فناوری و انرژی هسته ای

Journal home page: http://Nucte.sbu.ac.ir

فصلنامه فناوری و انرژی هسته ای، دوره اول، شماره ۲، تابستان ۱۴۰۱، ۵۳-۶۳

مطالعه اثر دمای دیواره بر میزان جداسازی پخش گازی با استفاده از روش مونت کارلو

مجید عابدی مصیر[1*]، مهدی آقائی مغانلو[1]، قاسم اله یاری زاده[1]

۱-دانشگاه شهید بهشتی، دانشکده مهندسی هسته ای ، تهران ، ایران

تاریخ دریافت: ۱۳۹۹/۰۳/۰۲
تاریخ پذیرش: ۱۴۰۰/۰۴/۰۴

چکیده

امروزه جداسازی به روش غشاء جایگاه مهم و کاربرد وسیعی در صنعت دارد. یکی از مهمترین روش‌ها جهت جداسازی گازی از یکدیگر، جداسازی به وسیله غشاء می‌باشد. مطالعات بر روی غشاء جدا از هندسه و قطر و ضخامت روزنه‌ها، می‌تواند بر روی جنس غشاء نیز صورت پذیرد. با توجه به اینکه در اعداد نادسن بالا به ازای ورودی خوراک مشخص، جداسازی بیشتر و موثرتری شکل خواهد گرفت، با انتخاب غشایی که قابلیت کارکرد در دماهای بالا را دارا می‌باشند، امکان افزایش جداسازی وجود خواهد داشت. بنابراین عموماً در صنایع جداسازی گازی به روش غشاء استفاده از غشاءهای سرامیکی که قابلیت کار در دمای بالا را دارند بهتر و بهینه‌تر خواهد بود. در این تحقیق، از دو گاز SF6 و VF6 به عنوان دو جزء سبک و سنگین با درصد جرمی یکسان جهت مدل‌سازی سیستم پخش گازی استفاده شده است. به دلیل اینکه اعداد نادسن سیستم تقریباً بالاست و رژیم جریان گذرا بر سیستم حاکم است از روش DSMC که روشی بر پایه معادلات بولتزمان و مونت کارلو می‌باشد؛ استفاده شده است. برای بررسی تاثیر دمای غشاء بر مقدار نهایی جداسازی این سیستم از چهار دمای ۳۱۰، ۳۵۰، ۴۵۰ و ۸۰۰ کلوین با شرایط و ورودی‌های برابر استفاده شده است تا تاثیرات افزایش دما بر عدد نادسن و در نهایت میزان جداسازی مورد ارزیابی قرار گیرد. نتایج حاکی از آن است که با افزایش دما، تغییرات غناء پسماند و محصول نسبت به گاز ورودی بیشتر خواهد بود و عملاً جداسازی موثرتری در دماهای بالا صورت خواهد گرفت. به طور مثال در دمای ۳۱۰ کلوین مقدار میانگین درصد غنای مولی جزء سبک در ورودی برابر با ۵۰.۲۳ خواهد بود و در قسمت پسماند این مقدار به ۴۹.۹۶۵ خواهد رسید. همچنین مقادیر فوق برای دمای ۳۵۰ کلوین به ترتیب ۵۰.۲۵۵ و ۴۹.۹۵۵ و برای دمای ۴۵۰ کلوین در ورودی ۵۰.۲۶۰ و در پسماند ۴۹.۹۴۰ و درنهایت برای دمای ۸۰۰ کلوین در ورودی برابر با ۵۰.۲۶۲ و در پسماند ۴۹.۹۱ خواهد شد. لذا در صنایع استفاده از غشاء های سرامیکی و عموماً غشاءهایی که قابلیت کار در دماهای بالا را دارند نسبت به سایر غشاءها به صرفه‌تر خواهد بود و با طی آبشار و مراحل کمتری به غناء نهایی خواهد رسید که این امر باعث می‌شود تا هزینه راه اندازی کاهش یابد.

واژه های کلیدی: غشاء، شبیه‌سازی مستقیم به روش مونت‌کارلو (DSMC method)، سیستم پخش گازی، عدد نادسن.

۱- مقدمه

در پروژه منهتن دو فرآیند نفوذ گرمایی و نفوذ گازی برای جداسازی ایزوتوپ سبک‌تر اورانیوم (U_{235}) مورد بررسی قرار گرفت. «کلوسیوس»[1] و «دیکل»[2] در سال ۱۹۳۸ خاطرنشان کردند که گرادیان دمایی مورد نیاز برای ایجاد نفوذ گرمایی می‌تولند برای تولید جریان همرفتی در گاز هم بکار رود و بنابراین منجر به افزایش

* Corresponding Author E-mail: M_aghaie@sbu.ac.ir

فرآیند جداسازی گردد (Benedict, M.،1981؛ 2011 ، Enrico drioli, G.B). فرآیند نفوذ گازی بر اساس پدیده نفوذ مولکولی می‌باشد که در سال ۱۸۴۶ توسط «گراهام»[۳] تبیین شد. فرآیند متکی به این اصل است که در یک مخلوط گازی در حال تعادل گرمایی مولکول‌های سبک‌تر بیشتر از مولکول‌های سنگین‌تر به دیواره‌های محفظه خود برخورد می‌کنند(Benedict, M.،1981؛ 1993 ، F. C. Kornegay).

