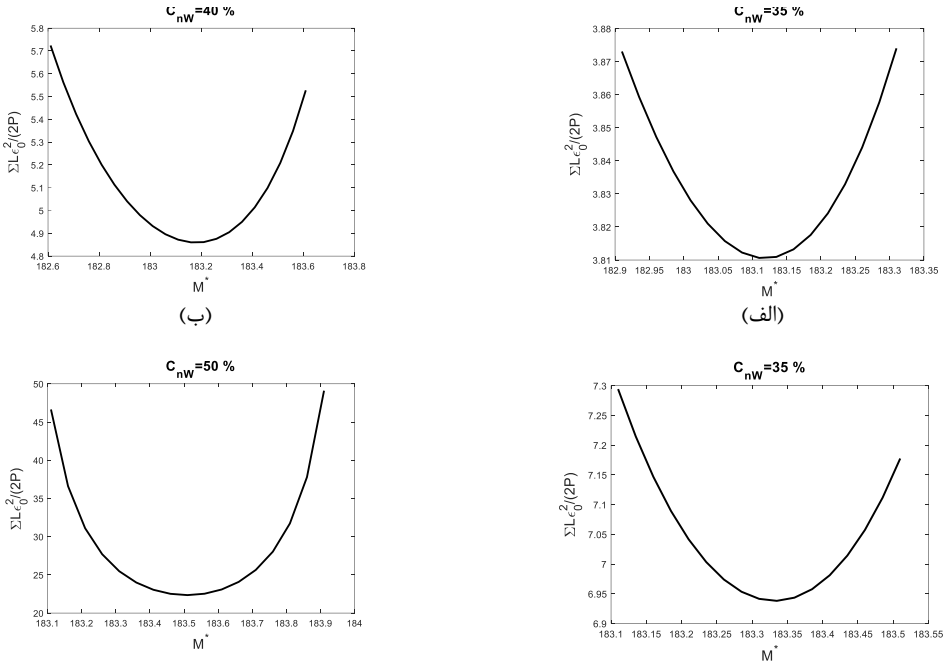
ایزوتوپ‌ها	*W-186*	*W-184*	*W-183*	*W-182*	*W-180*
درصد مولی	۲۸/۴۳	۳۰/۶۴	۱۴/۳۱	۲۶/۵۰	۰/۱۲

۳. بحث و نتایج

در ادامه نتایج مدل‌سازی برای ایزوتوپ هدف *W-182* در محصول و ایزوتوپ *W-184* در پسماند آورده شده است. در مدل‌سازی‌های حاضر، مقدار غلظت جزء هدف *W-182* در جریان پسماند برابر با ۵ درصد و مقدار غلظت جزء هدف *W-184* در جریان محصول برابر با ۵ درصد در نظر گرفته‌شده است. نمودار مقدار پارامتر $\frac{\sum L\varepsilon_0^2}{2P}$ برحسب پارامتر M^* به ازای مقادیر مختلف غلظت جزء هدف *W-182* در جریان محصول در شکل ۱ و به ازای مقادیر مختلف غلظت جزء هدف *W-184* در جریان پسماند در شکل ۲ آورده شده است. شکل ۱ و ۲ با استفاده از الگوریتم بهینه‌سازی نیوتن-رافسون در فوق توضیح و ترسیم شده است. مطابق با شکل مشاهده می‌شود الگوریتم به‌کاررفته همگرایی قابل قبولی دارد.



شکل ۱. نمودار بهینه‌سازی مقدار پارامتر M^* در مقادیر مختلف از غلظت جزء هدف *W-182* در محصول



شکل ۲. نمودار بهینه‌سازی مقدار پارامتر M^* در مقادیر مختلف از غلظت جزء هدف *W-184* در پسماند

