

مطالعه فاکتور جداسازی سامانه انتشار گازی برای جداسازی ایزوتوپی گاز UF₆ به روش شبیه‌سازی مستقیم مونت کارلو

مجید عابدی مصیر، مهدی آقائی مغانلو*

گروه چرخه و سوخت، دانشکده مهندسی هسته‌ای، دانشگاه شهید بهشتی، تهران، ایران

چکیده: هدف از انجام این پژوهش، بررسی تأثیر نوع رژیم جریان بر شکل‌گیری جداسازی در سامانه انتشار گازی، تأثیر عدد نودسن بر فاکتور جداسازی سامانه یادشده و سرعت انتشار ذره‌ها در درون روزنه‌های غشاء متخلخل می‌باشد. در پژوهش حال حاضر نخست به شرح مختصری از نظری حاکم بر سامانه پرداخته؛ سپس با مدل‌سازی المانی از سامانه مذکور، تأثیر نوع رژیم جریان و عدد نودسن بر تغییرهای غنا هر یک از اجزای گازی و فاکتور جداسازی حالت‌های گوناگون و سرانجام سرعت پخش جزء سبک و سنگین درون روزنه‌ها بررسی خواهد شد و با نمودارها و معادله‌های نظری حاکم بر مسئله مقایسه خواهد شد. همچنین شایان ذکر است که از دو ایزوتوپ سبک و سنگین گاز UF₆ برای جداسازی به روش انتشار گازی استفاده شده است. نتیجه‌ها نشان خواهند داد؛ در رژیم جریان پیوسته جداسازی شکل نمی‌گیرد و تنها در رژیم جریان مولکولی و گذرا جداسازی انجام خواهد گرفت. همچنین با افزایش عدد نودسن، میزان تغییرهای تغنا در قسمت‌های گوناگون سامانه نسبت به گاز ورودی افزایش خواهد یافت؛ به عبارت دیگر با افزایش عدد نودسن، جداسازی بیش‌تری شکل گرفته و فاکتور جداسازی سامانه افزایش می‌یابد. به طور مثال برای عدد نودسن ۰/۱ فاکتور جداسازی برابر با ۱/۰۰۱۰۱ و برای عدد نودسن ۰/۸ این مقدار به ۱/۰۰۳۳۳ افزایش خواهد یافت. در آخر سرعت انتشار ذره‌ها در درون روزنه‌ها که معیاری از جداسازی موثر ذره‌ها می‌باشد بررسی شده است. نتیجه‌ها نشانگر این است که سرعت انتشار ذره‌ها برای جزء سبک، نسبت به جزء سنگین از مقدار بیش‌تری برخوردار بوده و این امر به دلیل بالا بودن شدت عبور ذره‌های جزء سبک نسبت به جزء سنگین از درون روزنه‌ها می‌باشد.

واژگان کلیدی: سامانه انتشار گازی، عدد نودسن، فاکتور جداسازی، غشاء متخلخل.

KEYWORDS: Gaseous diffusion system, Knudsen number, Separation factor, Porous membrane.

مقدمه

اسکاتلندی، توماس گراهام انجام شده است؛ که بیان می‌کند با توجه به اصل برابری انرژی جنبشی برای هر دو جزء گازی در هنگام عبور

مبنای اصلی فرایند پخش گازی، انتشار مولکولی می‌باشد [۱]. اولین مطالعه‌ها در زمینه پخش مولکولی توسط فیزیکدان و شیمیدان

*Email: m_aghiaie@sbu.ac.ir

* عهده‌دار مکاتبات

وانگ و همکاران در سال ۲۰۰۴ میلادی نشان دادند که جداسازی جریان در جریان روزنه اوریفیس در عدد رینولدز کم اتفاق می‌افتد و هیچ جدایی جریانی در جریان زاویه‌ای رخ نمی‌دهد. بنابراین، آن‌ها ثابت کردند که هندسه کانال و نوع جریان گاز میکرو به طور چشمگیری جداسازی را تحت تأثیر قرار می‌دهد [۱۰].

با توجه به مطالب بیان شده؛ هدف از انجام این پژوهش، مدل‌سازی و شبیه‌سازی جداسازی پخش‌گازی با استفاده از روش شبیه‌سازی مستقیم مونت کارلو می‌باشد. با توجه به این که برای شکل‌گیری جداسازی در این سامانه، رژیم جریان باید در بازه رژیم مولکولی و یا رژیم گذرا باشد؛ از روش مونت کارلو برای شبیه‌سازی استفاده شده است [۱۱]. با توجه به این که فلوتور تنها یک ایزوتوپ پایدار دارد و هگزافلوراید تنها ترکیب اورانیوم با فشار بخار بزرگ در دمای اتاق است؛ بنابراین از ترکیب هگزافلوراید اورانیوم به عنوان مخلوط ایزوتوپ برای فرایند جداسازی در این فرایند استفاده می‌شود. از سال ۱۹۵۶ میلادی، اورانیوم غنی شده با سامانه پخش‌گازها برای اهداف صلح آمیز توسط ایالات متحده آمریکا ساخته شده است. بنابراین در پژوهش حال حاضر از دو ایزوتوپ UF_6^{238} و UF_6^{235} به عنوان جزء سبک و سنگین به عنوان سیال ورودی به سامانه انتشار گاز استفاده شده است. همچنین در ابتدا شرح مختصری از انواع رویکردهای شبیه‌سازی داده و سپس به بررسی $kzvd$ سامانه پخش‌گازی خواهیم پرداخت و سرانجام نتیجه‌های استنتاج شده از این مدل شبیه‌سازی با معادله‌های $kzvd$ مقایسه خواهد شد.

بخش نظری

انواع رویکرد شبیه‌سازی

شبیه‌سازی می‌تواند از نقطه نظر بسیاری تقسیم بندی شود. اما در پژوهش حال حاضر، با توجه به رویکرد در مطالعه سامانه، شبیه‌سازی به دو گروه تقسیم شده است [۱۲]:

۱. شبیه‌سازی با رویکرد میکروسکوپی
۲. شبیه‌سازی با رویکرد میکروسکوپی

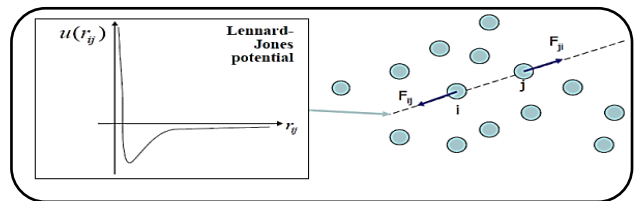
شبیه‌سازی با رویکرد میکروسکوپی

در این نوع رویکرد، که عموماً برای رژیم جریان پیوسته مورد استفاده قرار می‌گیرد، سیال همانند یک توده پیوسته مدل‌سازی می‌شود و به عبارتی دیدگاه عام حاکم بر سامانه، حرکت پیوسته سیال می‌باشد. همچنین از معادله‌های اویلر و ناویر-استوکس به عنوان معادله‌های مدل‌سازی ریاضی بهره می‌برند. اطلاعات و متغیرهای

از روزنه‌ها، ذره‌های سبک‌تر به دلیل جرم کم‌تر، سرعت بیشتری خواهند داشت و با سرعت و شدت بیشتری از روزنه‌ها عبور خواهند نمود [۲]. جداسازی ایزوتوپی به روش سامانه پخش‌گازی $kosz$ توسط لیندمان و استون در مقیاس آزمایشگاهی انجام شد. اولین غنی‌سازی ایزوتوپ‌ها به روش پخش‌گازی توسط استون بر روی ایزوتوپ‌های نئون و توسط هارکینر و دیگران بر روی ایزوتوپ‌های کلر و جیوه دیده شد [۳]. استفاده از یک آبشار ۲۴ مرحله‌ای توسط هرتر به جای تکرار فرایند ابتدایی، کمک به بهبود غنی‌سازی نئون ۲۲ نمود. پس از آن، آبشارهای ۳۴ تا ۴۸ مرحله برای غنی‌سازی نئون در نئون ۲۲، هیدروژن در دوتریوم، نیتروژن در نیتروژن ۱۵ و متان در کربن ۱۳ مورد استفاده قرار گرفتند [۳].