حال چنانچه دیواره‌ها دارای روزنه‌های کوچکی باشند در این صورت مولکول‌های کوچکتر خیلی راحت‌تر از مولکول‌های سنگین‌تر از دیواره عبور می‌کنند و درنتیجه گاز خروجی از محفظه از مولکول‌های سبک‌تر غنی خواهد شد. مطالعه بر روی فرآیند نفوذ گازی ابتدا در بریتانیا شروع شد و سپس در پروژه منهتن توسعه یافت بطوری که این فرآیند، اولین فرآیند صنعتی مهم در زمینه جداسازی ایزوتوپ‌های اورانیوم گردید. از زمان جنگ تاکنون با ساخت واحدهایی در آمریکا، بریتانیا، فرانسه، روسیه و چین فناوری نفوذ گازی هگزافلورایـد اورانیوم به شکل قابل توجهی پیشرفت نموده است. شرط توسعه در این زمینه خاص، مستلزم ساخت غشایی متخلخل با سوراخ‌هایی ریز و همچنین ساخت کمپرسورهایی با راندمان بالا با آب بندهای ویژه بین گاز و اتمسفر می‌باشد(F. C. ،1993؛ Kornegay, M. ، 2011؛ Enrico drioli, G.B).

از نمونه مطالعاتی که تا به حال بر روی غشاء و روش DSMC صورت گرفته است؛ می‌توان به موارد زیر اشاره کرد. مروری بر غشاء و بررسی انواع فرایندهای جداسازی غشائی که فرایند های مثل میکروفیلتراسیون، اولترافیلتراسیون، نانوفیلتراسیون، اسمز معکوس، الکترودیالیز و چندین فرایند دیگر پرداختند (قنواتی نسب، ۱۳۹۵). همچنین مطالعه و بررسی عملکرد غشاهای توسعه یافته بر پایه پلی سولفون در فرایند جداسازی هوا که به بررسی روند طراحی، ساخت و توسعه غشاهای بر پایه پلی سولفون به منظور استفاده در فرایند جداسازی هوا پرداخته اند (شفیعی، ۱۳۹۴)؛ کریشنا ، در سال ۲۰۱۸ از معادلات ماکسول-استیفن برای مدل نفوذ سطحی غشاء گرافن استفاده کرده و شبیه سازی اثرات همبستگی را با استفاده از نظریه شبه شیمیایی و شبیه سازی سینتیک مونت کارلو محاسبه نمود؛ (Rajamani Krishna, 2018) و در سال ۲۰۱۷، زیتو و همکاران به بررسی اثر مخلوط گازها در غشاء سیلیکات پرداختند و نشان داند که سطح نفوذ و سرعت انتشار به شدت نفوذ ذرات کمک خواهد کرد و باعث افزایش آن خواهند شد (Pasquale F.Zitoa,b *et al.*, 2017)؛ در سال ۲۰۱۰، دربندی و همکاران با بررسی اثرات فشار برگشتی بر DSMC بدون ساختار، نیروهای لزج را برای تعدادی از اعداد نادسن با محدوده گذرا را نشان دادند (Roohi and Darbandi ، 2010) و در نهایت Veltzke و همکاران یک رویکرد جدید برای مدل رژیم جریان لغزش و رژیم گذرا در یک میکرو کانال مخروطی ارائه داد (Veltzke *et al.* ،2012).

در این پژوهش، ابتدا به تئوری سیستم پخش گازی و رژیم جریان عبوری از غشاء پرداخته شده و سپس با توجه به مطالب اشاره شده، اثرات دما بر روی جداسازی توسط غشاء برای مقادیر ۳۱۰، ۳۵۰، ۴۵۰ و ۸۰۰ کلوین بررسی خواهد شد.

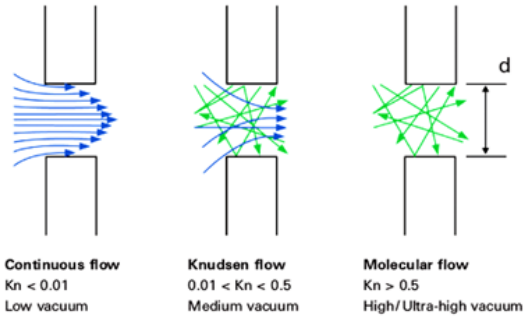
۲- عدد نادسن

نسبت میانگین پویش آزاد (MFP) به قطر کلنال جریان (در غشاء) می تواند برای توصیف انواع جریان استفاده شود. این نسبت به عدد نادسن معروف است:

$$Kn = \frac{\lambda}{l} \qquad (۱)$$

که λ میانگین پویش آزاد(MFP) و l طول مشخصه سیستم(کوچکترین بعد سیستم) می‌باشد. این عدد بی‌بعد بیانگر نوع رژیم جریان گاز می‌باشد.

محدوده نوع رژیم جریان بر حسب عدد نادسن در شکل ۱ نمایش داده شده است (Villani, S., 1979).



شکل ۱- پروفایل رژیم های جریان بر اساس عدد نادسن

۲-۱-میانگین پویش آزاد (**MFP**)

میانگین پویش آزاد، به عنوان میانگین فاصله ای که یک ذره در یک گاز قبل از برخورد با ذره دیگر طی می‌کند، تعریف می‌شود. راهی برای به دست آوردن میانگین پویش آزاد این است که آن را از طریق ویسکوزیته محاسبه کنید :

$$\lambda = \frac{\eta.\sqrt{\pi}}{2.p}.\sqrt{\frac{2k_B T}{m}} = \frac{\eta.\pi}{4.p}.\bar{v} \qquad (۲)$$

همانطور که در رابطه بالا ملاحظه می‌گردد، با افزایش دما، میانگین پویش آزاد سیستم افزایش خواهد یافت. بنابراین هرچه دما بیشتر باشد؛ عدد نادسن افزایش یافته و رژیم جریان مولکولی‌تر خواهد بود (Sooraj K. Prabha et al., 2013).