در جدول ۲ مقادیر بهینه متغیرها برای ایزوتوپ هدف *W-182* و در جدول ۳ مقادیر بهینه متغیرها برای ایزوتوپ هدف *W-184* نمایش داده شده است. مطابق جدول ۲ مشاهده می‌شود که هراندازه غلظت جزء هدف در جریان محصول خروجی از آبشار بیشتر باشد مقدار پارامتر M^* کاهش می‌یابد. درواقع با افزایش غلظت جزء هدف در جریان محصول، ایزوتوپ‌های سبک‌تری مثل *W-180* در جریان محصول جمع‌آوری می‌شوند و ایزوتوپ‌های سنگین‌تر بیشتری در جریان پسماند جمع‌آوری می‌شوند. هم‌چنین مشاهده می‌شود که با افزایش $C_{n,P}$، تعداد مراحل قسمت غنی‌سازی آبشار افزایش می‌یابد. در غلظت‌های $C_{n,P}$کم ۴۰ تا ۶۰ درصد، تعداد مراحل در قسمت تهی سازی نسبت به تعداد مراحل در مرحله غنی‌سازی در محدوده کمی تغییر می‌کند. با افزایش غلظت $C_{n,P}$ (تا ۸۰ درصد) شیب تعداد مراحل بخش غنی‌سازی آبشار افزایش می‌یابد. برای نمونه با تغییر $C_{n,P}$ از ۶۰ تا ۸۰ درصد، تعداد مراحل بخش غنی‌سازی تقریباً دو برابر می‌شود. در جدول ۳، مشاهده می‌شود با افزایش غلظت جزء هدف در جریان پسماند، مقدار پارامتر M^* افزایش می‌یابد. درواقع با افزایش غلظت جزء هدف در جریان پسماند، ایزوتوپ‌های سنگین‌تری در بخش پسماند جمع‌آوری می‌شوند و تعداد مراحل لازم برای جداسازی چه در بخش غنی‌سازی، چه در بخش تهی سازی افزایش می‌یابد.

جدول ۲. مقادیر بهینه متغیرها برای ایزوتوپ هدف *W-182*

S_W	S_P	M^*	$\frac{\sum L\varepsilon_0^2}{2P}$	$C_{n,P}(\%)$
۱۱/۵۴	۱۱/۰۵	۱۸۳/۵۱	۰/۵۹	۴۰
۱۳	۱۹/۱۷	۱۸۳/۲۶	۱/۳۷	۵۰
۱۲/۳۰	۵۱/۹۷	۱۸۳/۰۱	۲/۵۴	۶۰
۱۷/۵۰	۱۰۹/۲۳	۱۸۲/۷۶	۶/۸۹	۸۰

جدول ۳. مقادیر بهینه متغیرها برای ایزوتوپ هدف *W-184*

S_W	S_P	M^*	$\frac{\sum L\varepsilon_0^2}{2P}$	$C_{n,W}(\%)$
۵/۶۳	۳۵/۳	۱۸۳/۱۱	۳/۸۱	۳۵
۱۴/۰۸	۳۶/۹۶	۱۸۳/۱۶	۴/۸۶	۴۰
۲۵/۹۰	۴۵/۰۳	۱۸۳/۳۴	۶/۹۴	۴۵
۱۲۱/۶۲	۶۱/۸۴	۱۸۳/۵۱	۲۲/۳۵	۵۰

