فناوری و انرژی هسته ای

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

فصلنامه فناوری و انرژی هسته ای، دوره اول، شماره ۳، پاییز ۱۴۰۱، ۲۶-۳۵

مدلسازی و شبیه سازی رفتار گاز با روش DSMC و محاسبه پارامترهای جداسازی درون یک روتور سانتریفیوژ گازی

مسعود خواجه نوری*[۱]، سید جابر صفدری[۲]، علی نوروزی[۱]، صادق یوسفی نسب[۲]، محمد حسن ملاح[۲]

۱-شرکت فناوری های پیشرفته، سازمان انرژی اتمی، تهران، ایران

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

تاریخ دریافت: ۱۳۹۹/۱۱/۱۶

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۰/۲/۹

چکیده

رفتار گاز در ماشین سانتریفیوژ را می توان به دو قسمت مولکولی و پیوسته تقسیم کرد. محاسبه تابع مناسب جریان برای استفاده در ناحیه پیوسته یکی از اساسی ترین قسمت های مدل سازی رفتار گاز در یک سانتریفیوژ گازی است. معادله بولتزمن، معادله ای دقیق برای بررسی رفتار گاز در ناحیه مولکولی (ناحیه ورود خوراک) می باشد. یکی از روش های حل معادله بولتزمن، روش DSMC می باشد. تا کنون محققین زیادی چشمه های جرمی فرضی مختلفی را ارائه داده اند و چشمه جرمی مورد استفاده در معادله انساگر-پنکیک در ناحیه پیوسته یک چشمه فرضی بوده است. در این مقاله شکل رسیدن خوراک به ناحیه پیوسته و اثر گذاری آن در مرز دو ناحیه به صورت چشمه جرمی با روش مستقیم مونت کارلو محاسبه شده است. همچنین ضمن محاسبه تابع دقیق جرمی با روش DSMC و با جایگذاری آن در معادلات انساگر-پنکیک ناهمگن و حل این معادلات با روش تفاضل محدود، تابع جریان بدست آمده است. با جایگذاری این تابع جریان در معادلات نفوذ، پارامترهای جداسازی محاسبه شده است. تفاوت مقدار کار جداسازی با روش ترکیبی با مقدار مرجع، ۷/۹۷ درصد می باشد.

واژه های کلیدی: ناحیه مولکولی و پیوسته، چشمه جرمی، DSMC

۱. مقدمه

از ابتدای توسعه سانتریفیوژ، روش‌های جایگزینی مانند روش اونساگر برای حل معادلات حاکم بر جریان گاز درون لایه استوارتسون روتور ارائه شد و سپس با استفاده از معادله پیوستگی جرم و استفاده از روش تقریب میانگین شعاعی تغییرات غلظت در راستای محوری برای انواع ایزوتوپ‌های گازی توسط کهن حل گردید[۲-۱]. گانزبرگر و وود در سال ۱۹۸۲، با استفاده از روش المان محدود به حل تقریبی معادله اونساگر همگن پرداختند. این سانتریفیوژ شامل دو جریان ورودی و دو جریان خروجی در دو انتهای کپ ها و در خلاف جهت یکدیگر بود. حل معادلات انساگر همگن برای دو