۲-۲-جریان مولکولی در خلاء بالا و خلاء فوق العاده بالا

در عدد نادسن های Kn> 0.5 تعامل مولکولی عملا دیگر اتفاق نمی افتد. آنچه غالب است جریان مولکولی است. در این حالت، میانگین پویش آزاد به طور قابل توجهی بیشتر از قطر کانال جریان است. نرخ سرعت مولکولی ذرات[۴] از رابطه ۳ محاسبه می‌گردد:

$$G_{mol} = \frac{8r(p'' - p')}{3l\sqrt{2\pi m R T}} \qquad (۳)$$

جاییکه G نرخ سرعت مولکولار و r شعاع روزنه و l طول روزنه و m جرم دو جزء گازی و R ثابت جهانی گاز و T دمای مطلق گازها و P" فشار جریان بالا دست و P' فشار جریان پایین دست می‌باشد. همانطور که ملاحظه می‌گردد؛ شار سرعت این رژیم به جرم ذرات وابسته می‌باشد.

۲-۳-جریان پیوسته در خلاء پایین و خلاء فوق العاده کم

فلاکس سرعت ذرات از رابطه ۴ و به وسیله قانون Poiseuille محاسبه می‌گردد:

$$G_{vis} = \frac{r^2(p''^2 - p'^2)}{16 l \mu R T} \qquad (۴)$$

که در آن T دمای گاز بر حسب سانتیگراد و μ ویسکوزیته برای گاز سیال می‌باشد. همانطور که ملاحظه می‌گردد؛ شار سرعت این رژیم مستقل از جرم ذرات می‌باشد.

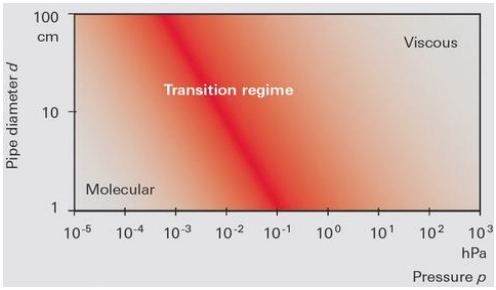
۲-۴-جریان نادسن(گذرا) در خلاء متوسط

اگر عدد نادسن بین ۰.۰۱ و ۰.۵ باشد، این جریان نادسن نامیده می شود. از آنجا که بسیاری از فشارهای فرایند در محدوده خلاء متوسط هستند، این نوع جریان با فرکانس متناظر اتفاق می افتد. در این نوع جریان که عموما عدد نادسن بین ۰.۰۱ تا ۰.۵ می‌باشد؛ ترکیبی از دو جریان مولکولی و جریان پیوسته بر سیستم حاکم خواهد بود:

$$G_{Knudsen\ flow} = a G_{mol} + b G_{vis} \qquad (۵)$$

که a و b توابعی از جریان نادسن هستند که وابسته به هندسه‌ی غشاء و جریان موجود حول آن می‌باشد. بنابراین طبق پیش بینی‌ها، انتظار می‌رود در این نوع جریان نیز جداسازی انجام گیرد(Villani, S., 1979).

نمودار زیر نشان دهنده محدوده رژیم‌های مختلف بر اساس فشار و قطر(طول مشخصه) می‌باشد.



شکل ۲- محدوده جریان بر اساس طول مشخصه سیستم و فشار حاکم

در نمودار بالا، قطر لوله همان طول مشخصه سیستم می‌باشد. همانطور که ملاحظه می‌گردد با تغییر فشار، بازه نوع رژیم جریان نیز دچار تغییرات خطی خواهد شد. این نمودار به وضوح طبقه بندی را نشان می دهد، همچنین در جدول زیر نیز نوع رژیم‌های جریان بر اساس برخی پارامترها نشان داده شده است، که به دلیل ساده سازی، غیر قابل قبول است. از آنجا که این طبقه بندی هنوز هم در استفاده مشترک است، با این حال، در اینجا ذکر شده است.

جدول ۱- مقایسه عددی فشار و ابعادی سیستم ها بر حسب نوع جریان

	جریان ویسکوز (پیوسته)	جریان گذرا	جریان مولکولی
فشار نسبی [hpa]	$1...10^{+3}$	$10^{-3}...1$	$10^{-3}<...<10^{-7}$
فشار نسبی [pa]	$10^{+5}...10^{+2}$	$10^{+2}...10^{-1}$	$10^{-1}<...<10^{-5}$
عدد نادسن	Kn<0.01	0.01<Kn<0.5	Kn>0.5
p.d*[hpa.cm]	p.d>0.6	0.6<p.d<0.01	p.d<0.01

* حاصلضرب فشار در طول مشخصه سیستم می‌باشد.

۲-۵-شبیه سازی مستقیم به روش مونت کارلو

رفتار جریان در حالت میکروسکوپیک متفاوت از آن در حالت ماکروسکوپیک است. عدد نادسن (Kn) به عنوان معیاری برای درجه رقیق شدن گازها در داخل دستگاه ها و سیستم های میکرو الکترومکانیکی بوده و تعیین کننده رژیم جریان است. عدد نادسن بصورت نسبی از مسیر پویش آزاد مولکول ها و ابعاد مسئله به صورت $Kn=\lambda/L$ قابل تعریف است که L به خصوصیات ابعاد مسئله وابسته می باشد و λ میانگین مسیر پویش آزاد مولکول هاست. در یک گاز ایده آل که مولکول های آن به صورت کره صلب مدل می شوند، میانگین مسیر پویش آزاد مولکول ها به دمای T و فشار P مرتبط شده و نهایتا عدد نادسن را می توان به عدد Re و عدد ماخ جریان M و نسبت گرمای ویژه γ ، به صورت زیر مرتبط کرد.

$$Kn = \sqrt{\frac{\pi\gamma}{2}}\frac{M}{Re} \qquad (۱۲)$$

۲-۶-الگوریتم DSMC

بر اساس معادلات بولتزمن، الگوریتم DSMC شامل چهار فرآیند کلی است که عبارتند از[7]:

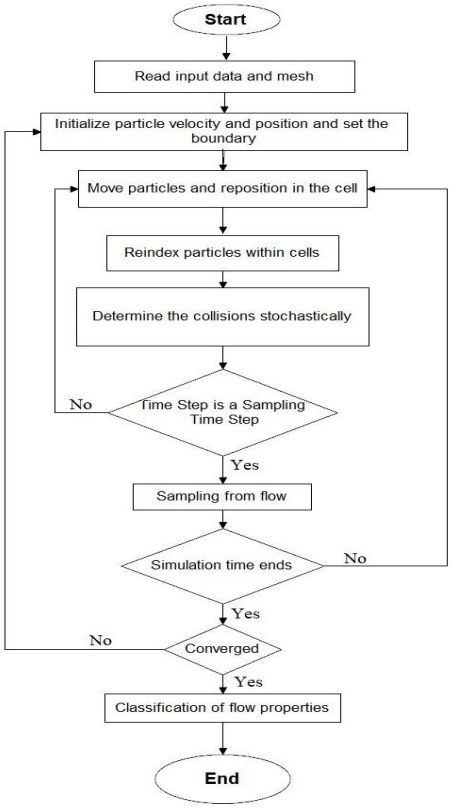
۱- حرکت ذرات

۲- شاخص ذرات

۳- شبیه سازی برخوردها

۴- نمونه گیری از میدان جریان

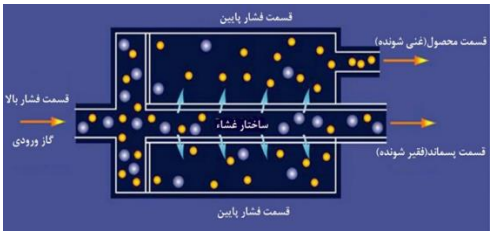
در شکل ۸ فلوچارت DSMC بر اساس روش بولتزمن ارائه شده است[7].



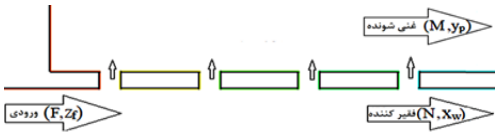
شکل ۳. الگوریتم روش DSMC

۳- مواد و روش کار

شکل۴ شماتیک واقعی سیستم پخش گازی را نمایش می‌دهد. در این پژوهش، یک المان بسیار کوچک از غشاء این سیستم در دو بعد که در شکل ۵ نمایش داده شده ؛ طراحی شده است. گفتنی است قسمت پرفشار سیستم، قسمت بالا دست و قسمت کم فشار سیستم، قسمت پایین دست می‌باشد.



شکل ۴- شماتیک سیستم پخش گازی در حالت واقعی



شکل ۵- المان طراحی شده برای شبیه سازی

با توجه به شکل ۵، دو معادله پایستگی جرم مخلوط و جرم کلی به صورت زیر می‌باشند(Crank J. ، 1975):

$$F = M + N \qquad (۶)$$

$$Fz_f = My_p + Nx_w \qquad (۷)$$

همچنین در همه حالات شبیه سازی شده مقدار طول مشخصه سیستم ثابت و برابر با 2 e-6 می‌باشد. به دلیل اینکه در سیستم انتشار گازی فاکتور جداسازی پایین است و جداسازی به صورت خیلی جزئی انجام می‌شود؛ لذا از دو جزء گازی غیر ایزوتوپی SF_6 به عنوان جزء سبک و VF_6 به عنوان جزء سنگین استفاده شده است تا تغییرات غناء قابل مشاهده باشد و در تمام حالات شبیه سازی شده، تعداد ذرات مشخصی را به عنوان ورودی به سیستم و با درصد جرمی ۵۰-۵۰ وارد شده است. بنابراین با محاسبه متوسط پویش آزاد سیستم توسط کد مورد نظر از رابطه ۲ و جایگذاری آن در رابطه ۱ اعداد نادسن برای چهار دمای مختلف ۳۱۰، ۳۵۰، ۴۵۰ و ۸۰۰ کلوین حساب نموده که در قالب جدول ۲ نشان داده شده است.

جدول ۲- عدد نادسن دماهای مختلف در یک طول مشخصه ثابت

دمای دیواره[k]	متوسط پویش آزاد ذرات	طول مشخصه سیستم	عدد نادسن
310	1.97E-7	2E-6	0.0985
350	2.03E-7	2E-6	0.1015
450	2.16E-7	2E-6	0.108
800	2.48E-7	2E-6	0.124