در طی جنگ جهانی اول، فرایند پخش‌گازها برای تولید اورانیوم غنی شده در ایزوتوپ U^{235} به عنوان بخشی از پروژه منهن آمریکا و پروژه مدیریت آلیاژهای بریتانیا تلاش‌های پژوهش مشترک آمریکایی و بریتانیا پس از ۱۹۴۲ میلادی منجر به ساخت اولین کارخانه پخش‌گازی توسط آمریکا در Oak Ridge در سال ۱۹۴۵ میلادی شد [۴].

مطالعه‌های بسیاری در گذشته حول جداسازی غشاء و انواع آن‌ها انجام شده که می‌توان به بررسی اثر مخلوط‌گازها در غشاء سیلیکات توسط زیتو و همکاران در سال ۲۰۱۷ میلادی اشاره کرد که نشان دادند سطح نفوذ و انتشار، به شدت به نفوذ ذره‌ها کمک خواهد کرد [۵]. همچنین راجامانا کریشنا در سال ۲۰۱۷ میلادی از معادله‌های ماکسول-استیفن برای مدل نفوذ سطحی غشاء گرافن استفاده کرده و شبیه‌سازی اثرهای همبستگی با استفاده از نظریه شبه شیمیایی و شبیه‌سازی سینتیک مونت کارلو را نشان داد [۶]. دمی ژانگ و همکاران، در سال ۲۰۱۷ میلادی به بررسی اثرهای گوناگون بر بازیافت هیدروژن با استفاده از یک مدل ریاضی پیچیده و چند متغیره برای بازیافت هیدروژن با روش غشایی در نرم‌افزار متلب اشاره کردند [۷]. از طرفی اخیراً روش DSMC به طور فزاینده‌ای در شبیه‌سازی‌ها مورد استفاده قرار گرفته است. در سال ۲۰۱۰ میلادی، دربندی و همکاران، با بررسی اثرهای فشار برگشتی، نشان دادند که اگر عدد نودسن بیش‌تر از مقدار متوسط باشد، نیروی چسبندگی بالایی در لایه مرزی دیوار تشکیل می‌شود که از تشکیل جریان‌های صوتی جلوگیری می‌نماید [۸]. ولترکه و همکاران در سال ۲۰۱۲ میلادی یک رویکرد نوین برای مدل جریان پیوسته و رژیم گذرا را با استفاده از برهم نهی جریان هدایت و قانون انتشار فیک برای ارزیابی شار جرمی جریان گاز رها شده در یک میکروکانال مخروطی ارائه کردند [۹].



شکل ۱ - پتانسیل بین هسته‌ای

ورودی در این نوع شبیه‌سازی‌ها به صورت کمیت‌های ماکروسکوپی (مانند دما، غلظت، فشار، سرعت و...) می‌باشند. همچنین از مختصات اویلر برای دنبال کردن سیال و مطالعه سامانه استفاده می‌شود.

شبیه‌سازی با رویکرد میکروسکوپی

در این نوع رویکرد، مطالعه سامانه با رویکرد ذره‌ای و با استفاده از معادله‌های بولتزمن و مختصات لاگرانژی صورت می‌پذیرد. در این نوع نگرش معادله‌های حرکت و معادله‌های دینامیک ذره‌ای برای مجموعه ذره‌ها به صورت همزمان حل می‌شود تا در آخر همگرا شود. دو روش اصلی رویکرد میکروسکوپی در زیر آمده است [۱۱، ۱۲].

۱. شبیه‌سازی دینامیک مولکولی^۱
۲. شبیه‌سازی مستقیم به روش مونت کارلو^۲

شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

این نوع شبیه‌سازی بر پایه حل معادله‌های حرکت برای تمامی ذره‌ها به صورت همزمان و با رویکرد ذره‌ای می‌باشد. معادله حرکت برای مجموعه ذره‌ها به شکل زیر می‌باشد:

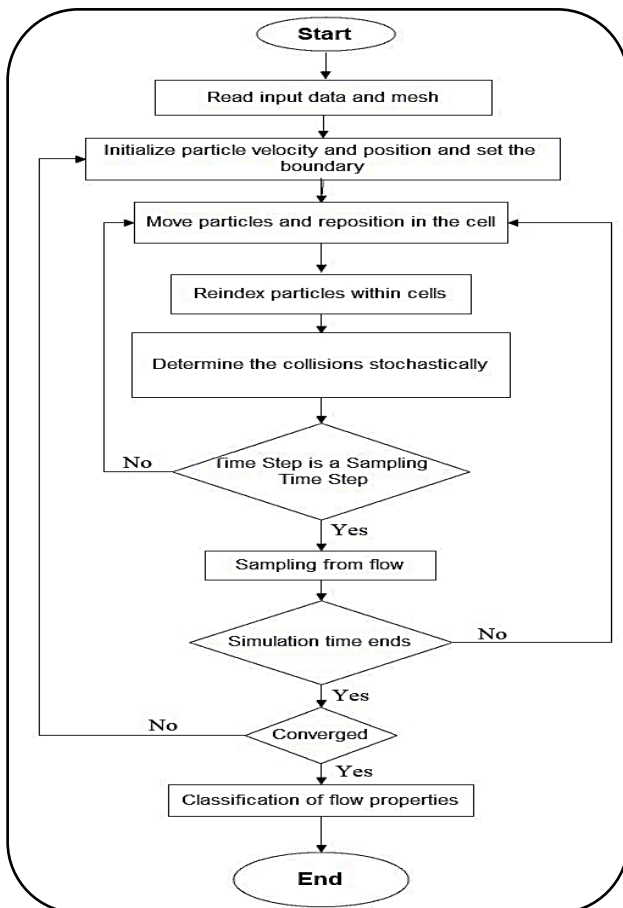
$$m_i \frac{d^2 v_i}{dt^2} = \sum_j f_{ij} + f_{ej} \quad i = 1; 2; 3 \dots \quad (1)$$

$$F_i = \sum_{j \neq i} F_{ij} = \sum_{j \neq i} - \frac{\partial u(r_{ij})}{\partial r_{ij}} e_{ij} \quad (2)$$

$$\frac{dp_i}{dt} = F_i \quad (3)$$

$$v_i = \frac{p_i}{m_i} \quad (4)$$

که f_{ij} نیرو داخلی بین ذره‌های i و j که از تابع پتانسیل ذره‌ها به دست می‌آید و f_{ei} نیروی خارجی وارد بر ذره‌ها، p_i مومنتم ذره، F_i برآیند نیروهای داخلی وارد بر ذره، $u(r_{ij})$ پتانسیل زوج مولکول‌ها و v_i سرعت ذره‌ای می‌باشد. همچنین می‌توان گفت که در این نوع رویکرد، از مختصات لاگرانژی برای مطالعه سامانه و ذره‌ها استفاده می‌شود. با توجه به در نظر گرفتن اندرکنش ذره‌ها و نیروهای



شکل ۲ - الگوریتم روش DSMC

خارجی موجود در این رویکرد، در مورد حرکت ذره‌ها و شدت برخورد ذره‌ها با قاطعیت می‌توان اظهار نظر کرد [۱۱، ۱۲].

