



## بررسی پارامترهای هیدرودینامیکی در داخل یک روتور سانتریفیوژ گازی در حضور گازهای سبک هیدروژن فلوراید و هوا با روش‌های DSMC و تابع توزیع بولتزمن

مسعود خواجه نوری<sup>۱\*</sup>، علی حقیقی اصل<sup>۱</sup>، سیدجابر صفدری<sup>۲\*</sup>، علی نوروزی<sup>۳\*</sup>

۱. دانشکده مهندسی شیمی، نفت و گاز، دانشگاه سمنان، صندوق پستی: ۳۵۱۳۱-۱۹۱۱۱، سمنان - ایران

۲. شرکت فن‌آوری‌های پیشرفته ایران، سازمان انرژی اتمی ایران، صندوق پستی: ۱۴۳۹۹-۵۵۴۳۱، تهران - ایران

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

\*Email: a.noroozy@gmail.com

مقاله‌ی پژوهشی

تاریخ دریافت مقاله: ۹۸/۸/۱۵ تاریخ پذیرش مقاله: ۹۸/۱۲/۹

### چکیده

معادله بولتزمن معادله‌ای بسیار مهم در علم فیزیک و دینامیک سیالات است که برخوردهای دوتایی بین مولکول‌ها را توصیف می‌کند. یکی از روش‌های حل معادله بولتزمن، روش شبیه‌سازی مستقیم مونت‌کارلو می‌باشد. از آن‌جا که فشار اغلب تجهیزات واحدهای فرایند غنی‌سازی کم‌تر از فشار اتمسفر است، ممکن است در طی عملیات غنی‌سازی رطوبت هوا به دفعات و در مکان‌های مختلف زنجیره‌ها به لوله سیال نشت کرده و طی واکنش با گاز هگزافلوراید اورانیم سبب تولید رسوب بر روی سطوح داخلی روتور سانتریفیوژ و گاز هیدروژن فلوراید گردد. در این پژوهش تأثیر غلظت و فشار کل داخل روتور سانتریفیوژ فرضی برای شرایط دو جزئی ( $Z_{UF_6}=0.97$  و  $Z_{HF}=0.03$ )، ( $Z_{UF_6}=0.93$  و  $Z_{HF}=0.07$ )، ( $Z_{UF_6}=0.85$  و  $Z_{HF}=0.15$ )، ( $Z_{UF_6}=0.8$  و  $Z_{HF}=0.2$ ) و سه جزئی ( $Z_{UF_6}=0.9$ ،  $Z_{HF}=0.05$  و  $Z_{Air}=0.05$ ) و ( $Z_{UF_6}=0.9$ ،  $Z_{HF}=0.05$  و  $Z_{Air}=0.1$ ) مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج با روش تحلیلی مورد مقایسه قرار گرفته است. نتایج نشان داد که افزایش میزان گاز سبک به همراه گاز  $UF_6$  باعث کاهش شار جرمی محوری می‌گردد.

کلیدواژه‌ها: معادله بولتزمن، هیدروژن فلوراید، سانتریفیوژ گازی، DSMC

## 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

M. Khajenoori<sup>1,2</sup>, A. Haghghi Asl<sup>1</sup>, J. Safdari<sup>2,3</sup>, A. Norouzi<sup>\*2</sup>

1. Faculty of Chemical, Gas and Petroleum Engineering, Semnan University, P.O.Box:35131-19111, Semnan - Iran

2. Advanced Technology Company of Iran, AEOL, P.O.Box:14399-55431, Tehran - Iran

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

Research Article

Received 6.11.2019, Accepted 28.2.2020

### Abstract

The Boltzmann equation which describes binary collisions between molecules is a very important equation in physics and fluid dynamics. Direct Monte Carlo simulation is one of the methods to solve the Boltzmann equation. The moisture can leak to the fluid pipelines in the various places of cascades so many times through the enrichment operations since the pressure of the most enrichment process units is less than the atmospheric pressure. It causes the solid uranium precipitation on the inner surfaces of rotor and HF production upon the reaction with  $UF_6$ . In the present work, the effect of concentration and total pressure inside a hypothetical centrifuge for binary component conditions ( $Z_{UF_6}=0.97$ ,  $Z_{HF}=0.03$ ), ( $Z_{UF_6}=0.93$ ,  $Z_{HF}=0.07$ ), ( $Z_{UF_6}=0.9$ ,  $Z_{HF}=0.1$ ), ( $Z_{UF_6}=0.85$ ,  $Z_{HF}=0.15$ ), and three component conditions ( $Z_{UF_6}=0.9$ ,  $Z_{HF}=0.05$ ,  $Z_{Air}=0.05$ ) and ( $Z_{UF_6}=0.9$ ,  $Z_{HF}=0.1$ ,  $Z_{Air}=0.1$ ) have been investigated. The results have been compared with those of the Boltzmann distribution function. Moreover, increment in the amount of light gas along with  $UF_6$  results in the decrement of  $pv_z$ .

**Keywords:** Boltzmann equation, Hydrogen fluoride, Gas centrifuge, DSMC



## ۱. مقدمه

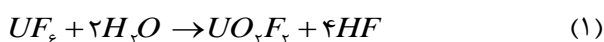
استفاده فزاینده از ایزوتوپ‌های پایدار و جداسازی ایزوتوپی معمولاً ناشی از تقاضای تحقیقات بنیادی فیزیک، شیمی، روش‌های تشخیص و درمان پزشکی و توسعه مواد جدید است و مصرف آن‌ها روزبه‌روز در حال افزایش می‌باشد. بنابراین نیاز به توسعه روش‌هایی برای جداسازی ایزوتوپ‌های پایدار وجود دارد. طراحی مجدد سانتریفیوژها برای اهداف جدید، با استفاده از مدل‌های محاسباتی بر مبنای مدل سازی جریان داخلی می‌باشد [۱-۳]. در یک ماشین سانتریفیوژ گازی، گاز با ترکیبی از دو یا چند ایزوتوپ وارد روتور می‌شود و تحت تأثیر نیروی گریز از مرکز شدیدی که ناشی از دوران روتور این ماشین در یک محفظه خلأ می‌باشد، جداسازی صورت می‌پذیرد. به دلیل نفوذ فشاری، جزء سنگین‌تر به دیواره نزدیک می‌شود و جزء سبک‌تر به محور روتور و به این ترتیب جدایش شعاعی بین ایزوتوپ‌ها یا گازهای چند جزئی رخ می‌دهد [۴]. از ابتدای توسعه سانتریفیوژ، روش‌های جای‌گزینی مانند روش اونساگر<sup>۱</sup> برای حل معادلات حاکم بر جریان گاز درون لایه استوارتسون روتور (لایه‌های نازک کنار دیواره روتور که جرم غالب گاز در آن قرار دارد) ارایه 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 [۵-۶]. سابرامیر در سال ۱۹۶۱ به منظور ساده‌سازی بیشتر، به‌طور کامل از اثر کپ‌ها صرف‌نظر نمود و با فرض این‌که تغییرات جریان در راستای شعاع است، به حل معادلات پرداخت [۷]. اولاندر با مقایسه‌ای که بین این روش‌ها انجام داد، نشان داد که نتایج حاصل، توافق خوبی با یک‌دیگر دارند [۸]. 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 کپ‌ها و در خلاف جهت یک‌دیگر بود. حل معادلات اونساگر همگن برای دو حالتی که گرادیان دمایی خطی دیواره و محرک جریان محوری اعمال شود، انجام گرفته است [۹]. با پیشرفت سیستم‌های محاسباتی، روش‌های دقیق‌تری هم‌چون روش‌های لاگرانژی مورد استفاده قرار گرفتند. یکی از این روش‌ها، روش شبیه‌سازی مستقیم مونت‌کارلو می‌باشد (DSMC<sup>۲</sup>) که برای شبیه‌سازی جریان‌های گاز رقیق مورد استفاده قرار می‌گیرد. بر اساس مطالعات صورت گرفته، لیستی از مهم‌ترین کارهای انجام شده توسط محققین با استفاده از روش مستقیم مونت‌کارلو بر روی پدیده‌های انتقال در جدول ۱ ارایه شده است.