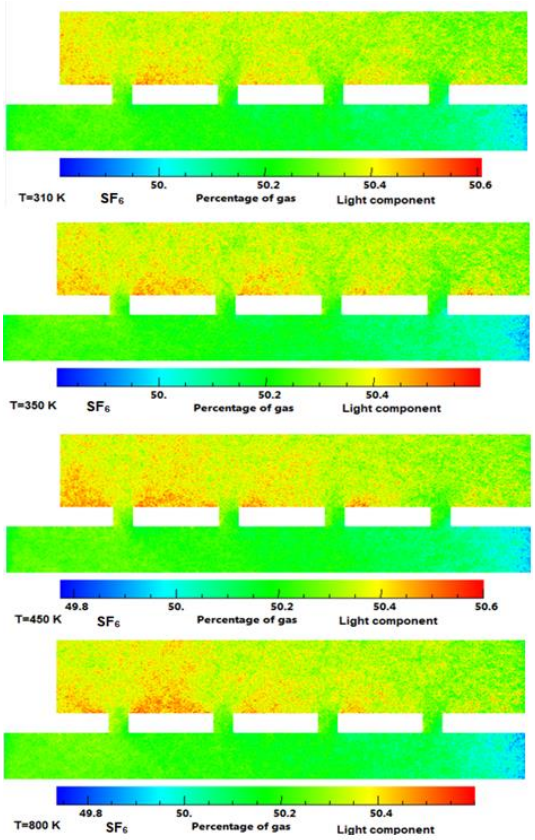
با توجه به مقدار عدد نادسن می‌توان گفت که جریان حاکم بر سیستم رژیم جریان گذرا که ترکیبی از رژیم جریان پیوسته و مولکولی است، خواهد بود. به طور معمول برای شبیه سازی سیستم‌هایی که رژیم جریان مولکولی بر سیستم حاکم است نمی‌توان از معادلات ناویر استوکس و اویلر استفاده نمود و باید از معادلات بولتزمان استفاده کرد. بنابراین در مطالعه سیستم فوق که جریان حاکم بر سیستم، رژیم گذرا می‌باشد؛ می‌توان از معادلات بولتزمان بدون برخورد استفاده نمود. بنابراین از روش DSMC که یک روش مبتنی بر تئوری ذرات می باشد که توسط برد در سال ۱۹۹۴ ارائه شده است؛ استفاده می‌نماییم. در دهه‌های گذشته روش DSMC تا حد زیادی در دینامیک جریان گاز های رقیق مورد استفاده قرار گرفت(Baker, ۲۰۰۴ R.W.,). در اوایل دهه هفتاد از این روش برای معادلات جریان گاز های رقیق در سطح مولکولی استفاده شد. این روش بدلیل عملکرد دقیق در Kn های بالا که نرخ برخورد های ذرات بسیار کم است، به سرعت توسط جامعه مهندسی هوا فضا مورد قبول واقع شد و امروزه در طیف وسیعی از مسائل فیزیک، شیمی و مهندسی استفاده می شود و با گذشت بیش از پنجاه سال از معرفی آن، هنوز بهترین روش عددی در شبیه سازی رفتار مولکولی گازهای رقیق و جریانات کم فشار است(Naylor, T.D. ، ۱۹۹۶ ؛ Basile, ،۲۰۱۱ A.A.G., F).

کد DS2V دارای یک حلگری متشکل از معادلات بولتزمان و تابع احتمالاتی مونت کارلو می‌باشد که توسط G.A. Bird's توسعه یافته است. این نرم‌افزار برای شبیه سازی سیستم‌ها با رژیم جریان مولکولی و جریان انتقالی گذرا در دو بعد بسیار پرکاربرد می‌باشد.

۴- نتایج و بحث

۷-۱-بررسی تاثیر دما غشاء بر تغییرات غناء در سیستم

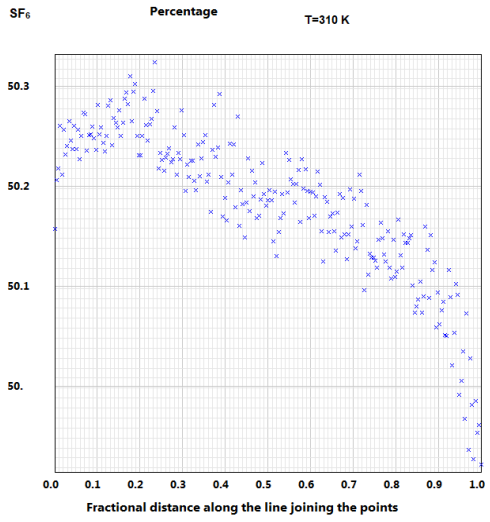
با توجه به قانون نفوذ مولکولی گراهام، انتظار می‌رفت ذرات سبک بیشتری در مجاورت قسمت پرفشار سیستم از روزنه غشاء عبور نموده و در قسمت کم فشار سیستم یا قسمت محصول تجمع نمایند و با افزایش دما غشاء عدد نادسن بیشتر شده و انتظار می‌رود همچنان نرخ عبور ذرات سبک از نرخ عبور ذرات سنگین بیشتر باشد. در شکل‌های ۶ نتایج حاصل از تاثیر دماهای مختلف، بر میزان تغییرات غنا جزء سبک در سیستم را نشان می‌دهند.

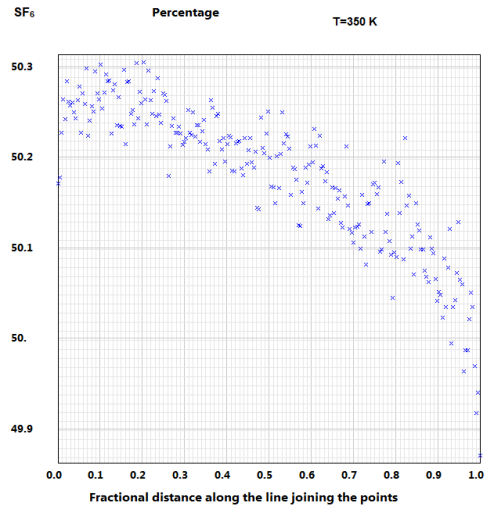


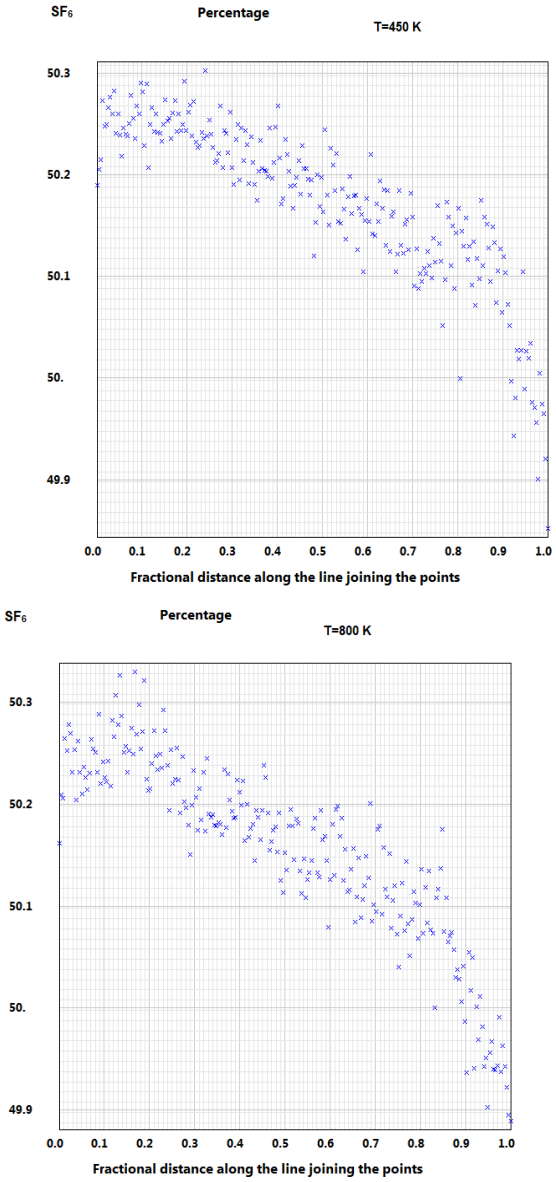
شکل ۶- تاثیر دما بر تغییرات غناء برای جزء سبک