* Corresponding Author E-mail: khajenoori1390@gmail.com

حالتی که گرادیان دمای خطی دیواره و محرک جریان محوری اعمال شود انجام گرفته است [۳]. گانزبرگر و همکارانش روش حل المان محدود را برای حل تقریبی معادله انساگر-پنکیک استفاده کردند[۳، ۴]. روش المان محدود در سال ۱۹۸۴ برای جریان تراکم پذیر چرخشی در یک سانتریفیوژ گازی با چشمه یا چاه داخلی و مومنتوم توسعه داده شده است[۵]. زینگ و وود در سال ۲۰۱۳ حل میدان جریان در حضور یک چشمه و چاه جرمی را با جزئیات توصیف و با روش تحلیلی معادله انساگر-پنکیک را حل نمودند[۶]. در سال ۲۰۱۴، کامران و همکاران، روش تحلیلی برای حل معادلات انساگر تعمیم یافته برای پتانسیل سرعت برای یک گاز تک جزئی به دست آوردند [۷]. در سال ۱۹۹۴، وود سه مدل خوراک گازی را به عنوان چشمه جرمی در یک سانتریفیوژ گازی معرفی کرد [۸]. در مدل اول خوراک (F1)، خوراک گازی به عنوان شار شعاعی جرم معرفی شد، در مدل دوم خوراک (F2)، به وسیله تابع دلتا دایرک (δ) و مدل سوم خوراک (F3) با F2 یکسان بود، به جز اینکه مولفه محوری چشمه سرعت برابر با سرعت محلی چرخش جسم صلب بود. برای هر سه مدل خوراک، موقعیت خوراک تقریبا در وسط محور بود و همچنین نشان داد که هر یک از این مدل‌ها مقادیر مشابهی را برای عملکرد جداسازی بهینه در مقدار خوراک یکسان ایجاد می‌کند، اما هر یک از توابع مربوطه (F1، F2 و F3) دارای خطوط جریان مخصوص به خود می باشند. این واقعیت موجب تمایز بین عملکرد جداسازی با توجه به نرخ خوراک برای هر مدل خوراک (F1، F2 و F3) شده است. بنابراین، محاسبه چشمه جرمی از اهمیت زیادی برخوردار است. همچنین مقایسه ای برای تاثیر خوراک بر عملکرد جداسازی با کار مشابه که توسط راتز، که از مدل بسیار ساده تر استفاده کرده بود شده است[۹-۸]. در حل روش های تحلیلی و عددی برای جریان خوراک، مقدار چشمه جرمی ($\mathcal{M}$) تقریبی می باشد. از آنجایی که چشمه جرمی ($\mathcal{M}$) از ناحیه رقیق وارد ناحیه پیوسته شده است، بنابراین، یک تحلیل صحیحی از چشمه جرمی وجود ندارد. یکی از روش‌های که در آن، یک چشمه جرمی دقیق را می‌توان بدست آورد، استفاده از تکنیک روش DSMC می‌باشد. در سال‌های اخیر روش DSMC بطور گسترده برای شبیه سازی جریان گاز رقیق استفاده شده است [۱۵-۱۰]. در سال ۲۰۱۱، پرادهان و همکارانش با استفاده از سیستم محاسبات موازی، روش DSMC را در یک سیلندر چرخشی برای محاسبه جریان ثانویه بکار بردند و نتایج را با مدل تحلیلی مقایسه کردند[۱۲]. بدیهی است، روش مورد استفاده پرادهان و همکارانش، هزینه محاسباتی بالا داشته است. در این مقاله ناحیه مولکولی به طور کامل با روش DSMC مدل سازی شده و نتایج آن (تابع دقیق چشمه جرمی یا M0) برای حل معادلات ناحیه پیوسته (معادلات انساگر-پنکیگ ناهمگن) مورد استفاده قرار گرفته است. همچنین با حل معادلات انساگر-پنکیک ناهمگن با روش تفاضل محدود خطوط جریان استفاده از تابع دقیق جرمی ترسیم شده است. با جایگذاری این تابع جریان در معادلات اولاندر، پارامترهای جداسازی محاسبه شده است.

۲. تئوری

۲-۱ تقسیم نواحی درون روتور با استفاده از عدد نادسن

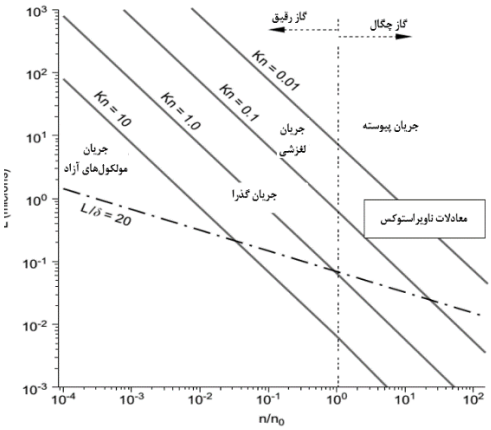
جریان‌ها با توجه به میزان رقیق بودن آن‌ها، به رژیم-های مختلفی تقسیم می‌گردند. میزان رقیق بودن جریان توسط عدد نادسن ارزیابی می‌شود. عدد نادسن عددی بدون بعد است که به صورت نسبت میانگین پویش آزاد به یک بعد مشخصه[1] سیستم تعریف می‌شود:

[1] Characteristic dimension

$$Kn = \frac{\lambda}{L} \qquad (۱)$$

$$\lambda = \frac{k_B T}{\sqrt{2}\,(\pi d^2) p}$$

که در این رابطه λ میانگین پویش آزاد می‌باشد و بُعد مشخصه سیستم (L) می‌تواند شعاع یک استوانه باشد. عدد نادسن به افتخار فیزیکدان دانمارکی مارتین نادسن، نام‌گذاری شده است. در شکل ۱ انواع رژیم‌های جریان با محدوده عدد نادسن مشخص شده است.