## جدول ۱. مروری بر مهم‌ترین تحقیقات صورت گرفته برای بررسی

## پدیده انتقال با روش مستقیم مونت‌کارلو

شماره	پژوهشگران	موضوع	مرجع
۱	جین و همکارانش	یک الگوریتم جدید برای شبیه‌سازی اجسام با هندسه متحرک با روش DSMC ارایه کردند.	[۱۰]
۲	پیفیر و گرجی	به توسعه کد DSMC با استفاده از تئوری جنبشی غیرساختار یافته پرداختند.	[۱۱]
۳	پرادهان و کاماران	به بررسی شار جرمی محوری داخل یک استوانه چرخان با سرعت بالا بر اساس ترم بی‌بعد در راستای شعاعی با استفاده از روش DSMC پرداختند و نتایج خود را با مدل انساگر تعمیم یافته مقایسه نمودند و به نتایج مشابهی دست یافتند.	[۱۲]
۴	خواجه - نوری و همکاران	به بررسی تأثیر ورود خوراک در ناحیه رقیق در یک روتور ماشین سانتریفیوژ گازی با روش DSMC پرداختند و با استفاده از کوپل ناحیه رقیق و پیوسته پارامترهای جداسازی درون روتور را محاسبه کردند.	[۱۳، ۱]
۵	نتوس و همکارانش	به بررسی انتقال حرارت در گازهای رقیق چند قطبی محدود شده در بین صفحات موازی پرداختند.	[۱۴]
۶	برد	به بررسی تغییرات غلظت برای گازهای هلیوم، آرگون و زینان در داخل یک ماشین سانتریفیوژ در یک بُعد پرداخت و پروفایل‌های فشار، غلظت و سرعت چرخشی را بر حسب شعاع به دست آورد.	[۱۵]
۷	تیسنگ و همکارانش	با موازی‌سازی کد DSMC، روش DSMC را برای یک صفحه دوبعدی در نزدیکی ناحیه پیوسته مورد بررسی قرار دادند.	[۱۶]
۸	بارلتا	بر اساس روش DSMC کدی برای مدل‌سازی خنک-کننده‌های تبخیری مشتمل بر مخلوطی از دو گاز مورد بررسی قرار دادند.	[۱۷]
۹	پراسانس و همکارش	مدل‌های مولکولی مختلفی را برای شبیه‌سازی جریان گاز رقیق با استفاده از روش DSMC ارایه کرده و نشان دادند که هر یک از این مدل‌ها، با درجاتی مختلفی از موفقیت همراه است.	[۱۸]
۱۰	ونگ و لی	به بررسی مخلوط گازی با عدد نادسن بالا در یک میکروکانال با روش DSMC پرداختند. آن‌ها تغییرات ضریب اختلاط نسبت به عدد ماخ و معکوس عدد نادسن را به دست آوردند. نتایج شبیه‌سازی نشان داد که سرعت و دمایی جریان بیش‌ترین تأثیر را در ضریب اختلاط گازها با یک‌دیگر دارد و خواص دیواره، اگرچه روی پروفایل‌های سرعت و دما تأثیر می‌گذارد، ولی اثر کمی بر روی طول اختلاط دارد.	[۱۹]
۱۱	وو و همکارانش	با بهبود ساختار شبکه‌بندی و گام زمانی روش DSMC، کدی جهت استفاده برای جریان‌های داخلی و خارجی ارایه نمودند.	[۲۰]
۱۲	روبلین و همکارش	آن‌ها جریان گاز داخل سیلندر را به دو بخش تقسیم کردند. بخش اول که نزدیک محور دوران و در ناحیه رقیق قرار گرفته است با معادله بولتزمن و روش شبیه‌سازی مستقیم مونت‌کارلو مدل‌سازی شد. بخش دوم که گاز نزدیک دیواره سیلندر و در ناحیه غلیظ قرار گرفته است با معادله ناویر استوکس مدل‌سازی شد.	[۲۱]
۱۳	برد	به بررسی دینامیک مولکولی گاز و جریان گاز رقیق با روش DSMC پرداخت.	[۲۲]

از آن‌جا که فشار اغلب تجهیزات واحدهای فرایند غنی‌سازی کم‌تر از فشار اتمسفر می‌باشد، در طی عملیات غنی‌سازی رطوبت هوا به دفعات و در مکان‌های مختلف زنجیره‌ها به لوله سیال نشت می‌کند و طی واکنش زیر سبب تولید رسوب بر روی سطوح داخلی ماشین سانتریفیوژ می‌گردد [۲۳].



به دست آوردن داده‌های سینتیکی قابل اعتماد برای واکنش بین گاز هگزا فلوراید اورانیم با رطوبت هوا درون ماشین

1. Onsager
2. Direct Simulation Monte-Carlo



از محرک حرارتی روی دیواره روتور برای افزایش جدایش، استفاده کرد و این گونه یک حرکت محوری در راستای ارتفاع روتور ایجاد می‌گردد. در واقع اگر یک گرادیان دمای مثبت (در جهت افزایش ارتفاع روتور) روی دیواره روتور اعمال گردد، با کاهش چگالی، متناسب با آن نیروی خارجی رو به پایین کاهش پیدا می‌کند و در نتیجه نیروی شناوری بر نیروی گرانش و نیروهای ویسکوز لایه‌های سیال غلبه کرده و سیال رو به بالا حرکت می‌کند.

در این مقاله پارامترهای هیدرودینامیکی در داخل یک روتور سانتریفیوژ گازی در حضور گازهای سبک هیدروژن فلوراید و هوا با روش‌های DSMC و تابع توزیع بولتزمن مورد بررسی قرار گرفته است.