شبیه‌سازی مستقیم به روش مونت کارلو (DSMC method simulation)

این نوع شبیه‌سازی، تقریبی از روش دینامیک مولکولی است. در واقع در این روش نیز از معادله‌های حرکت ذره‌ها که در معادله ۱ آورده شده استفاده می‌شود، تنها با این تفاوت که در این حالت از نیروی اندرکنش داخلی ذره‌ها، که منجر به تشکیل برخورد ذره‌ها شده چشم‌پوشی کرده؛ و شدت برخورد ذره‌ها را با تابع احتمالاتی مونت کارلو تعیین می‌نماید. بنابراین این روش عموماً برای گازهای رقیق و گازهایی با شدت برخورد کم، دقیق خواهد بود [۱۱، ۱۲].

الگوریتم DSMC

بر اساس معادله‌های بولتزمن، الگوریتم DSMC شامل چهار فرایند کلی است که عبارتند از [۱۱، ۱۲]:

(۱) MD simulations

(۲) DSMC method

و ذره‌های سبک‌تر شار سرعت بیش‌تری داشته باشند؛ بنابراین انتظار می‌رود با شدت بیش‌تری از روزنه عبور نمایند. همچنین شار سرعت ویسکوز در رویکردهای پیوسته یعنی جریان فشار بالا، به صورت معادله ۷ می‌باشد؛ که دیده می‌شود مستقل از جرم ذره‌ها بوده است. بنابراین در صورتی که دو جزء گازی با جرم متفاوت داشته باشیم؛ با توجه به برابری شار سرعت هر دو جزء، جداسازی شکل نخواهد گرفت. بنابراین داریم [۱۴، ۱۵]:

$$G_{vis} \propto \frac{(p''^2 - p'^2)}{\mu} \quad (7)$$

جریان گذرا

در ناحیه فشار متوسط، که در آن جریان دارای ویژگی‌های هر دو جریان مولکولی و گرانیو است، آزمایش‌های گزارش شده توسط *de Bethune* و *Present* نشان داده است که جریان ممکن است به عنوان یک ترکیب خطی از معادله‌های بالا باشد [۱۴، ۱۵]:

$$G \propto a \frac{p'' - p'}{\sqrt{m}} + b \frac{(p''^2 - p'^2)}{\mu} \quad (8)$$

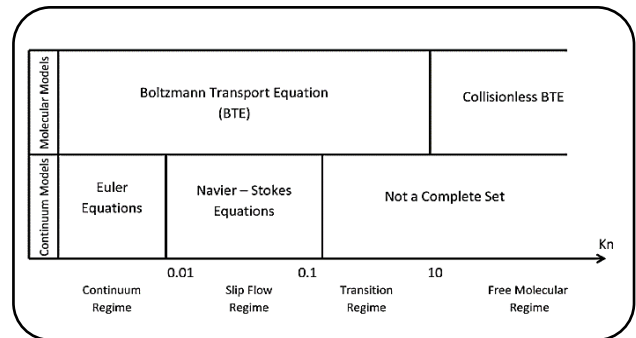
که a و b ضریب‌های مربوط به غشاء هستند. همان‌گونه که در معادله بالا دیده می‌شود؛ در این جریان نیز جداسازی به صورت جزئی صورت می‌گیرد. زیرا ترکیبی از دو جریان مولکولی و پیوسته می‌باشد.

فاکتور جداسازی ایده‌آل

توماس گراهام دانشمند اسکاتلندی در سال ۱۸۴۸ میلادی، معادله تجربی جداسازی گازها به روش نفوذ را کشف نمود. ماکسول نسبت فرکانس ورود مولکول‌های اجزاء گوناگون به درون روزنه‌های سوراخ‌دار در روش پنخس مولکولی را تعیین نمود و نشان داد این نسبت برابر با معکوس جذر جرم مولکولی ذره‌ها می‌باشد. بنابراین در صورتی که از دو جزء U^{235} و U^{238} برای جداسازی ایزوتوپی استفاده نماییم؛ این نسبت که همان فاکتور جداسازی ایده‌آل سامانه می‌باشد؛ برابر خواهد بود با [۲، ۱۶]:

$$\alpha_0 = \sqrt{\frac{M_{UF_6^{238}}}{M_{UF_6^{235}}}} = 1.00429 \quad (9)$$

باید توجه نمود که مقدار فوق، بیشینه مقدار برای فاکتور جداسازی است و در حالت واقعی فاکتور جداسازی این سامانه به مقدار ایده‌آل نخواهد رسید. به عبارت دیگر فاکتور جداسازی واقعی سامانه همواره



شکل ۳ - بازه رژیم‌های جریان بر حسب عدد نودسن

- ۱- حرکت ذره‌ها
 - ۲- شاخص دهی ذره‌ها
 - ۳- شبیه‌سازی برخورد
 - ۴- نمونه‌گیری از میدان جریان
- در شکل ۲ فلوچارت DSMC ارایه شده است [۱۲].

عدد نودسن^۱

عددی است بدون بعد؛ که نسبت مسافت میانگین پویس آزاد^۲ به طول مشخصه سامانه (کوچک‌ترین بعد در سامانه طراحی شده) می‌باشد که می‌تواند برای توصیف نوع جریان استفاده شود. این نسبت به عدد نودسن معروف است [۱۳]:

$$Kn = \frac{\lambda}{L} \quad (5)$$

که λ متوسط پویس آزاد پیموده شده ذره‌ها و L قطر مشخصه سامانه می‌باشد.

بازه رژیم‌های جریان و به طبع آن معادله‌های حاکم بر سامانه در شکل ۳ آمده است [۱۳].