شکل ۱. تعیین محدوده عدد نادسن برای رژیم‌های مختلف جریان [۱۶]

مطابق با عدد نادسن، جریان‌ها می‌توانند به رژیم‌های زیر طبقه‌بندی گردند [۱۶]:

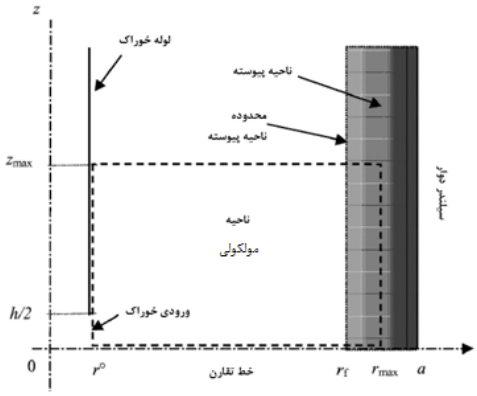
رژیم جریان پیوسته[۲] (Kn<0.01)

رژیم جریان لغزشی[۳] (0.01<Kn<0.1)

رژیم جریان گذار[۴] (0.1<Kn<10)

رژیم جریان کاملاً مولکولی[۵] (Kn>10)

هنگامی‌که گاز وارد روتور سانتریفیوژ می‌شود به علت نیروی گریز از مرکز بخش عمده‌ای از جریان نزدیک دیواره روتور قرار می‌گیرد و در قسمت میانی روتور تقریباً خلأ کاملا ایجاد می‌شود (شکل ۲). درون روتور سانتریفیوژ رژیم‌های مختلف جریان وجود دارد که هر رژیم با روش محاسباتی مناسب خود تحلیل می‌شود. برای مدلسازی جریان گاز درون روتور بر اساس عدد نادسن، دو ناحیه پیوسته و مولکولی در نظر گرفته می‌شود به طوریکه به طور تقریبی برای جریان‌های با اعداد نادسن کوچکتر از ۰/۰۵ محیط به صورت پیوسته و برای جریان‌های با اعداد نادسن بزرگتر از ۰/۰۵ محیط به صورت مولکولی در نظر گرفته می‌شود [۱۷].



شکل ۲. تصویری نمادین از ناحیه پیوسته و مولکولی داخل روتور سانتریفیوژ [۱۷]

در شکل ۲ شعاع روتور برابر با a در نظر گرفته شده است. به علت نیروی گریز از مرکز مقدار زیادی از گاز در کنار دیوار در فاصله شعاعی بین r_f و a قرار می‌گیرد که ناحیه پیوسته را تشکیل می‌دهد و ناحیه مولکولی بین شعاع r^0 و r_f ایجاد می‌شود. برای تعیین دو ناحیه پیوسته و مولکولی، یکی از مهمترین مسائل تعیین مرز بین این دو ناحیه می‌باشد. با توجه به تغییرات عدد نادسن، از عدد نادسن محلی برای تعیین مرز بین دو ناحیه استفاده می‌شود. برای این کار یک مرز تفکیک $Kn_{split} = 0.05$ انتخاب می‌شود که به عنوان یک مرز آستانه‌ای است که معادلات ناویراستوکس در این ناحیه قابل استفاده و معتبر می‌باشند.

۲-۲ روش DSMC برای محاسبه تابع چشمه جرمی

روش شبیه سازی مستقیم مونت کارلو اولین بار

[2] Continuum
[3] Slip
[4] Transitional
[5] Free molecular

توسط برد[۶] [۱۰] ارائه شد. در این روش برخورد بین مولکولی و حرکت مولکول‌ها در یک بازه زمانی از هم جدا شده بطوریکه این بازه زمانی باید کوچکتر از متوسط زمان برخورد مولکول‌ها باشد. سرعت، مختصات مکانی و انرژی درونی هر یک از مولکول‌ها در کامپیوتر ذخیره می‌شود و با حرکت مولکول‌ها در طی زمان عوض می‌شود. در این روش تعداد زیادی از مولکول‌های مدل به منظور شبیه سازی مولکول‌های واقعی بکار می‌روند که تعداد آن‌ها به مراتب کمتر از مولکول‌های واقعی است. بنابراین هر مولکول مدل، بیانگر تعداد زیادی از مولکول‌های واقعی است. در حالت واقعی مولکول‌ها در حال حرکت با هم برخورد می‌کنند ولی در روش DSMC این فرایند از هم جدا می‌شود یعنی ابتدا حرکت مولکول‌ها در نظر گرفته می‌شود و بعد برخورد آنها یعنی مولکول‌ها را ثابت فرض می‌کنیم و آنها را به هم برخورد می‌دهیم. در این مرحله جهت حرکت و اندازه سرعت مولکول ها (ذرات) عوض می‌شود. در روش DSMC دامنه محاسباتی به تعداد زیادی سلول[۷] و زیر سلول[۸] تقسیم می‌شود. برای انجام محاسبات برخورد در زیر سلول از روش NTC[۹] معرفی شده توسط برد استفاده شده است [۱۰]. احتمال برخورد بین دو مولکول شبیه سازی شده در یک بازه زمانی برابر است با:

$$P = F_n\, \sigma_T\, C_r\, \Delta t / V_c \qquad (۲)$$

F_n بیانگر تعداد مولکول‌های واقعی که توسط یک مولکول مدل جانشین شده است، V_c حجم سلول، σ_T سطح مقطع برخورد کل که تابعی از سرعت نسبی بین دو مولکول می‌باشد، C_r سرعت نسبی بین دو مولکول می‌باشد. حداکثر احتمال برخورد به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$P_{max} = F_n\, (\sigma_T\, C_r)_{max}\, \Delta t / V_c \qquad (۳)$$

nV_c بیانگر متوسط تعداد مولکول‌های واقعی در هر سلول است. بنابراین متوسط تعداد مولکول‌های شبیه سازی شده به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$N = nV_c / F_n$$

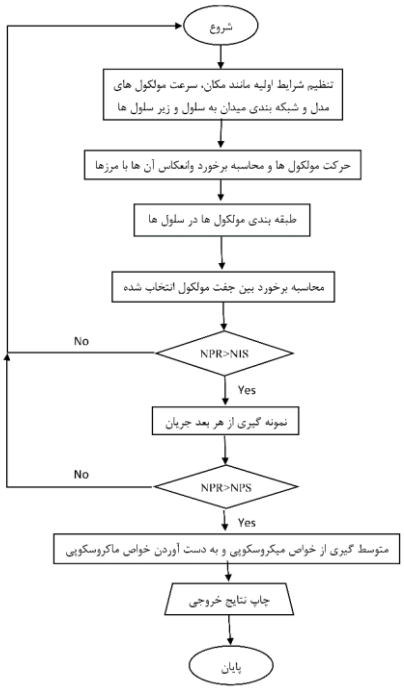
n چگالی عددی گاز واقعی می‌باشد. در روش DSMC تعداد حداکثر جفت‌های انتخاب شده در یک بازه زمانی برابر است با:

$$0.5\bar{N} N F_n (\sigma_T\, C_r)_{max}\, \Delta t / V_c \qquad (۴)$$

$\bar{N}$ بیانگر متوسط مقدار N می‌باشد. انتخاب جفت مولکول برخورد کننده با احتمال زیر صورت می‌گیرد:

$$\sigma_T\, C_r / (\sigma_T\, C_r)_{max} \qquad (۵)$$

از میان حداکثر جفت‌های ممکن تنها جفتی انتخاب می‌شود که نسبت بالا برای این جفت بزرگتر از عدد تصادفی R_f انتخاب شده باشد. شکل ۳ الگوریتم روش DSMC را نشان می‌دهد.



شکل ۳. الگوریتم روش DSMC

به طور کلی روش DSMC به مراحل زیر تقسیم می‌شود:

مقداردهی اولیه

شبکه بندی ناحیه محاسباتی

[6] G.A. Bird
[7] Cell
[8] Subcell
[9] Non time counter

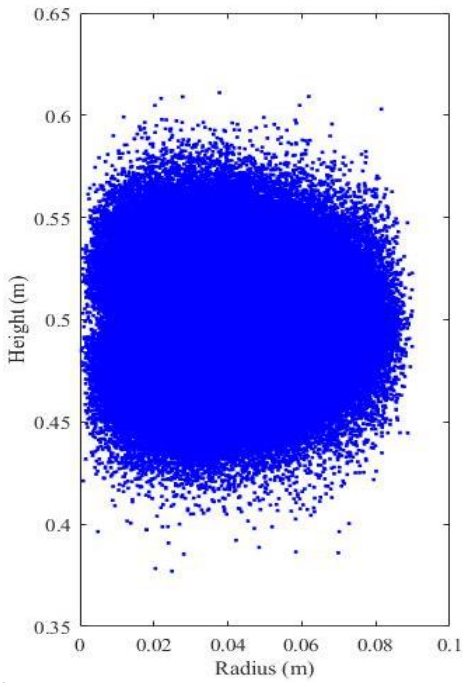
حرکت دادن ذرات و برخورد با سطح

برخورد ذرات با یکدیگر

نمونه‌گیری

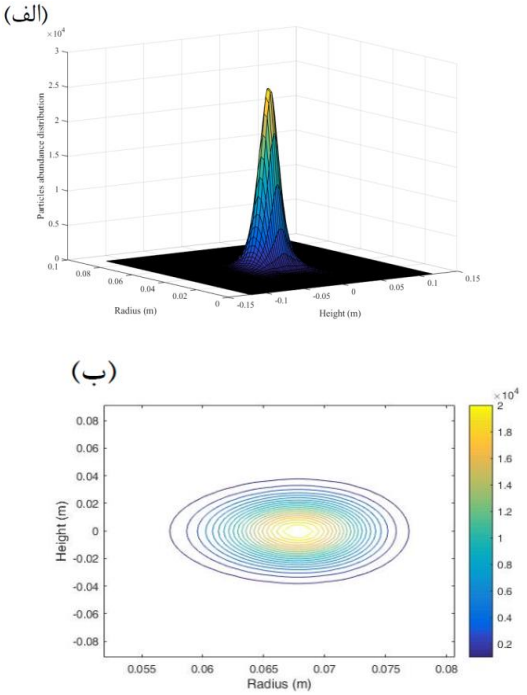
برگشت به قسمت سوم.

در واقعیت ذرات پس از وارد شدن در ناحیه رقیق پخش می‌شوند. ذرات در مرز دو ناحیه پس از برخورد به ناحیه پیوسته کسری از ذرات بر گشت داده می‌شوند و بخشی از ذرات وارد ناحیه پیوسته می‌شوند. این واقعیت در مرز دو ناحیه بعنوان شرط مرزی جدید در مرز دو ناحیه در نظر گرفته شده است. در شرط مرزی جدید بین دو ناحیه کسری از ذرات با عدد رندوم حذف می‌شوند و ذرات باقی مانده با شرط مرزی انتشار برگشت داده می‌شوند. عدد رندوم عددی بین صفر و یک است. اگر عدد رندوم نزدیک ۱ باشد در اینصورت ذرات از مرز خارج نمی‌شود و این عمل باعث افزایش دانسیته در مرز دو ناحیه می‌شود. اگر عدد رندوم نزدیک صفر باشد بیشتر ذرات از مرز خارج می‌شوند و در نتیجه دانسیته در مرز کاهش می‌یابد. در مرزهای بالا و پایین ناحیه جریان رقیق شرط برخورد انتشار در نظر گرفته شده است. برای محاسبه تابع دقیق جرمی در مرز دو ناحیه می بایست توزیع فراوانی ذرات در مرز دو ناحیه را محاسبه نمود. برای این منظور می بایست موقعیت ذرات بعد از خارج شدن از خوراک تا رسیدن به ناحیه پیوسته می‌بایست محاسبه شود. شکل ۴ موقعیت ذرات را پس از ۰/۳ میلی ثانیه پس وارد شدن در ناحیه رقیق را نشان می‌دهد.



شکل ۴. موقعیت ذرات پس از ۰/۳ میلی ثانیه در خوراک ورودی

ازآنجائیکه سرعت شعاعی جریان گاز در محور (ورود خوراک به ناحیه محاسباتی) در حدود ۱۵۰ m/s می‌باشد بنابراین زمان رسیدن به مرز دو ناحیه ۰/۳ میلی ثانیه می‌باشد. با داشتن موقعیت ذرات در مرز دو ناحیه توزیع فراوانی ذرات در شکل ۵-الف ترسیم شده است. همچنین با ایجاد برش‌های افقی از نمودار توزیع فراوانی و یکسان سازی تابع گوسینی می‌توان پارامترهای α_2، α_1 و S_0 را محاسبه نمود. شکل ۵-ب برش‌های افقی از این نمودار را نشان می‌دهد.



شکل ۵. (الف) توزیع فراوانی ذرات و (ب) برش‌های افقی از نمودار توزیع فراوانی ذرات

تابع جرمی محاسبه شده با روش DSMC به صورت تابع زیر حاصل شده است.

$$\mathcal{M}_0 = S_0 e^{\left(-\alpha_1((x-x_s)^2+\alpha_2(y-y_s)^2)\right)} \qquad (۶)$$

در این تابع مقدار ارتفاع قله را مقدار گازی که در واحد زمان وارد می شود مشخص می کند و مقدار S_0 برابر ۱۳/۸۱ است. xs و ys مختصات محل ورود Feed در نظر گرفته شده است. با جایگزاری تابع چشمه جرمی در معادله انساگر ناهمگن، رابطه نهایی به صورت زیر حاصل شده است.