### ۱.۲ معادله حاکم

معادله حاکم توصیف‌کننده جریان گاز رقیق، معادله بولتزمن می‌باشد که به صورت زیر نوشته می‌شود [۲۷، ۲۸].

$$\frac{\partial f}{\partial t}(\vec{r}, \vec{v}_1, t) + \vec{v}_1 \nabla_r f(\vec{r}, \vec{v}_1, t) + \frac{F}{m} \nabla_v f(\vec{r}, \vec{v}_1, t) = \int d^3 v_2 \int d\sigma(\Omega) \cdot [f_1' f_2' - f_1 f_2] |\vec{v}_1 \vec{v}_2| \quad (2)$$

در این رابطه  $\vec{v}$  سرعت مولکولی،  $\vec{F}$  نیروهای خارجی بر واحد جرم و  $\sigma$  سطح مقطع دیفرانسیلی برخورد می‌باشد. در این معادله، تابع توزیع ذره متغیر وابسته و مکان، زمان و سرعت، متغیرهای مستقل هستند. در رابطه (۲) اولین عبارت نرخ تغییرات تعداد مولکول‌های نوع  $\vec{v}_1$  در فضای مسیریابی مولکولی می‌باشد (مولکول‌های قبل از برخورد را می‌توان با مولکول‌های گروه  $\vec{v}_1$  و  $\vec{v}_2$  و مولکول‌های بعد از برخورد را با مولکول‌های گروه  $\vec{v}_1^*$  و  $\vec{v}_2^*$  نشان داد). عبارت دوم، جابه‌جایی مولکول‌ها در میان یک حجم سیال توسط سرعت مولکولی  $\vec{v}_1$  را نشان می‌دهد. عبارت سوم، جابه‌جایی مولکول‌ها با سرعت  $\vec{v}_1$  بر اثر اعمال نیروی خارجی  $\vec{F}$  را نشان می‌دهد و عبارت چهارم، انتگرال برخورد دوتایی می‌باشد. عبارت  $(-f_1 f_2)$  برخورد مولکول‌های نوع  $\vec{v}_1$  را با مولکول‌های نوع  $\vec{v}_2$  توصیف می‌نماید (که مولکول‌های نوع  $\vec{v}_1^*$  و  $\vec{v}_2^*$  را ایجاد می‌کنند) و به‌طور مشابه، در برخورد معکوس مولکول‌های نوع  $\vec{v}_1^-$  با مولکول‌های نوع  $\vec{v}_2^-$  برخورد کرده و مولکول‌های نوع  $\vec{v}_1$  و  $\vec{v}_2$  را ایجاد می‌کنند که با  $(f_1' f_2')$  نمایش داده می‌شود.

حل معادله تحلیلی بولتزمن به دلیل غیرخطی بودن، پیچیدگی عبارت‌های انتگرال برخورد و چند بعدی بودن معادله  $(x, v, t)$  بسیار مشکل است [۲۹]. روش‌های عددی گوناگونی برای حل معادله بولتزمن رایج شده‌اند که همگی به دنبال پیدا کردن جمله مناسبی برای مدل کردن جمله برخورد هستند. جدیدترین روش حل عددی به کار رفته، روش DSMC

سانتریفیوژ همواره با مشکل همراه بوده است. بر اساس یک انتخاب منطقی فرض می‌گردد که تمام رسوب تولید شده بر اثر واکنش  $UF_6$  با رطوبت هوا به فرم  $UO_2F_2$  (بیش از ۸۰ درصد) است [۲۴]. برطبق واکنش (۱) پس از واکنش گاز هگزافلوراید اورانیوم با رطوبت هوا، رسوب جامد زرد رنگ  $UO_2F_2$  و گاز  $HF$  تولید می‌گردد. گاز  $HF$  سبب خوردگی آبدها و باعث شکست خلاء موجود در ماشین سانتریفیوژ می‌گردد. از آنجا که اثر گاز هیدروژن فلوراید همراه با گاز هگزافلوراید اورانیوم در مقالات کم‌تر مورد بررسی قرار گرفته است [۲۵، ۲۶]، در این مقاله برای اولین بار با روش شبیه سازی مستقیم مونت‌کارلو به مطالعه تأثیر پروفایل جریان و غلظت گاز هگزافلوراید اورانیوم همراه با گاز هیدروژن فلوراید در داخل سانتریفیوژ گازی پرداخته شده است. پروفایل‌های غلظت و فشار داخل یک سانتریفیوژ فرضی با مقادیر مختلف ۳، ۷، ۱۰ و ۱۵ درصد مولی گاز هیدروژن فلوراید همراه با گاز هگزافلوراید اورانیوم با روش تحلیلی مورد مقایسه قرار گرفته است. در ادامه پروفایل‌های غلظت و جریان برای دو مخلوط سه جزیی هگزافلوراید اورانیوم با حضور گازهای هیدروژن فلوراید و هوا با ترکیب برابر ۵ و ۱۰ درصد مولی پرداخته شده است. نتایج با روش تحلیلی مورد مقایسه قرار گرفته است. هم‌چنین تأثیر یک محرک خطی دمایی روی دیواره روتور بر ایجاد جریان محوری (برگشت کامل) یک ماشین سانتریفیوژ و در نتیجه ایجاد تغییرات غلظت برای هر جزء با توجه به جرم مولکولی آن گاز در راستای محوری و نیز تغییرات شار جرم محوری در راستای شعاع سانتریفیوژ مورد بررسی قرار گرفته است.

### ۲. تئوری

هنگامی که یک ماشین سانتریفیوژ گازی با سرعت بسیار بالا در چرخش است و در اثر این چرخش، بیش از ۹۹ درصد گاز در قسمت دیواره ماشین قرار می‌گیرد، گاز در این ناحیه را می‌توان گاز پیوسته دانست. گاز پیوسته در حدود یک‌دهم شعاع روتور را شامل می‌شود؛ معادلات گاز پیوسته در این ناحیه صادق هستند و می‌توان با حل معادلات ناپیراستوکس<sup>۱</sup> رفتار گاز در این ناحیه را به دست آورد [۸]. مولکول‌های گاز پس از قرار گرفتن در یک ماشین سانتریفیوژ، با همان سرعت و جهتی که داشته‌اند به حرکت خود ادامه می‌دهند تا این‌که به دیواره روتور یا مولکول‌های دیگری که تحت تأثیر نیروی گریز از مرکز قرار گرفته‌اند برخورد کنند. پس از برخورد، متوجه حضور در میدان گریز از مرکز می‌شوند و پس از طی زمان گذار، به‌طور کامل با میدان گریز از مرکز هماهنگ شده و با سرعت دورانی برابر با سرعت دورانی روتور شروع به چرخش می‌نمایند. در این حالت، که اصطلاحاً به آن گردش صلب گفته می‌شود، گاز به حالت تعادل می‌رسد. می‌توان در داخل یک ماشین سانتریفیوژ

1. Navier–Stokes Equations



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

$$\sigma_T C_r / (\sigma_T C_r)_{\max} \quad (7)$$

از میان بیشینه جفت‌های ممکن، جفتی انتخاب می‌شود که نسبت بالا برای این جفت بزرگ‌تر از عدد تصادفی  $R_f$  انتخاب شده باشد. به‌طور کلی روش DSMC به مراحل زیر تقسیم می‌شود:

- مقداردهی اولیه
- شبکه‌بندی ناحیه محاسباتی
- حرکت دادن ذرات و برخورد با سطح
- برخورد ذرات با یکدیگر
- نمونه‌گیری
- برگشت به قسمت سوم.