جریان مولکولی و جریان پیوسته

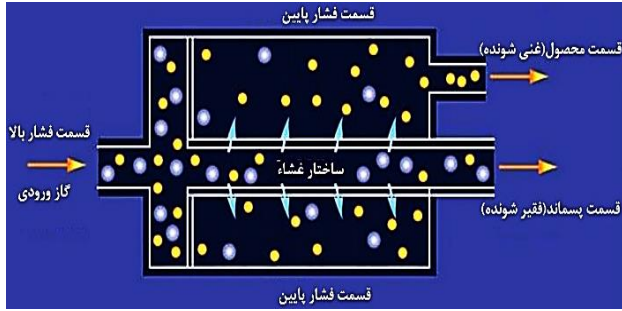
روزنه‌ها در یک غشاء، نه دایره‌ای و نه با قطر یکنواخت هستند؛ اما با توجه به ویژگی‌های جریان، شار مولار در جریان مولکولی یعنی جریان با فشار کم، به شکل زیر می‌باشد [۱۴، ۱۵]:

$$G_{mol} \propto \frac{p'' - p'}{\sqrt{m}} \quad (6)$$

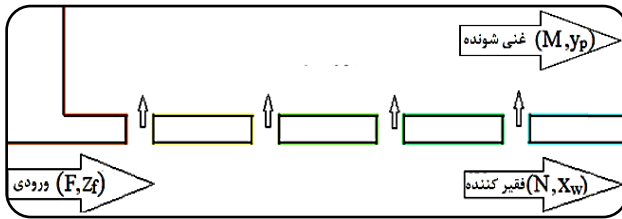
همان‌گونه که دیده می‌شود؛ شار سرعت مولار ذره‌ها متناسب با جرم ذره‌ها است. بنابراین در صورتی که دو جزء گازی در این نوع رژیم قرار گیرند؛ انتظار می‌رود شار سرعت ذره‌ها تفاوت داشته باشند

(۱) Knudsen number

(۲) Mean Free Path (MFP)



شکل ۶ - شمای سامانه پخش گازی



شکل ۷ - هندسه سامانه مورد بررسی

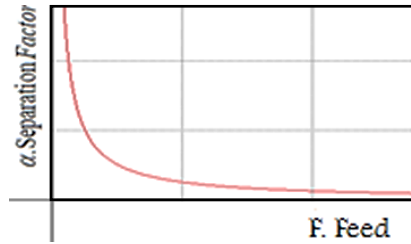
سامانه انتشار گازی

شمای یک سامانه انتشار گازی همانند شکل ۶ می‌باشد. همان‌گونه که دیده می‌شود؛ دو جزء گازی شکل با انرژی جنبشی برابر در راستای غشاء حرکت خواهند کرد. ذره‌های سبک‌تر به واسطه سرعت بیشتری که دارند با برخورد به ذره‌ها و دیواره‌ها بیش‌تر منحرف شده و در نتیجه زودتر از غشاء عبور خواهند کرد [۱۹]. قسمت بالا دست^۱ سامانه شامل قسمت ورودی گاز تا قسمت پسماند می‌باشد که به دلیل عبور کم‌تر ذره‌ها از درون غشاء، دارای فشار بیش‌تری بوده و قسمت پایین دست^۲ شامل قسمت فرآورده و یا همان قسمت کم فشار می‌باشد [۱۳، ۱۴].

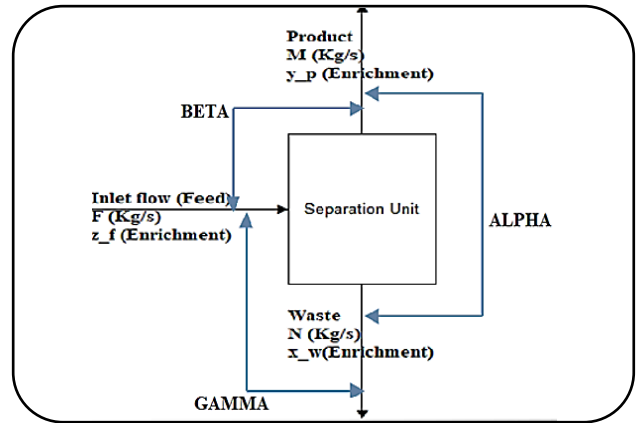
بخش تجربی

برای مدل‌سازی سامانه انتشار گازی، المانی از غشای مورد استفاده در سامانه طراحی شده و با توجه به شرایط مرزی و تعریف جریان، رفتار این سامانه بررسی شده است. با توجه به ساختار کلی سامانه پخش گازی در شکل ۶، المانی از سامانه پخش گازی به صورت شکل ۷ تعریف شد.

معادله‌های ریاضی حاکم بر سامانه پخش گازی، شامل دو قانون بقای جرم کلی و بقای جرم مخلوط می‌باشد. بدین صورت که در این سامانه مجموع شدت جریان‌های قسمت فرآورده و پسماند برابر با شدت جریان ورودی خواهد بود (بقای جرم کلی)؛ یعنی [۲، ۱۹]:



شکل ۴ - نمودار فاکتور جداسازی بر حسب خوراک ورودی



شکل ۵ - فاکتورهای جداسازی یک واحد جداسازی

کم‌تر از فاکتور جداسازی ایده‌آل می‌باشد. زیرا در حالت ایده‌آل، از بسیاری از پدیده‌های نامطلوب موجود برای جداسازی، نظیر فشار برگشتی و وجود جریان گذرا یا پیوسته صرف نظر شده است و جریان به‌طور کامل مولکولی در نظر گرفته می‌شود. بنابراین هرچه جریان موجود دور سامانه مولکولی‌تر باشد؛ یعنی عدد نودسن سامانه بالاتر باشد؛ فاکتور جداسازی بیش‌تر بوده و جداسازی بیش‌تری شکل خواهد گرفت [۱۷]. شکل ۴، نمودار تقریبی $kzvd$ فاکتور جداسازی بر حسب مقدار شدت جریان جریان ورودی، در سامانه پخش گازی می‌باشد [۱۸]. فاکتورهای جداسازی برای یک سامانه، همانند شکل ۵ تعریف می‌شود؛ که شامل فاکتور جداسازی کلی (α)، فاکتور جداسازی پسماند (γ) و فاکتور جداسازی فرآورده (β) می‌باشد [۱۸].

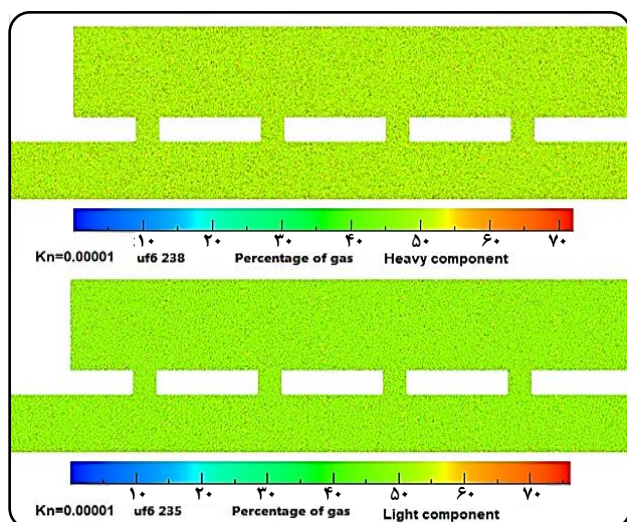
$$\alpha = \frac{y_p}{1-y_p} \frac{x_w}{1-x_w} \quad (10)$$

$$\beta = \frac{y_p}{1-y_p} \frac{z_f}{1-z_f} \quad (11)$$

$$\gamma = \frac{z_f}{1-z_f} \frac{x_w}{1-x_w} \quad (12)$$

(۱) Upstream flow

(۲) Downstream flow



شکل ۸ - رژیم جریان پیوسته با نودسن ۱۰۰۰۰۰۱

تجمع یافته است. همچنین جزء سنگین تر به دلیل جرم بیش تر، کم تر از روزنه ها عبور کرده و در قسمت پسماند تجمع یافته است. بنابراین در این قسمت، نتیجه های استنباط شده از مدل سازی، معادله های ۶ الی ۸ ارایه شده در پژوهش که مربوط به تأثیر نوع رژیم جریان بر شکل گیری و یا عدم شکل گیری جداسازی می باشد را پوشش داده است.