$$(e^x(e^x\chi_{xx})_{xx})_{xx} + B^2\chi_{yy} = F(x,y)\,;\ \ 0 < x < x_T\ \ ,\ \ 0 < y < y_T \qquad (۷)$$

$$F(x,y) = -\frac{B^2\sqrt{\alpha_1\pi}\,s_0}{4\,A^4}(y - y_s)e^{\left(-\alpha_2(y-y_s)^2\right)}\Bigg[(x-x_s)E(x_T - x_s) - (x-x_s)E(x-x_s) + \frac{1}{\sqrt{\alpha_1\pi}}\Big[e^{\left(-\alpha_1((x_T-x_s)^2)\right)} - e^{\left(-\alpha_1((x-x_s)^2)\right)}\Big]\Bigg] \qquad (۸)$$

۳-۲ روش حل ناحیه پیوسته

معادله دیفرانسیل انساگر-پنکیک برای حل دو بعدی رفتار گاز در سانتریفیوژ گازی استفاده شده است. برای تحلیل ناحیه پیوسته در این مقاله، معادلات انساگر-پنکیک ناهمگن استفاده شده است[۱۸، ۳]. این معادلات بصورت زیر می‌باشد (برای جزئیات بیشتر به [۱۸] مراجعه شود).

$$(e^x(e^x\chi_{xx})_{xx})_{xx} + B^2\chi_{yy} = F(x,y)\,;\ \ 0 < x < x_T\ \ ,\ \ 0 < y < y_T \qquad (۹)$$

$$F(x,y) = -\frac{B^2}{4A^4}\int_x^{x_T}\int_\xi^{x_T}\mathcal{M}_y\,d\,\xi' d\xi. \qquad (۱۰)$$

که در آن $\mathcal{M}$ چشمه یا سینک جرمی، χ پتانسیل مستر، که رابطه آن با تابع جریان Ψ به صورت $\Psi = 2A^2\chi_x$ تعریف شده است; x اشاره به مقیاس شعاع دارد که با شعاع بی بعد شده $\eta = r/a$ به وسیله $A^2(1-\eta^2)$ مرتبط شده است. مختصات بی‌بعد شده محور y به صورت تابعی از شعاع سانتریفیوژ (a) تعریف شده است. اعداد بی بعد شده در معادله به صورت $B = Re\,S^{\frac{1}{2}}/4A^6, A^2 = (a\,\Omega)^2/2RT_0$ ، $S = Re = ،1 + Pr\,A2\,(\gamma - 1)/2\gamma$ $\rho_w\Omega a^2/\mu$ و $Pr = c_p\mu/k$ تعریف شده است. در اینجا ρ_w دانسیته گاز در دیواره روتور، T_0 دمای میانگین گاز، R ثابت جهانی گازها، Ω سرعت چرخش روتور و μ، c_p، γ به ترتیب ویسکوزیته گاز، ظرفیت حرارتی در فشار

ثابت و نسبت ظرفیت حرارتی در فشار ثابت به گرمای ویژه در حجم ثابت می باشد. در این مقاله تابع دقیق چشمه جرمی در مرز دو ناحیه پیوسته و مولکولی با روش DSMC محاسبه شده است. با جایگذاری تابع دقیق جرمی و محاسبه $F(x, y)$ و حل معادلات انساگر-پنکیک ناهمگن با روش تفاضل محدود و محاسبه شار جرمی، تابع جریان $F(r, z)$محاسبه شده است.

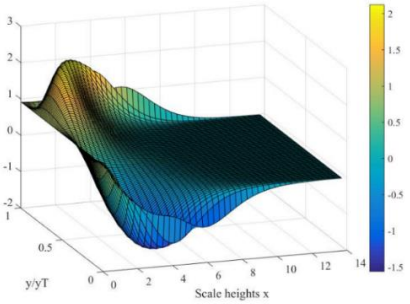
۳. نتایج

در این مقاله از مشخصات سانتریفیوژ مورد استفاده در مقالات مختلف که در جدول زیر ارائه شده استفاده شده است [۸، ۳].

جدول ۱. مشخصات سانتریفیوژ فرضی

کمیت	مقدار
طول	۳/۳۹۳ متر
شعاع	۹/۱۴۵ سانتی‌متر
سرعت خطی روتور	۷۰۰ متر بر ثانیه
دبی خوراک	۱۰۰ گرم بر ساعت
برش	۰/۴
فشار دیواره	۱۰۰ تور
دمای متوسط	۳۰۰ کلوین