#### ۲.۱.۲ روش تحلیلی (روش تابع توزیع بولتزمن)

در یک سانتیفریوژ در حال چرخش با سرعت  $\omega$  (رادیان بر ثانیه) گاز با چگالی  $\rho$  در شعاع  $r$  تحت نیروی گریز از مرکز برابر با  $\omega^2 r \rho$  در حجم واحد قرار می‌گیرد که برابر با گرادیان فشار در آن نقطه است [۴].

$$\frac{dp}{dr} = \omega^2 r \rho \quad (8)$$

$$P = \frac{\rho_c T}{M} \quad (9)$$

با جای‌گذاری رابطه (۸) در رابطه (۹)، عبارت زیر به دست می‌آید:

$$\frac{1}{P} \frac{dP}{dr} = \frac{M \omega^2 r}{R_g T} \quad (10)$$

با انتگرال‌گیری از رابطه (۱۰)، نسبت فشار یا نسبت چگالی از محور تا دیواره روتور سانتیفریوژ مطابق با رابطه زیر به دست می‌آید:

$$\frac{P(r)}{P_R} = \frac{\rho(r)}{\rho_R} = \exp \left[ -\frac{M V_w^2}{2 R_g T} \left( 1 - \frac{r^2}{R^2} \right) \right] \quad (11)$$

$P_R$  فشار در دیواره روتور می‌باشد. با صرف‌نظر کردن از تأثیر گرانش و با در نظر گرفتن چرخش سیلندر در مدت زمان کافی برای رسیدن به تعادل، چگالی عددی گاز داخل استوانه دوار به‌صورت تابعی از شعاع سیلندر محاسبه می‌شود. انرژی یک ذره در جریان متقارن محوری مخلوط گاز در یک استوانه دوار از رابطه زیر به دست می‌آید:

می‌باشد که بر اساس اصل جداسازی برخورد و حرکت مولکول‌ها در یک بازه زمانی کوچک‌تر از متوسط زمان برخورد مولکول‌ها، معادله بولتزمن را شبیه‌سازی می‌کند [۱۰-۱۵].

#### ۱.۱.۲ روش شبیه‌سازی مستقیم مونت کارلو

روش شبیه‌سازی مستقیم مونت کارلو اولین بار توسط برد [۲۲] ارائه شد. این روش برای مدل‌سازی جریان‌های گاز رقیق می‌باشد که بر اساس شبیه‌سازی مستقیم فیزیکی عمل می‌کند. در این روش برخورد بین مولکولی و حرکت مولکول‌ها در یک بازه زمانی از هم جدا می‌شود به‌طوری‌که این بازه زمانی کوچک‌تر از متوسط زمان برخورد مولکول‌ها باشد. سرعت، مختصات مکانی و انرژی درونی هر یک از مولکول‌ها در کامپیوتر ذخیره شده و با حرکت مولکول‌ها در طی زمان عوض می‌شود. در این روش تعداد زیادی از مولکول‌های مدل به منظور شبیه‌سازی مولکول‌های واقعی به کار می‌روند که تعداد آن‌ها به مراتب کم‌تر از مولکول‌های واقعی است. بنابراین هر مولکول مدل، بیانگر تعداد زیادی از مولکول‌های واقعی است. دامنه محاسباتی به تعداد زیادی سلول و زیرسلول تقسیم می‌شود. برای انجام محاسبات برخورد در زیر سلول از روش NTC<sup>۱</sup> معرفی شده توسط برد استفاده شده است [۱۵، ۲۲]. احتمال برخورد بین دو مولکول شبیه‌سازی شده در یک بازه زمانی برابر است با:

$$P = F_n \sigma_T C_r \Delta t / V_c \quad (3)$$

$F_n$  بیانگر تعداد مولکول‌های واقعی است که توسط یک مولکول مدل جانشین شده،  $V_c$  حجم سلول،  $\sigma_T$  سطح مقطع برخورد کل که تابعی از سرعت نسبی بین دو مولکول می‌باشد و  $C_r$  سرعت نسبی بین دو مولکول است. بیشینه احتمال برخورد به‌صورت زیر تعریف می‌شود:

$$P_{\max} = F_n (\sigma_T C_r)_{\max} \Delta t / V_c \quad (4)$$

$n V_c$  بیانگر متوسط تعداد مولکول‌های واقعی در هر سلول است. بنابراین متوسط تعداد مولکول‌های شبیه‌سازی شده به‌صورت رابطه (۵) تعریف می‌شود:

$$N = n V_c / F_n \quad (5)$$

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

$$\cdot \frac{1}{2} \bar{N} N F_n (\sigma_T C_r)_{\max} \Delta t / V_c \quad (6)$$



گازی ۸۰ درصد مولی هگزافلوراید اورانیم (UF<sub>۶</sub>)، ۱۰ درصد مولی هیدروژن فلوراید (HF) و ۱۰ درصد مولی هوا (Air) انتخاب شده است. از آنجا که در شرط مرزی نوع انتشاری، ذرات پس از برخورد با دیواره با سرعتی متناسب با سرعت دیواره و دمای آن انعکاس پیدا می‌کنند، تمامی شرایط مرزی انتخابی برخورد با دیواره از نوع انتشاری در نظر گرفته شده است و به دلیل تقارن در یک ماشین سانتریفیوژ در حالت چرخش صلب و برگشت کامل، از مختصات متقارن محوری استفاده گردیده است. جریان حاصل از شبیه‌سازی با روش DSMC با انتخاب مقدار بازه زمانی  $s \times 10^{-5} \times 1$  پس از ۱/۰۰۰/۰۰۰ تکرار به پایداری رسیده است. برای کمینه شدن خطای آماری و هم‌چنین نزدیک شدن جواب DSMC به جوابی از معادله بولتزمن، تعداد ذرات شبیه‌سازی باید به اندازه کافی زیاد باشد اما به دلیل افزایش زمان محاسباتی، نباید از ظرفیت سیستم محاسباتی تجاوز کند. تعداد مولکول‌های شبیه‌سازی در این تحقیق برابر ۵۰۰/۰۰۰ مولکول شبیه‌سازی شده می‌باشد و تعداد کل مولکول‌ها بر واحد حجم که به‌طور یکنواخت در محیط شبیه‌سازی قرار می‌گیرند برابر  $1.406 \times 10^{21}$  انتخاب گردیده است. تعداد شبکه‌های مورد استفاده در شبیه‌سازی  $300 \times 300$  انتخاب شده و در کنار دیواره از شبکه‌های غیریکنواخت استفاده شده است. جهت استفاده از برخوردهای همسایه در مرحله برخورد ذرات با یک‌دیگر، از تکنیک زیرشبکه استفاده شده است. تعداد زیرشبکه‌های مورد استفاده در هر شبکه برابر ۴ در نظر گرفته شده است. برای یک مسئله متعادل، شرایط اولیه روی حل نهایی روش DSMC اثر نمی‌گذارد، اما روی زمان محاسبات تأثیر خواهد داشت. دمای اولیه مولکول‌های گاز  $K \times 300$  در نظر گرفته شده است. در حالت تعادلی، جریان مانند یک چرخش جسم صلب با سرعت چرخشی متناسب با شعاع روتور عمل می‌کند. شکل ۱ تغییرات خطی سرعت چرخشی داخل یک ماشین سانتریفیوژ برای گاز هیدروژن فلوراید و هگزافلوراید اورانیم با استفاده از مدل‌کروی سخت تغییرپذیر با روش DSMC را نشان می‌دهد. نتایج به دست آمده از حل DSMC، نشان‌دهنده رفتار خطی سرعت چرخشی برای گاز هیدروژن فلوراید در شبیه‌سازی می‌باشد. به عبارت دیگر در مورد گازهای انتخابی، فرض  $V=r\omega$  برای حل تحلیلی فرض درستی می‌باشد. ولی باید به این نکته توجه داشت که با تغییر جنس گاز به یک گاز سنگین‌تر مثل هگزافلوراید اورانیم، به علت انباشت شدید مولکول‌های گاز به دیواره، فرض تغییرات خطی برای سرعت چرخشی قابل‌قبول نخواهد بود و سرعت چرخشی گاز هگزافلوراید اورانیم از محور تا دیواره به‌صورت تابع نمایی افزایش می‌یابد.