محاسبه فاکتور جداسازی سامانه برای جزء سبک (U^{235})

با مراجعه مجدد به شکل ۹، و با رسم سه خط جریان AB به عنوان خط جریان ورودی سامانه، CD به عنوان خط جریان قسمت پسماند و EF به عنوان خط جریان قسمت فرآورده (مطابق شکل ۱۰)، میانگین درصد تغنا مولی ذره های سبک و سنگین در این سه خط جریان محاسبه می شود.

جدول ۲ میانگین درصد تغنا مولی جزء سبک سامانه در سه بخش ورودی، پسماند و خروجی می باشد. تغناهای گزارش شده به صورت درصد تغنا مولی یا اتمی می باشند. همچنین با استفاده از معادله های ۱۰ تا ۱۲ ضریبها فاکتورهای جداسازی برای آلفا، بتا و گاما محاسبه شده است.

همان گونه که دیده می شود؛ مقدارهای فاکتورهای جداسازی به دست آمده از حالت های شبیه سازی شده، از مقدار فاکتور جداسازی ایده آل سامانه (معادله ۹) کم تر می باشد. همچنین با افزایش عدد نودسن از عدد نودسن ۰/۱ به ۰/۸، که معیاری از تغییر رژیم جریان از ناحیه رژیم جریان گذرا به رژیم جریان مولکولی است؛ دیده می شود که فاکتور جداسازی سامانه در حال افزایش می باشد که این افزایش به دلیل عدم وجود جریان های برگشتی و آشفته می باشد.

جدول ۱ - مشخصه های دو جزء ایزوتوپی استفاده شده

جزء گازی	جرم گاز (Kg)	قطر معادل (m)	جرم مولکولی (amu)
UF_6^{235}	$5/81 \times 10^{-25}$	$3/598 \times 10^{-9}$	۳۴۹
UF_6^{238}	$5/86 \times 10^{-25}$	$3/598 \times 10^{-9}$	۳۵۲

$$F = M + N \quad (13)$$

همچنین طبق قانون بقای جرم مخلوط، خواهیم داشت ($\theta = \frac{M}{F}$): [۱۹، ۲]

$$Fz_f = My_p + Nx_w \quad (14)$$

$$z_f = \theta y_p + (1 - \theta)x_w \quad (15)$$

همچنین شایان ذکر است که برای شبیه سازی از دو جزء ایزوتوپی گاز اورانیوم هگزافلوراید با کسر جرمی ۰/۵ برای هر یک از دو جزء در ورودی سامانه استفاده شده است که مشخصات آن در جدول ۱ آمده است. در شبیه سازی قطر معادل هر دو جزء گازی را برابر در نظر گرفته شد؛ زیرا یکم فاکتور جداسازی همان گونه که بیان شده تحت تأثیر اختلاف جرم ذره ها می باشد؛ دوم با تغییر قطر معادل دو جزء گازی عدد نودسن پیوسته دچار تغییر می شد.

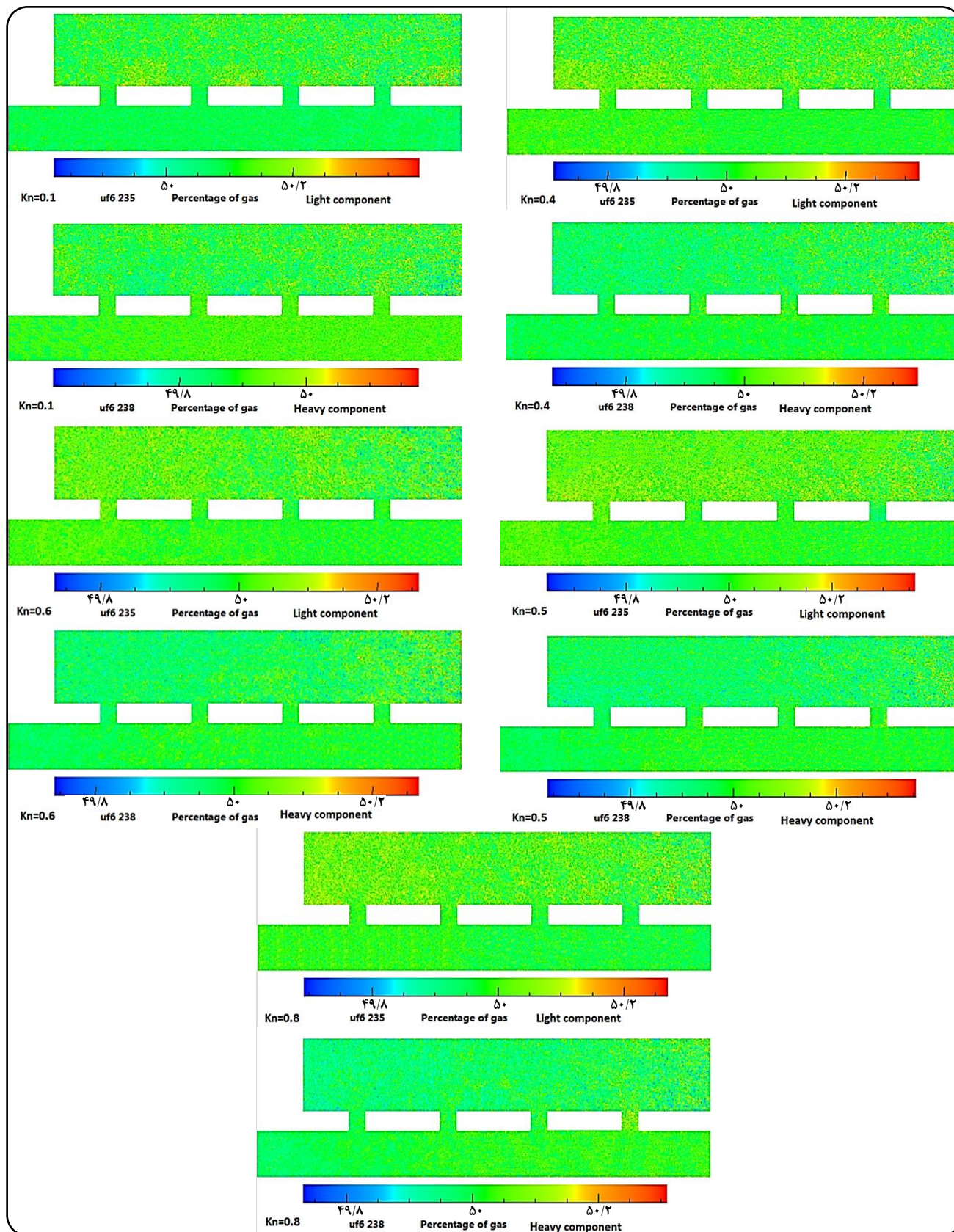
نتیجه ها و بحث

جداسازی گازی در سامانه با توجه به تغییر عدد نودسن و نوع رژیم جریان

با توجه به قانون نفوذ گراهام و معادله های (۶) و (۸)، انتظار می رود در رژیم جریان مولکولی و رژیم جریان گذرا، به دلیل وابستگی شار سرعت مولار ذره ها به جرم مولکولی هر یک از اجزاء، جداسازی ایزوتوپی شکل گیرد. ولی در طرف مقابل طبق معادله (۷)، برای رژیم جریان پیوسته به دلیل عدم وابستگی شار سرعت ویسکوز ذره ها به جرم مولکولی ذره ها، جداسازی شکل نگیرد. همان گونه که در شکل ۸ دیده می شود؛ برای عدد نودسن ۱۰۰۰۰۰۱ از بازه جریان پیوسته، تغنا در بخش های گوناگون سامانه تغییر نکرده و جداسازی انجام نشده است.