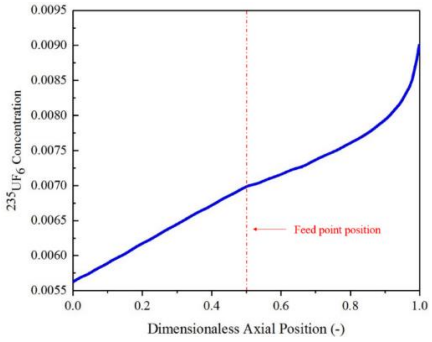
این ماشین یک ماشین استاندارد در مقالات مختلف می‌باشد [۸، ۱۸، ۳]. پس از محاسبه چشمه دقیق جرمی با روش DSMC در مرز دو ناحیه، با جایگذاری در معادله انساگر ناهمگن و حل معادلات با روش تفاضل محدود خطوط جریان حاصل می گردد. شکل ۶ خطوط جریان (Streamlines) با چشمه دقیق جرمی را برای سانتریفیوژی با اختلاف دمای محوری را نشان می دهد. نیمی از چشمه جرمی معرفی شده در دو انتهای ماشین در مختصات $5.5 \leq x \leq 6.5$ به عنوان چاه جرمی اعمال شده است. چشمه جرمی خوراک در مرز دوناحیه به عوملی همچون مقدار خوراک ورودی، محدوده ناحیه رقیق تا ابتدای مرز ناحیه پیوسته، دما، قطر و جرم ذرات گاز وابسته می باشد.



شکل ۶. خطوط جریان درون روتور برای چشمه ای واقع در

$x = 8$ و $Y/Yt = 0.5$

شکل ۷ تغییرات غنای $^{235}UF_6$ در طول روتور را نشان می دهد. با توجه به شکل در ارتفاع ۰/۵ خوراک با غنای ۰/۰۰۷۱ وارد محیط شبیه سازی می شود. غنای $^{235}UF_6$ در قسمت غنی سازی و تهی سازی ماشین به ترتیب برابر با ۰/۰۰۹ و ۰/۰۰۵۷ می باشد.



شکل ۷. تغییرات غنای $^{235}UF_6$ در طول روتور

در جدول ۲ نتایج فاکتورهای جداسازی و کارن جداسازی با مقادیر وود مقایسه شده است [۱۸]. با توجه به جدول ۲ نتایج حاصل از روش حاضر یا نتایج وود[۱۸] توافق بسیار خوبی دارند. اختلاف موجود ممکن است به علت محاسبه تابع دقیق جرمی با روش DSMC و روش تفاضل محدود باشد.

جدول ۲. مقایسه پارامترهای جداسازی مدلسازی با مقادیر وود [۱۴]

مقادیر وود	مقادیر حاصل از کد	پارامتر های جداسازی
	۲/۵۲	فاکتور جداسازی (α)
	۱/۵۸	ضریب غنی سازی (β)
	۱/۵۹	ضریب تهی سازی (γ)
۵۷/۰۸۹	۶۱/۶۴	کار جداسازی (kg UF_6 SWU/yr)

با توجه به جدول ۲ اختلاف کار جداسازی با روش فوق با مقدار مرجع ۷/۹۷ درصد می‌باشد که مقدار ممکن است به علت تابع فرضی جرمی و نوع روش حل باشد [۱۸].

۴. بحث ونتیجه گیری

در این مقاله با استفاده از روش DSMC و معادلات انساگر-پنکیک ناهمگن ایرادات مربوط به این روش اصلاح شد. همچنین یک شرط مرزی جدید برای اتصال دو ناحیه رقیق و پیوسته استفاده شد و چشمه جرمی دقیق بدست آمده از روش DSMC در معادلات انساگر-پنکیک ناهمگن جایگذاری شد. این معادلات با روش تفاضل محدود حل شده است. بنابراین کد تهیه شده علاوه بر داشتن سرعت بالا دارای دقت بالایی می باشد که می توان تاثیر خوراک وارد شده از ناحیه مولکولی را مورد بررسی قرار داد. همچنین خطوط جریان با اعمال چشمه دقیق جرمی محاسبه شده است. سپس خطوط جریان با اعمال اثر یک گرادیان دمای خطی روی دیواره ترسیم شده است. توزیع غلظت در طول روتور با روش تفاضل محدود محاسبه شده است. در نهایت با داشتن توزیع غلظت، پارامترهای جداسازی محاسبه شده است. نتایج کار جداسازی با نتایج وود توافق خوبی داشت.

مراجع

[1] H. G. Wood, and J. B. Morton," Onsager's pancake approximation for the fluid dynamics of a gas centrifuge", J. Fluid Mech, 1–31,299-311, (1980).

[2] K. Cohen, "The Theory of Isotope Seperation as Applied to the Large Scale Production of UTM." 103-125, (1951).

[3] M.D. Gunzburger, H.G. Wood, Computer methods in applied mechanics and engineering 31(1) 43–59, (1982).