با توجه به این نکته که با افزایش دما غشاء از ۳۱۰ کلوین تا ۸۰۰ کلوین، عدد نادسن از ۰.۰۹۸۵ به ۰.۱۲۴ تغییر پیدا خواهد کرد؛ یعنی عدد نادسن به میزان ۰.۰۲۵۵ تغییر خواهد نمود. لذا انتظار می‌رود تغییرات غناء زیاد نباشد که با تئوری مربوط به فاکتور جداسازی در سیستم دیفیوژن گازی همخوانی دارد. همانطور که در شکل ۶ به صورت گرافیکی قابل مشاهده است؛ تغییرات غناء با افزایش دما به صورت بسیار جزئی در حال افزایش است. برای مشاهده بهتر نرخ تغییرات غناء در سیستم خط جریانی از مرکز قسمت ورودی گاز تا مرکز قسمت پسماند رسم نموده و مقدار درصد اتمی ذرات در قالب نمودار در راستای طول ماشین جداسازی نشان خواهیم داد. بدیهی است؛ هرچه تغییرات غناء نهایی پسماند نسبت به ورودی بیشتر باشد؛ یا به عبارت دیگر شیب نمودار رسم شده بیشتر باشد، غناء محصول نیز با نرخ بیشتری نسبت به غناء ورودی تغییر خواهد نمود و فاکتور جداسازی بزرگتر خواهد بود. همانطور که در شکل ۷ قابل مشاهده است؛ با افزایش دما، شیب نمودار رسم شده بیشتر خواهد بود و غناء جزء سبک در پسماند از درصد اتمی کمتری برخوردار است؛ لذا طبق رابطه ۷، درصد اتمی این جزء در قسمت محصول بیشتر خواهد بود و به عبارتی جداسازی بیشتری در حالت دمای بیشتر اتفاق افتاده است.

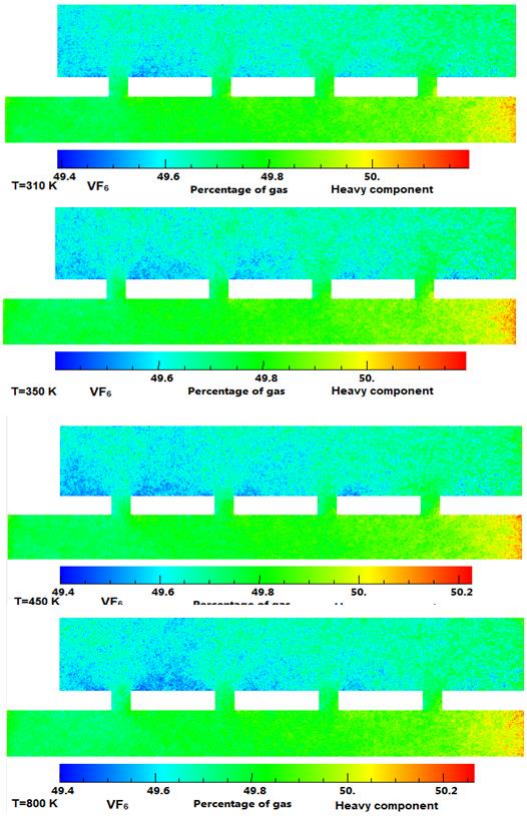
با توجه به شکل۷، برای دمای ۳۱۰ کلوین مقدار میانگین درصد غنای مولی جزء سبک در ورودی برابر با ۵۰.۲۳ خواهد بود و در قسمت پسماند این مقدار به ۴۹.۹۶۵ خواهد رسید. همچنین مقادیر فوق برای دمای ۳۵۰ کلوین به ترتیب ۵۰.۲۵۵ و ۴۹.۹۵۵ و برای دمای ۴۵۰ کلوین در ورودی ۵۰.۲۶۰ و در پسماند ۴۹.۹۴۰ و درنهایت برای دمای ۸۰۰ کلوین در ورودی برابر با ۵۰.۲۶۲ و در پسماند ۴۹.۹۱ خواهد شد. همچنین نتایج برای جزء سنگین و گاز VF_6 به صورت شکل ۸ می‌باشد.