با توجه به شکل ۹، برای سه عدد نودسن ۰/۱ و ۰/۴ و ۰/۵ از بازه جریان گذرا، و دو عدد نودسن ۰/۶ و ۰/۸ از بازه جریان مولکولی، تغییرهای غنا در سامانه قابل دیدن است و جداسازی شکل گرفته است. همچنین دیده می شود با افزایش عدد نودسن تغییرهای غنا نسبت به حالت ورودی بیش تر می شود. به عبارت دیگر با افزایش عدد نودسن جداسازی موثرتری صورت می گیرد.

همان گونه که انتظار می رفت؛ جزء سبک تر به دلیل جرم کم تر با شدت و تعداد بیش تری از غشاء عبور نموده است و در قسمت فرآورده

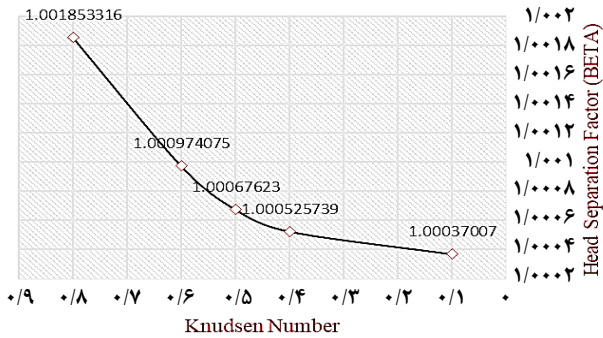


شکل ۹ - تغییرهای تغنا مولی در رژیم جریان مولکولی و گذرا

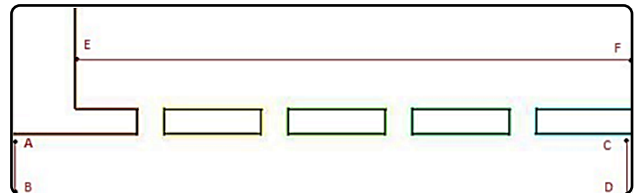
جدول ۲ - میانگین درصد تغنا مولی جزء سبک در قسمت‌های گوناگون سامانه و محاسبه ضریب‌های فاکتورهای جداسازی سامانه

ردیف	عدد نودسن	تغنا ورودی	تغنا تهی شونده	تغنا فرآورده	فاکتور جداسازی (Alpha)	فاکتور جداسازی (Beta)	فاکتور جداسازی (Gamma)
۱	۰/۱	۵۰/۰۹۴۵	۵۰/۰۸۰۴۱	۵۰/۱۰۵۷	۱/۰۰۱۰۱۲۵	۱/۰۰۰۳۷	۱/۰۰۰۶۴۱
۲	۰/۴	۵۰/۰۶۳۲	۵۰/۰۴۳۷۵	۵۰/۰۷۶۳۸	۱/۰۰۱۳۰۶	۱/۰۰۰۵۲۵	۱/۰۰۰۷۷۹
۳	۰/۵	۵۰/۰۵۴۳۱	۵۰/۰۳۲۳۴	۵۰/۰۷۱۲۱	۱/۰۰۱۵۵۶	۱/۰۰۰۶۷۶	۱/۰۰۰۸۷۸
۴	۰/۶	۵۰/۰۲۶۸۳	۵۰/۰۰۱۲	۵۰/۰۵۱۱۷	۱/۰۰۲	۱/۰۰۰۹۷۴	۱/۰۰۱۰۲۵
۵	۰/۸	۵۰/۰۱۱۸۳	۵۰/۰۹۷۴۸۳	۵۰/۰۵۸۱۲	۱/۰۰۳۳۳۳۷	۱/۰۰۱۸۵۳	۱/۰۰۱۴۸۱

Light Component of UF6

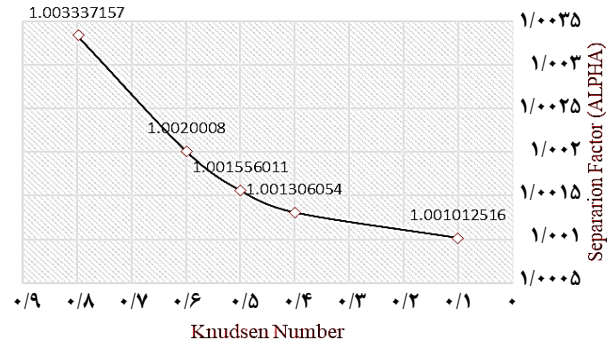


شکل ۱۲ - نمودار فاکتور جداسازی فرآورده (β) بر حسب عدد نودسن



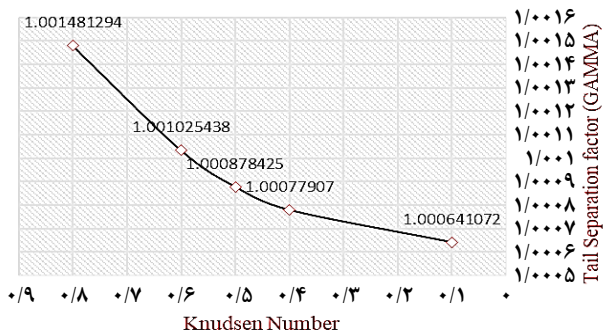
شکل ۱۰ - خط‌های جریان برای محاسبه تغنا میانگین

Light Component of UF6



شکل ۱۱ - نمودار فاکتور جداسازی کلی (α) بر حسب عدد نودسن

Light Component of UF6



شکل ۱۳ - نمودار فاکتور جداسازی پسماند (γ) بر حسب عدد نودسن

میانگین تغنا مولی جزء سنگین در قسمت‌های ورودی، پسماند و فرآورده

به طور مشابه از سه خط جریان مذکور در شکل ۱۰، تغنا مولی میانگین جزء سنگین را محاسبه می‌نماییم. بدیهی است که مجموع تغنا جزء سبک و سنگین در هر یک از خطوط جریان باید برابر با ۱۰۰ درصد شود. در جدول ۳ درصد تغنا مولی میانگین در این ۳ خط جریان گزارش شده است.