۴. نتیجه‌گیری

مدل‌های مختلفی برای طراحی آبشارها در جداسازی ایزوتوپ‌های چند جزئی ارائه شده است. آبشار مدل Q برای ارزیابی سریع پارامترهای آبشار و بهینه کردن آن‌ها در جداسازی ایزوتوپ‌ها مطرح شده است. اگرچه آبشار مدل Q برای آبشارهای با فاکتور جداسازی پایین صادق است، بااین‌وجود برای آبشارهای با فاکتور جداسازی بالا نیز کاربرد دارد. محاسبه طراحی چنین آبشارهای جداسازی برای مقادیر معین غلظت برای یک جزء هدف در محصول و جریان پسماند شامل جستجوی تعداد کل مراحل جداسازی در یک آبشارN، تعداد مراحل در بخش‌های غنی‌سازیS_p و تهی سازی S_w توزیع جریان در مراحل آبشار$L(s)$ و همچنین تعیین مقادیر محصول یا جریان پسماند است. در راستای جداسازی ایزوتوپی با الگوریتم آبشار-Q پارامتر M^* در آن عدد جرمی یک جزء فرضی است، تعریف می‌شود و جداسازی‌ها بر اساس آن سنجیده می‌شوند. اجزاء خوراک با عدد جرمی کمتر از M^* $(M_i< M^*)$ در جریان سبک و اجزاء با عدد جرمی بیشتر از M^* $(M^*<M_i)$ در جریان سنگین آبشار قرار می‌گیرند. در این مطالعه، هدف جداسازی ایزوتوپ‌های تنگستن با استفاده از آبشار Q است. به‌منظور یافتن مقدار بهینه پارامتر M^*، تابع $\frac{\sum L\varepsilon_0^2}{2P}$ در یک آبشار Q برای مقادیر مشخص از یک ایزوتوپ هدف در جریان محصول و پسماند محاسبه می‌شود. به‌منظور غلبه بر مشکلات محاسباتی، الگوریتم حل نیوتن-رافسون برای این دستگاه دو معادله غیرخطی پیشنهاد شد. نتایج نشان داد که هراندازه غلظت جزء مطلوب *W-182* در جریان محصول خروجی از آبشار بیشتر باشد مقدار پارامتر M^* کاهش می‌یابد. درواقع با افزایش غلظت جزء هدف سبک‌تر در جریان محصول، ایزوتوپ‌های سبک‌تری مثل *W-180* در جریان محصول جمع‌آوری می‌شوند و ایزوتوپ‌های سنگین‌تر بیشتری در جریان پسماند جمع‌آوری می‌شوند. هم‌چنین مشاهده شد که با افزایش $C_{n,P}$، تعداد مراحل قسمت غنی‌سازی آبشار افزایش می‌یابد. در غلظت‌های $C_{n,P}$ کم ۴۰ تا ۶۰ درصد، تعداد مراحل در قسمت تهی سازی نسبت به تعداد مراحل در مرحله غنی‌سازی در محدوده کمی تغییر می‌کند. با افزایش غلظت $C_{n,P}$ (تا ۸۰ درصد) شیب تعداد مراحل بخش غنی‌سازی آبشار افزایش می‌یابد. برای نمونه با تغییر $C_{n,P}$ از ۶۰ تا ۸۰ درصد، تعداد مراحل بخش غنی‌سازی تقریباً دو برابر می‌شود. همچنین مشاهده می‌شود با افزایش غلظت جزء هدف *W-184*در جریان پسماند، مقدار پارامتر M^* افزایش می‌یابد. درواقع با افزایش غلظت جزء هدف سنگین‌تر در جریان پسماند، ایزوتوپ‌های سنگین‌تری در بخش پسماند جمع‌آوری می‌شوند و تعداد مراحل لازم برای جداسازی چه در بخش غنی‌سازی، چه در بخش تهی سازی افزایش می‌یابد.

۵. مراجع

1 Borisevich, V., G. Sulaberidze, and S. Zeng, New approach to optimize Q-cascades. Chemical engineering science, 2011. 66(3): p. 393-396.
2 Song, T. et al. Comparative study of the model and optimum cascades for multicomponent isotope separation. Separation Science and Technology, 2010. 45(14): p. 2113-2118.
3 Zeng, S. et al. The Q-cascade explanation. Separation Science and Technology, 2012. 47(11): p. 1591-1595.
4 Zhang, Y. et al. Further optimization of Q-cascades. Chemical Engineering Research and Design, 2015. 100: p. 509-517.
5 Zeng, S. et al. Use of the Q-cascade in calculation and optimization of multi-isotope separation. Chemical engineering science, 2011. 66(13): p. 2997-3002.
6 Zeng, S. et al. Enhancing the performance of Q-cascade for separating intermediate components. in Journal of Physics: Conference Series. 2016. IOP Publishing.
7 Mansourzadeh, F. A. Ghorbanpour Khamseh, and J. Safdari, Investigation the effect of M* and α0 on the separation of 4th and 8th isotopes of tellurium in a Q model cascade. Journal of Nuclear Science and Technology (JonSat), 2022. 43(3): p. 55-64.