$$E(r) = \frac{1}{2} I \omega^2 = \frac{1}{2} r^2 \omega^2 \quad (12)$$

اثرات چرخش نیز مشابه اثرات اضافی میدان روی سیستم است و با رابطه (۱۳) بیان می‌گردد:

$$U(r) = -\frac{1}{2} m r^2 \omega^2 \quad (13)$$

با استفاده از تابع توزیع بولتزمن برای چگالی عددی یک ذره و استفاده از رابطه (۱۳) در آن، چگالی عددی در راستای شعاعی به‌صورت زیر قابل محاسبه می‌باشد:

$$n(r) = A \exp\left(-\frac{U(r)}{kT}\right) = A \exp\left(\frac{m r^2 \omega^2}{2k_B T}\right) \quad (14)$$

که در آن فاکتور نرمال‌سازی  $A$  به‌صورت زیر به دست می‌آید:

$$A = \frac{Nm\omega^2}{2\pi k_B T} \left[ \exp\left(\frac{m R^2 \omega^2}{2k_B T}\right) - 1 \right]^{-1} \quad (15)$$

با محاسبه  $A$  چگالی عددی نسبت به شعاع یک ماشین سانتریفیوژ به‌صورت زیر نوشته می‌شود:

$$n(r) = \frac{Nm\omega^2}{2\pi k_B T L} \frac{\exp\left(\frac{m r^2 \omega^2}{2k_B T}\right)}{\exp\left(\frac{m R^2 \omega^2}{2k_B T}\right) - 1} \quad (16)$$

در روابط بالا،  $N$  تعداد کل مولکول‌ها،  $m$  جرم مولکول گاز،  $M$  جرم مولکولی گاز (حاصل‌ضرب جرم مولکول در عدد آووگادرو)،  $\omega$  سرعت زاویه‌ای،  $k_B$  ثابت بولتزمن،  $T$  دمای مطلق،  $L$  طول استوانه،  $R$  شعاع استوانه،  $R_G$  ثابت جهانی گازها و  $r$  مسیر شعاعی می‌باشد.

### ۳. نتایج

سانتریفیوژ فرضی مورد بررسی، استوانه‌ای به طول  $m \times 0.2$  و شعاع  $m \times 0.1$  است که با سرعت زاویه‌ای ثابت ۶۰۰۰ دور بر دقیقه یا  $m.s^{-1} \times 600$  در حال چرخش است. مخلوط گازی درون استوانه حاوی ۳ درصد مولی هیدروژن فلوراید (HF) و ۹۷ درصد مولی هگزافلوراید اورانیم (UF<sub>۶</sub>)، ۷ درصد مولی هیدروژن فلوراید (HF) و ۹۳ درصد مولی هگزافلوراید اورانیم (UF<sub>۶</sub>)، ۱۰ درصد مولی هیدروژن فلوراید (HF) و ۹۰ درصد مولی هگزافلوراید اورانیم (UF<sub>۶</sub>) و ۱۵ درصد مولی هیدروژن فلوراید (HF) و ۸۵ درصد مولی هگزافلوراید اورانیم (UF<sub>۶</sub>) انتخاب شده است. هم‌چنین دو مخلوط سه‌جزیی شامل ۹۰ درصد مولی هگزافلوراید اورانیم (UF<sub>۶</sub>)، ۵ درصد مولی هیدروژن فلوراید (HF) و ۵ درصد مولی هوا (Air) و مخلوط





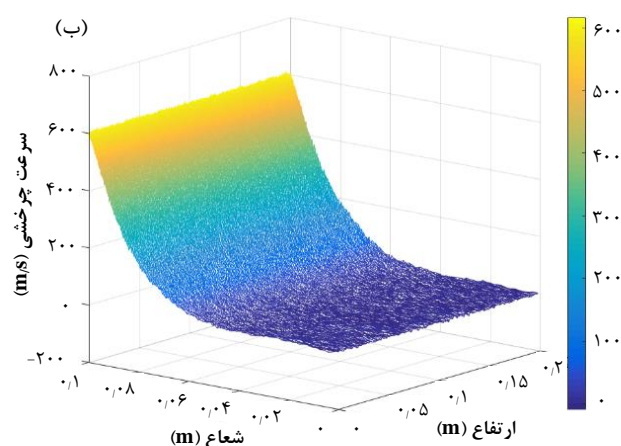
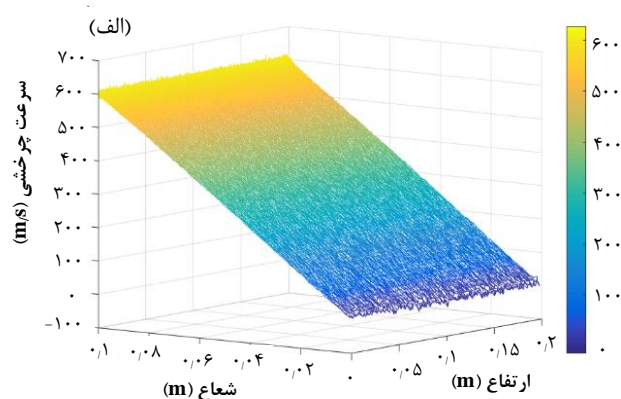
اثرات به صورت میکروسکوپی لحاظ گردیده است لذا می توان گفت که نتایج به دست آمده از روش DSMC نتایج قابل قبول تری نسبت به نتایج حل تحلیلی می باشند.

شکل ۳ تغییرات دانسیته مخلوط گازی اجزاء (الف) ۹۰ درصد گاز هگزافلوراید اورانیم و (ب) ۱۰ درصد هیدروژن فلوراید در راستای شعاعی داخل روتور ماشین سانتریفیوژ با روش DSMC را نشان می دهد. چگالی ذرات در جهت شعاعی در طول دیواره از بالا به پایین افزایش می یابد. ایجاد گردادیان خطی روی دیواره روتور سبب تغییر دانسیته بر روی دیواره گردیده به طوری که در بالای روتور بیشترین مقدار چگالی ایجاد شده است.

شکل ۴ تغییرات فشار کل مخلوط گازی در راستای شعاعی در یک ماشین سانتریفیوژ با روش DSMC و تحلیلی را نشان می دهد. با توجه به شکل ۴ نتایج فشار با روش تحلیلی (با توجه به رابطه ۱۱) و DSMC دارای اختلاف ناچیزی با یکدیگر به ویژه در قسمت محوری روتور می باشند. مقدار تغییرات شعاعی فشار کل، داخل روتور بر اساس حاصل جمع فشار جزیی هریک از گازها به دست آمده است.