سرعت پخش ذره‌های سبک و سنگین هنگام عبور از روزنه‌ها

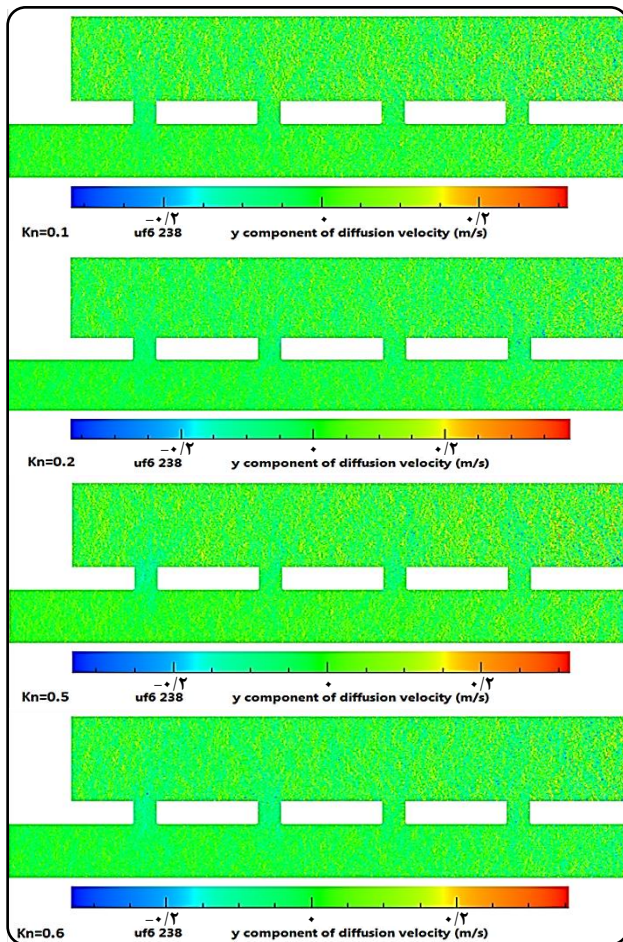
با مراجعه دوباره به شکل ۹، مشاهده می‌شود؛ با افزایش عدد نودسن، غنای جزء سبک در راستای y در حال افزایش است؛ یعنی

برای درک بهتر جدول ۲، نمودار فاکتورهای جداسازی به‌دست آمده از معادله‌های ۱۰، ۱۱ و ۱۲، بر حسب عدد نودسن در شکل ۱۱، ۱۲ و ۱۳ رسم شده است.

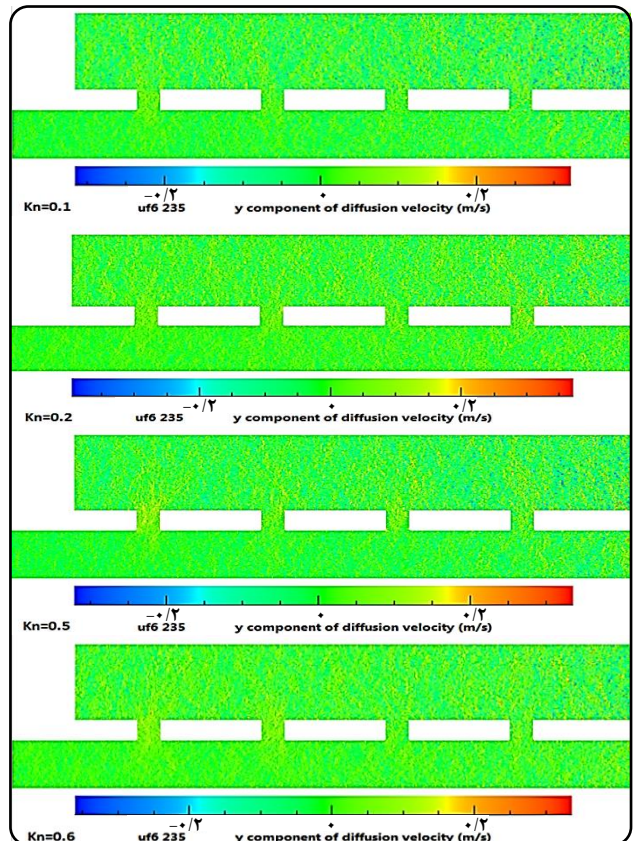
با توجه به شکل‌های ۱۱ تا ۱۳، دیده می‌شود با افزایش عدد نودسن، فاکتور جداسازی سامانه افزایش یافته است. افزایش عدد نودسن به معنای تغییر رژیم جریان از رژیم جریان پیوسته و گذرا به رژیم جریان مولکولی می‌باشد؛ که دیده می‌شود هر چه عدد نودسن افزایش یابد؛ فاکتور جداسازی سامانه نیز افزایش خواهد یافت. به عبارت دیگر هر چه رژیم جریان مولکولی‌تر باشد؛ فاکتور جداسازی بیش‌تر خواهد شد که با توجه به kzvd مسئله، مهم‌ترین دلیل این امر وجود برخی جریان‌های بازگشتی و آشفتنه در رژیم جریان گذرا و پیوسته می‌باشد. همچنین با مقایسه نتیجه‌های به‌دست آمده با شکل ۴ که نمودار فاکتور جداسازی بر حسب عدد نودسن در حالت kzvd است؛ دیده می‌شود که حالت کلی نمودار مربوطه حفظ شده است.

جدول ۳ - درصد تغنا مولی میانگین جزء سنگین در سه خط جریان مذکور

ردیف	تغنا فرآورده	تغنا تهی شونده	تغنا ورودی	عدد نودسن
۱	۴۹/۸۹۴۳	۴۹/۹۱۹۵۹	۴۹/۹۰۳۵۵	۰/۱
۲	۴۹/۹۲۳۶۲	۴۹/۹۵۶۲۵	۴۹/۹۳۶۷۶	۰/۴
۳	۴۹/۹۲۸۷۹	۴۹/۹۶۷۶۶	۴۹/۹۴۵۶۹	۰/۵
۴	۴۹/۹۴۸۸۳	۴۹/۹۹۸۸	۴۹/۹۷۳۱۷	۰/۶
۵	۴۹/۹۴۱۸۸	۵۰/۰۲۵۱۷	۴۹/۹۸۸۱۷	۰/۸



شکل ۱۵ - سرعت پخش جزء سنگین گاز اورانیوم هگزافلوراید



شکل ۱۴ - سرعت پخش جزء سبک گاز اورانیوم هگزافلوراید

نتیجه گیری

در این مطالعه به بررسی تأثیر نوع رژیم جریان بر شکل گیری جداسازی و تأثیر عدد نودسن بر فاکتور جداسازی اعداد نودسن گوناگون و سرانجام سرعت پخش هر یک از اجزاء گازی در داخل روزنه های غشاء پرداخته شد. نخست یک المان از سامانه پخش گازی مدل سازی شده است و سپس با استفاده از کد DS2V که توسط G.A. BIRD'S توسعه داده شده است و برای شبیه سازی جریان های کم فشار و گازهای رقیق (جریان گذرا و مولکولی) مورد استفاده قرار می گیرد؛ عملکرد یک سامانه انتشار گازی در حالت های اعداد نودسن گوناگون بررسی و تحلیل شده است. ابتدا با توجه به شکل ۸، نشان داده شده که در رژیم جریان پیوسته جداسازی شکل نخواهد گرفت و سپس در شکل ۹ برای دو رژیم جریان مولکولی و گذرا جداسازی انجام شده است. بنابراین می توان گفت که در طراحی سامانه فوق، در نظر گرفتن نوع رژیم جریان از مهم ترین پارامترها در عملکرد صحیح سامانه می باشد. همچنین در جدول ۲ با محاسبه درصد تغنا مولی بخش