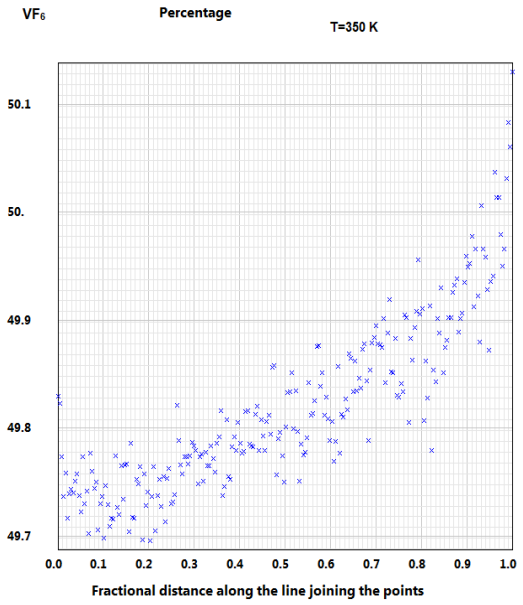


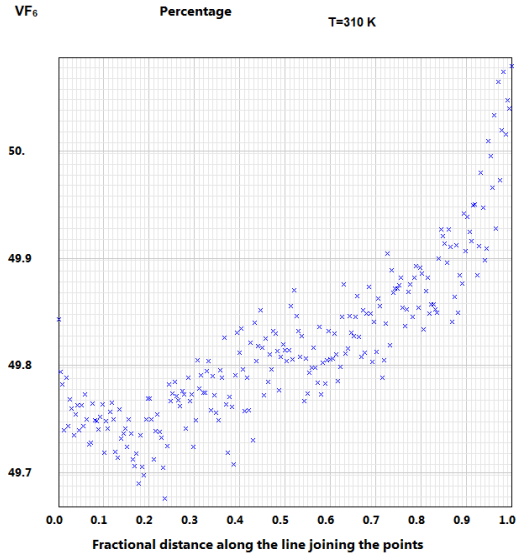
شکل ۷- اثر دماهای مختلف بر غنای جزء سبک در یک المان از سیستم پخش گازی

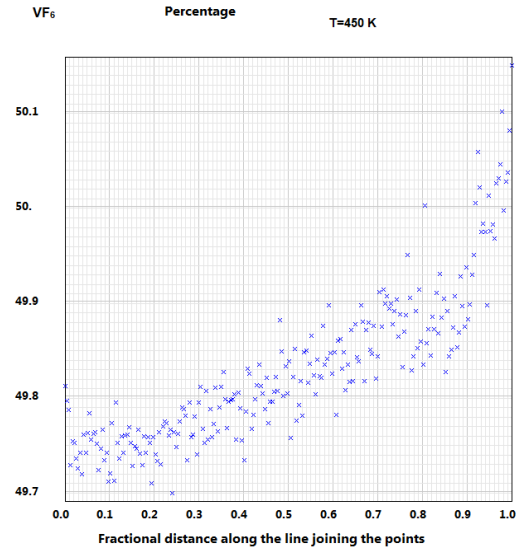


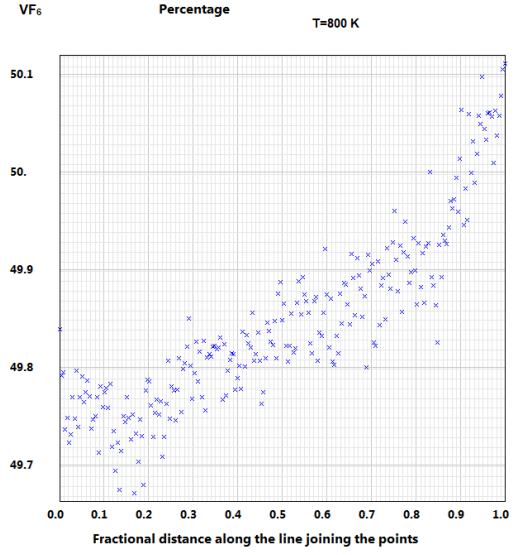
شکل ۸- تغییرات غناء جزء سنگین در قسمت های مختلف سیستم

به طور مشابه در خط جریان رسم شده از مرکز ورودی سیستم تا مرکز قسمت پسماند، نمودار تغییرات غناء را مجددا برای جزء سنگین در شکل ۹ نمایش می‌دهیم؛ که نتایج نشان خواهند داد با افزایش دما، شیب تغییرات غناء افزایش یافته و به عبارت دیگر جداسازی بیشتری با افزایش دما صورت خواهد گرفت.









شکل ۹- تغییرات غنا برای جزء سنگین در خط جریان بالا دست

با توجه به شکل ۶ ملاحظه می‌شود؛ به ازای غناء ورودی برابر در حالات مختلف، غناء جزء سبک در قسمت پسماند برای حالت ۸۰۰ کلوین کمترین مقدار را داراست؛ که طبیعتاً غناء همین جزء در قسمت محصول بیشترین مقدار خواهد بود. بنابراین با افزایش دما غشاء میزان تغییرات غناء نسبت به ورودی و به طبع آن فاکتور جداسازی سیستم افزایش یافته است. همچنین در شکل ۸، با افزایش دما غشاء میزان غناء در قسمت پسماند در حال افزایش است و برای دما ۸۰۰ کلوین مقدار غناء این جزء در قسمت پسماند بیشترین تغییر را نسبت به گاز ورودی خواهد داشت و به نوعی شیب خط در دمای ۸۰۰ کلوین از بقیه حالات بیشتر خواهد بود.

۵- نتیجه گیری

با توجه به اینکه در سیستم مطالعه شده، محدوده عدد نادسن بین ۰.۰۹۸۵ تا ۰.۱۲۴ می‌باشد؛ رژیم جریان در حالت گذراست و معادلات ناویر استوکس و اویلر به طور کامل بر سیستم حاکم نمی‌باشد و حتما باید از متد دینامیک مولکولی یا روش مونت کارلو در این پژوهش بهره گرفته شود. بنابراین از کد DS2V که برای حل معادله بولتزمن به روش DSMC می‌باشد؛ استفاده شده است. با توجه به شبیه سازی‌های صورت پذیرفته، مشاهده شده است که با افزایش دمای غشاء ،