شکل ۵ تغییرات شار جرمی محوری در جهت شعاع برای مقادیر مختلف گاز سبک هیدروژن فلوراید همراه گاز هگزافلوراید اورانیم در ارتفاع ۱۰ سانتی متری با روش DSMC را نشان می دهد. با توجه به اعمال گردادیان دمایی روی دیواره روتور، جریان در نزدیک دیواره به سمت بالا و در ابتدای لایه استوارتسون به سمت پایین حرکت می کند. این جریان رفت و برگشتی به سمت بالا و پایین روتور حاکی از ایجاد یک جریان چرخشی در لایه استوارتسون می باشد. هم چنین با افزایش مقدار درصد مولی گاز سبک، شار جرمی محوری در جهت شعاع در نزدیک دیواره (در لایه استوارتسون) کاهش یافته است.

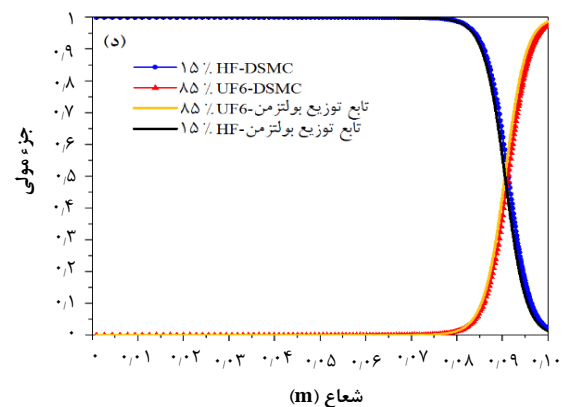
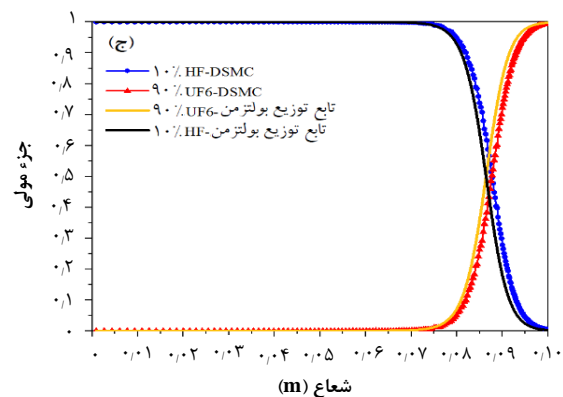
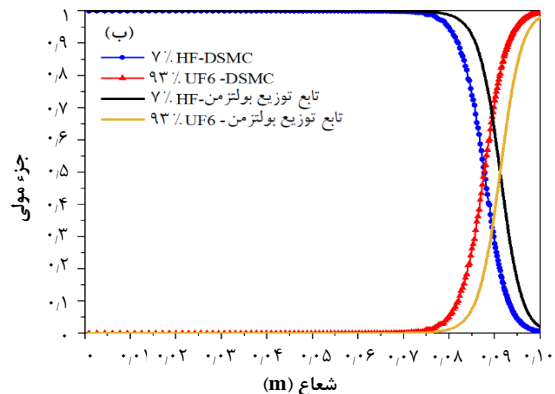
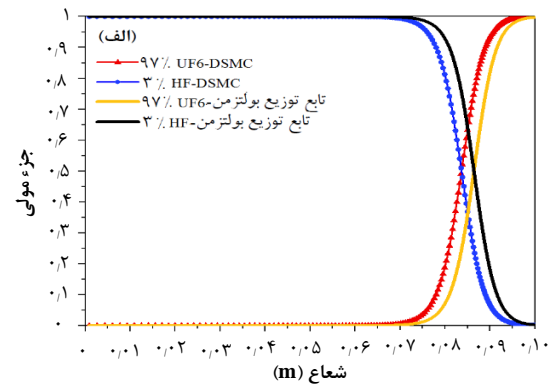
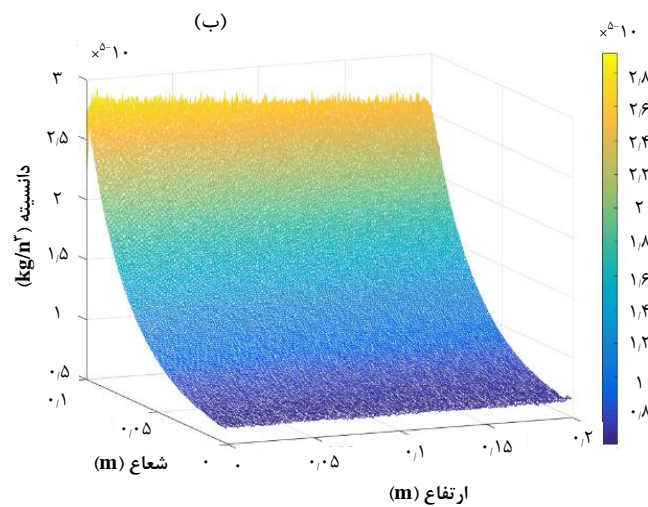
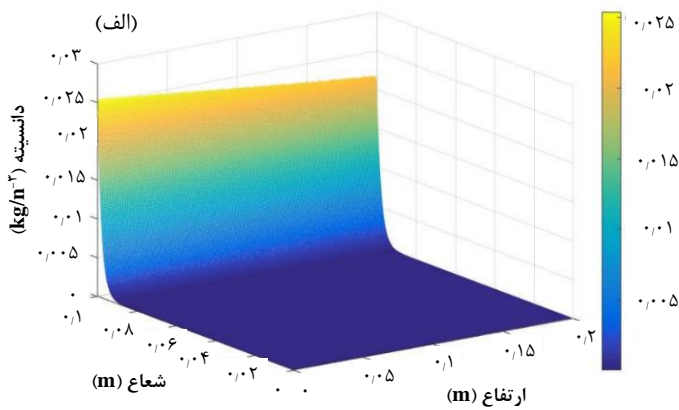
از آنجا که روش DSMC یک روش گذرا بوده و پس از گذشت زمان مناسب به پایداری جریان و غلظت می رسد، از این رو می توان با استفاده از مقادیر تغییر غلظت در هر تکرار نسبت به تکرار قبلی آن از رسیدن به جریانی پایدار اطمینان حاصل کرد. شکل ۶ نشان می دهد که نتایج تغییرات غلظت برای مخلوط گازی ۹۰ درصد گاز هگزافلوراید اورانیم و ۱۰ درصد هیدروژن فلوراید به عنوان نمونه در زمان های اولیه اجرا دارای ناپایداری بالایی می باشد که با گذشت زمان و رسیدن به تعادل، نوسانات غلظت کاهش می یابد به گونه ای که مقدار اختلاف بین تکرارهای ۶۰۰/۰۰۰ و ۱/۰۰۰/۰۰۰ ناچیز می گردد. این امر نشان دهنده پایداری نتایج غلظت به دست آمده از شبیه سازی پس از ۱/۰۰۰/۰۰۰ تکرار می باشد.