طبق قانون نفوذ گراهام، جزء سبک با نسبت و سرعت بیش تری از غشاء عبور خواهد کرد و در قسمت کم فشار سامانه تجمع خواهد نمود. بنابراین انتظار می رود سرعت پخش (متناسب با G شار سرعت جریان در رژیم های گوناگون) در داخل روزنه ها برای ذره های جزء سبک در راستای y بیش تر از سرعت پخش جزء سنگین در درون روزنه ها در همین راستا باشد. زیرا در راستای y غنای جزء سبک در حال افزایش و غنای جزء سنگین در حال کاهش است. بنابراین با توجه به شکل های ۱۴ و ۱۵ دیده می شود در داخل روزنه ها مقدار سرعت پخش جزء سبک بیش تر از مقدار سرعت پخش جزء سنگین است.

m_i	Weight of component
v_i	Particle Speed
Σf_{ij}	Internal forces of particle
f_{ei}	External forces of system
G_{mol}	Molecular velocity flux
G_{vis}	Viscosity velocity flux
r	Capillary radius (m)
d	Capillary diameter (m)
l	Capillary length (m)
m	Molecular weight
R	Gas constant
T	Absolute temperature
α	Separation factor
P'	Downstream pressure
P	Total pressure
P''	Upstream pressure
μ	Viscosity of gas
λ	Mean free path
KB	Boltzmann constant
P_i	Potential of particles
F	Flow rate of Inlet gas
z_f	Enrichment of Inlet gas
M	Flow rate of product
y_p	Enrichment of product
N	Flow rate of waste
x_w	Enrichment of waste
θ	Cut of system
β	Head Separation factor
γ	Tail separation factor

ورودی، پسماند و فراورده به محاسبه فاکتورهای جداسازی سامانه پرداخته شد. نتیجه‌ها نشانگر آن است که با افزایش عدد نودسن و تغییر رژیم جریان از رژیم جریان گذرا به جریان مولکولی، فاکتور جداسازی سامانه که معیاری از جداسازی مؤثر سامانه می‌باشد؛ در حال افزایش است و مهم‌ترین دلیل آن عدم وجود جریان‌های بازگشتی و آشفتگی موجود در رژیم‌های جریان پیوسته و گذرا می‌باشد. همچنین در شکل‌های ۱۱، ۱۲ و ۱۳ نمودار فاکتورهای جداسازی بر حسب عدد نودسن رسم شده است. همان‌گونه که دیده می‌شود؛ با افزایش عدد نودسن و تغییر رژیم از رژیم جریان پیوسته به رژیم جریان گذرا و در نهایت رژیم جریان مولکولی، فاکتور جداسازی سامانه پیوسته افزایش یافته است که با شماتیک موجود در بخش kszvd (شکل ۴) سازگاری دارد. در نهایت در شکل ۱۴ و ۱۵، سرعت پخش دو جزء گازی بر حسب عدد نودسن نمایش داده شده است و دیده می‌شود که اولاً سرعت پخش ذره‌های سبکی که در داخل روزنه‌ها قرار دارند از سرعت پخش ذره‌های سنگین بیشتر است. ثانیاً با افزایش عدد نودسن سرعت پخش ذره‌های سبک داخل روزنه‌ها بیشتر خواهد شد و سرعت پخش ذره‌های سنگین با افزایش عدد نودسن کاهش بیشتری خواهد یافت. بدیهی است که سرعت پخش ذره‌ها در درون روزنه‌ها، همانند نظریه نفوذ گراهام معیاری از جداسازی مؤثر آن جزء می‌باشد.

نمادها

UF_6^{235}	Light component UF^{235}
UF_6^{238}	Heavy component UF^{238}

تاریخ دریافت: ۱۳۹۹/۰۲/۰۴ ؛ تاریخ پذیرش: ۱۳۹۹/۰۶/۳۱

مراجع

- [1] Mindess S., "Resistance of Concrete to Destructive Agencies", Lea's Chemistry of Cement and Concrete (Fifth Edition), 251-283, (2019).
- [2] Choppin G.R., Liljenzin J.-O., Rydberg J., "Nuclei, Isotopes and Isotope Separation", Radiochemistry and Nuclear Chemistry (Third Edition), 11-40 (2002).
- [3] Avery D.G., Davies E., Uranium Enrichment by Gas Centrifuge, Mills and Boon Ltd, (1973).
- [4] Krass A.S., Boskma P., Elzen B., Smit W.A., "Uranium Enrichment and Nuclear Weapon Proliferation", Routledge, Taylor & Francis Ltd, London and New York. (2020).
- [5] Zito P.F., Caravella A., Brunetti A., Drioli E., Barbieri G., Knudsen and Surface Diffusion Competing for Gas Permeation Inside Silicalite Membranes, *Journal of Membrane Science Volume*, **523**: 456-469 (2017).
- [6] Krishna R., The Maxwell–Stefan Description of Mixture Permeation Across Nanoporous Graphene Membranes, *Chemical Engineering Research and Design*, **133**: 316-325 (2018).

- [7] Zhang D., Wang H, Li C, Meng H, [Modeling of Purge-Gas Recovery using Membrane Separation](#), *Chemical Engineering Research and Design*, **125**: 361-366 (2017).
- [8] Darbandi M., Roohi E., [Study of Subsonic-Supersonic Gas flow through Micro/Nanoscale Nozzles using Unstructured DSMC Solver](#), *Microfluid. Nanofluid.*, **10(2)**: 321-335 (2011).
- [9] Veltzke, T., M. Baune, J. Thöming, [The Contribution of Diffusion to Gas Microflow: An Experimental Study](#), *Physics of Fluids*, **24(8)**: 082004 (2012).
- [10] Wang M., Li Z., [Simulations for Gas Flows in Microgeometries using the Direct Simulation Monte Carlo Method](#), *International Journal of Heat and Fluid Flow*, **25(6)**: 975-985 (2004).
- [11] Masir M.A., Aghaie M., Alahyarizadeh G.h., [Simulation of Separative Gaseous Molecular Flow through Porous Membrane with DSMC Method](#), *Progress in Nuclear Energy*, **118**: 103150 (2020).
- [12] Bird G.A., ["The DSMC Method"](#), CreateSpace Independent Publishing Platform, (2013).
- [13] Benedict M., ["Nuclear Chemical Engineering"](#), McCraw-Hill, (1957).
- [14] Villani, S., ["Uranium Enrichment"](#), Springer Berlin Heidelberg, (1979).
- [15] Ohta T., ["Direct Thermal Decomposition of Water"](#), *Solar-Hydrogen Energy Systems an Authoritative Review of Water-Splitting Systems by Solar Beam and Solar Heat: Hydrogen Production, Storage and Utilisation*, Elsevier, 59-79 (1979).
- [16] Seader J.D., Henley E.J., ["Separation Process Principles"](#), John Wiley & Sons, Inc (1998).
- [17] Ragheb, m., [isotope Separation and Enrichment](#), Chapter 10, (2018).
- [18] Hashemipour N., Karimi Sabet J., Motahari K., Mahruz Monfared S., Amini Y., Moosaviane M.A., [Numerical Study of N-Heptane/Benzene Separation by Thermal Diffusion Column](#), *Chinese Journal of Chemical Engineering*, **27(8)**: 1745-1755 (2018).
- [19] Wilks J., ["Uranium Conversion and Enrichment"](#), Nuclear Fuel Cycle Science and Engineering 1st Edition, Woodhead Publishing, 151-176 (2012).