میزان تغییرات غنای نهایی در قسمت محصول و پسماند نسبت به غناء گاز ورودی سیستم افزایش پیدا می‌کند؛ بنابراین فاکتور جداسازی سیستم افزایش می‌یابد. به عنوان مثال در دمای ۳۱۰ کلوین مقدار میانگین درصد غنای مولی جزء سبک در ورودی برابر با ۵۰.۲۳ خواهد بود و در قسمت پسماند این مقدار به ۴۹.۹۶۵ خواهد رسید. همچنین مقادیر فوق برای دمای ۳۵۰ کلوین به ترتیب ۵۰.۲۵۵ و ۴۹.۹۵۵ و برای دمای ۴۵۰ کلوین در ورودی ۵۰.۲۶۰ و در پسماند ۴۹.۹۴۰ و درنهایت برای دمای ۸۰۰ کلوین در ورودی برابر با ۵۰.۲۶۲ و در پسماند ۴۹.۹۱ خواهد شد. با توجه به این موضوع می‌توان نتیجه گرفت؛ استفاده از غشاء هایی که قابلیت کارکرد در دمای بالا را دارند نسبت به غشاء هایی که از کارکرد پایین دمایی برخوردار می‌باشند باعث خواهد شد که عدد نادسن سیستم و درنتیجه فاکتور جداسازی سیستم بالا رفته و در طول آبشار کوتاه تری به غنای مطلوب برسند که این امر از نظر صرفه اقتصادی بسیار مناسب و حائز اهمیت می‌باشد. بنابراین استفاده از غشاء های سرامیکی در مقابل غشاء های فلزی همچون استیل که قابلیت کارکرد در دمای پایین‌تری را دارند؛ از اهمیت اقتصادی بیشتری برخوردار خواهد بود.

پی نوشت ها

[1] Clusius
[2] dickel
[3] graham
[4] Molecular velocity Flux

مراجع

Baker, R.W., Membrane Technology and Applications. John Wiley & Sons, Chichester, Chapter 2, 2004. 2nd Edition.

Basile, A.A.G., F, Membranes for Membrane Reactors. John Wiley Publication, 2011. First Ed.

Benedict, M., Nuclear Chemical Engineering. Mccraw-Hill, Inc., 1981. Second Edition (ISBN 0-07-004531-3).

Crank, J., The Mathematicsof Diffusion. Clarendom Press, Oxford, 1975. Second Edition.

Darbandi. Masoud, Roohi Ehsan, 2010, Study of subsonic–supersonic gas flow through micro/nanoscale nozzles using unstructured DSMC solver, Microfluid Nanofluid, DOI 10.1007/s10404-010-0671.

Enrico drioli, g.b., membrane engineering for the treatment of gases. Royal society of chemistry, 2011. Volume 1: gas-separation problems with membranes (ISBN: 978-1-84973-171-3).

F. C. Kornegay, D.C.W., Paducah Gaseous Diffusion Plant Annual Site Environmental Report for 1993. Martin Marietta Energy Systems, Inc, 1994.

Naylor, T.D., Polymer Membranes. ", Rapra Technology Limited, 1996. Volume8, No.5,

Pasquale F.Zitoa,b, Alessio Caravellaa, Adele Brunettib, Enrico Driolia,b, Giuseppe Barbierib, February 2017, Knudsen and surface diffusion competing for gas permeation inside silicalite membranes, Journal of Membrane Science Volume 523, Pages 456-469.

Rajamani Krishna, 2018, The Maxwell–Stefan description of mixture permeation across nanoporous graphene membranes, Chemical Engineering Research and Design Volume 133, May 2018, Pages 316-325.

Sooraj K. Prabha, Sreehari P. D., Murali Gopal M., and Sarith P. Sathian, 2013, The effect of system boundaries on the mean free path for confined gases, Published by the AIP Publishing.

Veltzke, T., M. Baune, and J. Thöming, 2012, The contribution of diffusion to gas microflow: An experimental study. Physics of Fluids (1994-present). 24(8): p. 082004.

Villani, S., Uranium Enrichment. Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, 1979. ISBN 3-540-09385-0.

Nuclear Technology and Energy

Journal home page: http://Nucte.sbu.ac.ir

Nuclear Technology and Energy, Vol. 1, No. 2, Summer 2022, 53-63

Study of temperature effect of wall on gaseous diffusion separation using direct simulation Monte Carlo method (DSMC)

M. Abedi Masir*[1], M. Aghaie[1], Gh. Alahyarizadeh[1]

[1] Engineering Department, Shahid Beheshti University, Tehran, Iran

Received: 22 - 05 - 2020
Accepted:25 - 06 - 2021

Abstract

Today, membrane separation plays an important role in the industry and is widely used in various industries. One of the most important methods for separating gas components from each other is the gaseous diffusion membrane separation. Studies on the membrane, apart from the geometry and diameter and thickness of the capillaries, can be applied to the kind of membrane. Given the fact that the however the Knudsen number increase, the separation will have occurred more and effective. Therefore, selecting membranes that are capable of operating at high temperatures will increase the Knudsen number and, as a result, increase separation factor. Therefore, generally, in the gas separation industry by membrane method, the use of ceramic membranes that are capable of working at high temperatures is preferable to other membranes. In this paper, two SF6 and VF6 gases are used as two components with the same mass percentage for modeling the gas diffusion system. Due to the fact that the Knudsen number of system are relatively high and the transient flow regime dominates the system, the DSMC method, a method based on the Boltzmann and Monte Carlo equations, is used. In order to investigate the effect of the membrane temperature on the final value of the separation of this system, four temperatures of 310, 350, 450 and 800 K were used with equal conditions and inputs to evaluate the effects of temperature increase on the number of particles and, finally, the separation factor. In the results, it will be shown that with increasing temperature, changes in the enrichment of the waste and product will be higher variation than the input gas, and more efficient separation will be practically done at high temperatures. Therefore, in industries using ceramic membranes and generally membranes that are capable of working at high temperatures, it will be more cost effective than other membranes, and through the cascade and fewer steps it will reach the final richness, which will cause the setup cost Decrease.

Keywords: Porous membrane, Direct simulation Monte Carlo method, Gaseous Diffusion system.

*** Corresponding Author E-mail: M_aghaie@sbu.ac.ir**