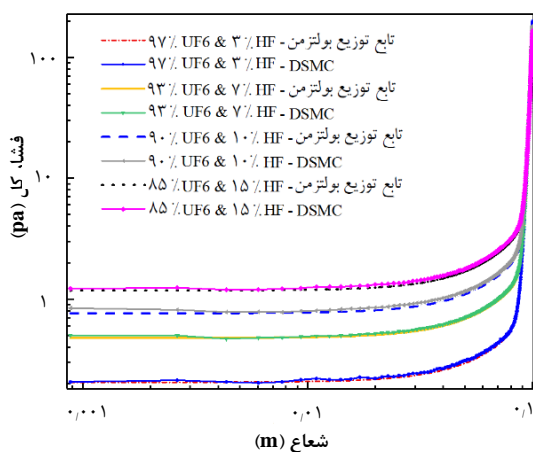
شکل ۱. تغییرات خطی سرعت چرخشی داخل یک ماشین سانتریفیوژ برای گازهای (الف) هیدروژن فلوراید و (ب) هگزافلوراید اورانیم با استفاده از مدل کروی سخت تغییرپذیر با روش DSMC.

شکل ۲ تغییرات غلظت مخلوط گازی (الف) ۹۷ درصد گاز هگزافلوراید اورانیم و ۳ درصد هیدروژن فلوراید، (ب) ۹۳ درصد گاز هگزافلوراید اورانیم و ۷ درصد هیدروژن فلوراید، (ج) ۹۰ درصد گاز هگزافلوراید اورانیم و ۱۰ درصد هیدروژن فلوراید، (د) ۸۵ درصد گاز هگزافلوراید اورانیم و ۱۵ درصد هیدروژن فلوراید در راستای شعاعی ماشین سانتریفیوژ با روش DSMC و حل تحلیلی (با توجه به رابطه ۱۶) را نشان می دهد. مقادیر غلظت هر جزء در شبیه سازی مونت کارلو از نسبت تعداد مولکول های هر جزء به تعداد کل مولکول های واقع شده در هر شبکه محاسبه گردیده است. با افزایش میزان گاز سبک و کاهش مقدار جزء سنگین تر، نمودار غلظت روش DSMC به روش تحلیلی نزدیک تر می شود به طوری که این اختلاف در شکل ۲ بسیار ناچیز می باشد. اختلاف تغییرات غلظت به دست آمده از روش حل تحلیلی با نتایج روش DSMC را می توان به دلیل عدم در نظر گرفتن اثرات واقعی سطح مقطع برخورد، ضریب نفوذ و اثرات ضریب ویسکوزیته در محاسبه قطر مؤثر در حل های تحلیلی دانست؛ در روش DSMC تمامی این





شکل ۳. تغییرات دانسیته مخلوط گازی اجزاء (الف) ۹۰ درصد گاز هگزا فلوراید اورانیم و (ب) ۱۰ درصد هیدروژن فلوراید با روش DSMC در یک ماشین سانتریفیوژ.



شکل ۴. تغییرات فشار کل در راستای شعاعی مخلوط گازی در یک ماشین سانتریفیوژ با روش DSMC و تحلیلی.

شکل ۲. تغییرات شعاعی غلظت مخلوط گازی (الف) ۹۷ درصد گاز هگزا فلوراید اورانیم و ۳ درصد هیدروژن فلوراید، (ب) ۹۳ درصد گاز هگزا فلوراید اورانیم و ۷ درصد هیدروژن فلوراید، (ج) ۹۰ درصد گاز هگزا فلوراید اورانیم و ۱۰ درصد هیدروژن فلوراید، (د) ۸۵ درصد گاز هگزا فلوراید اورانیم و ۱۵ درصد هیدروژن فلوراید در یک ماشین سانتریفیوژ با روش DSMC و روش حل تحلیلی.



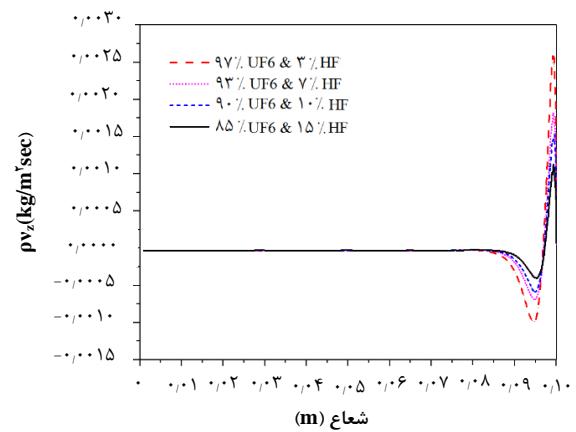
هوا مشهودتر بوده و برای گاز هگزافلوراید اورانیم (با افزایش وزن مولکولی) کم تر می شود. در شکل ۷ ج، دو مخلوط گازی با روش DSMC با یکدیگر مقایسه شده اند. هم چنین نتایج نشان می دهد که با افزایش حضور گاز سبک غلظت جزء سنگین در قسمت بالای دیواره سانتریفیوژ کاهش یافته و غلظت جزء سبک در پایین سانتریفیوژ افزایش می یابد. هم چنین شکل ۷ ج نشان می دهد که پروفایل غلظت جزء سنگین تر (هگزافلوراید اورانیم) در جهت شعاع ماشین با شیب مثبت و افزایشی به غلظت بالاتر متمایل شده و جزء سبک تر (گاز هوا) با شیب منفی از محور روتور در جهت شعاع به غلظت کم تر متمایل شده است. جزء میانی (گاز هیدروژن فلوراید) نیز دارای دو شیب مثبت و منفی از محور روتور در جهت شعاع می باشد.

شکل ۸ نمودار تغییرات چگالی اجزا یک مخلوط گازی ۸۰ درصد گاز هگزافلوراید اورانیم، ۱۰ درصد هیدروژن فلوراید و ۱۰ درصد هوا با ایجاد یک محرک دمایی خطی روی دیواره با روش DSMC را نشان می دهد. با توجه به شکل ۸ ایجاد محرک دمایی روی دیواره باعث ایجاد تغییرات دانسیته روی دیواره شده به گونه ای که تغییرات چگالی روی دیواره به طور خطی از بالا به پایین افزایش یافته است.

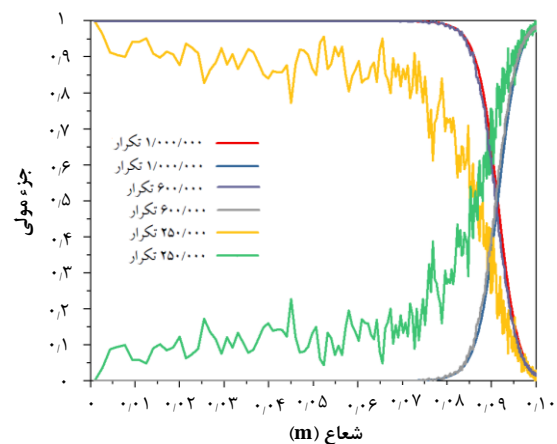
شکل ۹ تغییرات شار جرمی محوری در جهت شعاع در ارتفاع ۱۰ سانتی متری برای مقادیر مختلف گازهای سبک هیدروژن فلوراید و هوا به همراه گاز هگزافلوراید اورانیم با روش DSMC را نشان می دهد. با افزایش مقدار درصد مولی گازهای سبک، شار جرمی محوری در جهت شعاع در نزدیک دیواره (در لایه استوارتسون) کاهش یافته است که این امر باعث کاهش غلظت جز مطلوب در فرایند غنی سازی داخل ماشین سانتریفیوژ می شود.