[4] M.D. Gunzburger, H.G. Wood, J.A. Jordan, A finite element method for gas centrifuge flow problems, Journal on scientific and statistical computing 5(1) 78-94, (1984).

[5] H.G. Wood, T.C. Mason, Soubbaramayer, Multi-Isotope separation in a gas centrifuge using Onsager's Pancake model, Separation science and technology 31(9) 1185–1213, (1996).

[6] S. Zeng, H.G. Wood, Analytical solution of Onsager's Pancake equation with mass sources and sinks, Separation Science and Technology 50(4) 611-617, (2015).

[7] V. Kumaran, S. Pradhan, The generalized Onsager model for a binary gas mixture, Journal of fluid mechanics, 753, (2014) 307-359.

[8] H.G. Wood, Analysis of feed effects on a single-stage gas centrifuge cascade, Separation Science and Technology, 30, 13 (1995) 2631-2657.

[9] E. Ratz, One-Stage enrichment with centrifuges, in Proceedings of the sixth workshop on gases in strong rotation (1985) 621-654.

[10] G.A. Bird, Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows, Oxford Univ. Press, New York (1994).

[11] M. Khajenoori, J. Safdari, A. Haghighi Asl, A. Norouzi, Modeling gas-

granular flow in molecular using the DSMC method and continuum regions by Onsager's pancake equation with mass sources and sinks in a rotating cylinder, Granular Matter, 1-16, (2019).

[12] S. Pradhan, V. Kumaran, The generalized Onsager model for the secondary flow in a high-speed rotating cylinder, J. Fluid Mech., 686, 140-142, (2011)

[13] S. Yousefi-Nasab, J. Safdari, J. Karimi-Sabet, M. Khajenoori, Prediction of the compression ratio of a Holweck-type molecular pump with the presence of multi-component gases using a modified Sickafus method for high-speed rotors, Vacuum, 172 109056, (2020)

[14] M. Khajenoori, A. Haghighi Asl, J. Safdari, A. Norouzi, Modeling and simulating of feed flow in a gas centrifuge using the Monte Carlo method to calculate the maximum separation power. Journal of Molecular Modeling 25(11), 1-12 (2019). https://doi.org/10.1007/s00894-019-4226-x

[15] M. Khajenoori, A. Haghighi Asl, J. Safdari, A. Norouzi, Investigation of hydrodynamic parameters inside a gas centrifuge rotor in the presence of hydrogen fluoride and air light gases using DSMC and Boltzmann distribution function. Journal of Nuclear Science and Technology, **94**(4), (2021).

[16] G. A. Bird, Molecular Gas Dynamics, London: Oxford University Press, (1976).

[17] P. Roblin, F. Doneddu, Direct Monte-Carlo Simulations In a Gas Centrifuge, AIP Proceedings, (2001).

[18] H.G. Wood, G. Sanders, Rotating compressible flows with internal sources and sinks, Journal of fluid mechanics 127(1) 299-313, (1983).

Nuclear Technology and Energy

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

Nuclear Technology and Energy, Vol. 1, No. 3, Fall 2022, 26-35

Modeling and simulation of gas behavior with DSMC method and calculating the separation parameters inside a gas centrifuge

M. Khajenoori[1*], S. J. Safdari[2], A. Norozi[1], S. Yousefinasab[2], M.H. Mollah[2]

1. Atomic Energy Organization of Iran, Iran Advanced Technologies Company

2. Atomic Energy Organization of Iran, Nuclear Science and Technology Research Institute, Material and Nuclear Fuel Research School

Received: 04 - 02 - 2021

Accepted:29 - 04 - 2021

Abstract

The gas behavior within a centrifuge machine could be divided into molecular and continuum. The Boltzmann equation solving is a precise method in the molecular region (feed entrance area). DSMC method is one of the Boltzmann equation solving methods. So far, the mass source used in the Onsager-Pancake equation in the continuum region has been an assumed source and many researches have presented a different assumed mass source. In the present paper, it has been calculated feed reaching form to continuum region and its effect on the border between the two areas in the mass source form using direct Monte-Carlo method. It has been compared the mass source obtained from the DSMC method with the assumed mass source. Besides calculating the exact mass function using DSMC method in the present work, it has been obtained the flow function through substituting in the heterogeneous Onsager-Pancake equations and solving the equations by finite differential method. Afterwards, it has been calculated the separation parameters through substituting this flow function in the concentration equations. The difference between the amount of separation work by the combined method and the reference value is 7.97%.

Keywords: Molecular and continuous region, Mass source, DSMC

*** Corresponding Author E-mail: khajenoori1390@gmail.com**