#### ۴. نتیجه گیری

در داخل یک ماشین سانتریفیوژ به دلیل اعمال نیروی گریز از مرکز ذرات سنگین تر در سمت دیواره روتور و ذرات سبک تر در محور روتور قرار می گیرند. در یک ماشین سانتریفیوژ جرم مولکولی گاز تأثیرات چشم گیری در نحوه شکل گیری تغییرات غلظت داخل یک روتور دارد. اگرچه در حل تحلیلی تغییرات شعاعی غلظت، اثرات واقعی سطح مقطع برخورد، ضریب نفوذ و اثرات ضریب ویسکوزیته در محاسبه قطر مؤثر لحاظ نمی گردد، در روش DSMC تمامی این اثرات به صورت میکروسکوپی لحاظ گردیده است. از این رو می توان گفت که نتایج به دست آمده از روش DSMC نتایج قابل قبول تری نسبت به نتایج حل تحلیلی می باشند. نتایج نشان داد که افزایش حضور گاز سبک باعث کاهش فشار کل و کاهش غلظت جزء سنگین تر (گاز هگزافلوراید اورانیم) در نزدیک دیواره می گردد. با اعمال یک محرک حرارتی بر روی دیواره، می توان یک جریان محوری در درون روتور ایجاد کرد که این جریان محوری باعث تجمع



شکل ۵. تغییرات شار جرمی محوری در جهت شعاع برای مقادیر مختلف گاز سبک هیدروژن فلوراید همراه با گاز هگزافلوراید اورانیم با روش DSMC.



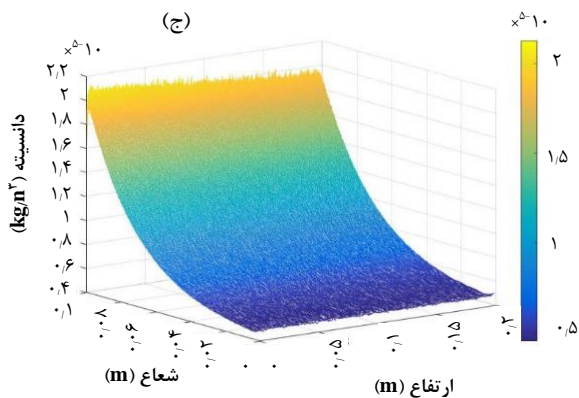
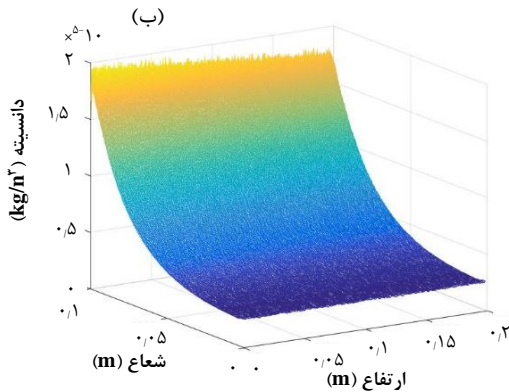
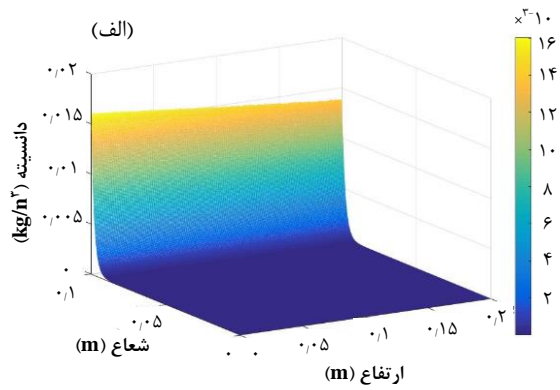
شکل ۶. وابستگی تغییرات غلظت برای گاز ۹۰ درصد گاز هگزافلوراید اورانیم و ۱۰ درصد هیدروژن فلوراید به تعداد تکرار.

با توجه به واکنش ارایه شده در رابطه (۱)، یکی از واکنش های محتمل در ماشین سانتریفیوژ ترکیب گاز هگزافلوراید اورانیم با رطوبت موجود در تجهیزات و تولید گاز هیدروژن فلوراید می باشد که در این پژوهش برای اولین بار تأثیر پروفایل غلظت و جریان در حضور این گاز مورد بررسی قرار گرفته است. هم چنین با توجه به احتمال حضور سایر گازهای سبک نظیر  $O_2$ ،  $N_2$  و غیره، در این مقاله به تأثیر حضور گازهای سبک هیدروژن فلوراید و هوا به همراه گاز هگزافلوراید اورانیم نیز پرداخته شده است.

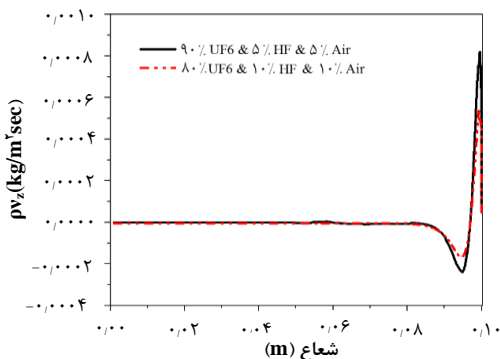
شکل های ۷ الف و ۷ ب به ترتیب نمودار غلظت مخلوط گازی ۹۰ درصد گاز هگزافلوراید اورانیم، ۵ درصد هیدروژن فلوراید و ۵ درصد هوا و مخلوط گازی ۸۰ درصد گاز هگزافلوراید اورانیم، ۱۰ درصد هیدروژن فلوراید و ۱۰ درصد هوا با روش DSMC و روش حل تحلیلی را نشان می دهد. هم چنین نتایج نشان می دهد که نمودار غلظت روش DSMC و تحلیلی در نواحی مرکزی داری اختلاف می باشد و با نزدیک شدن به دیواره سانتریفیوژ این اختلاف کاهش می یابد. هم چنین این اختلاف برای گازهای سبک تر هیدروژن فلوراید و





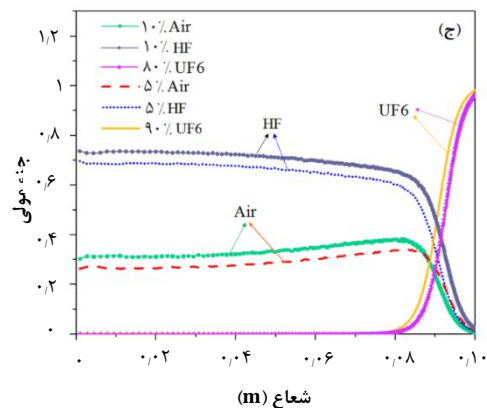
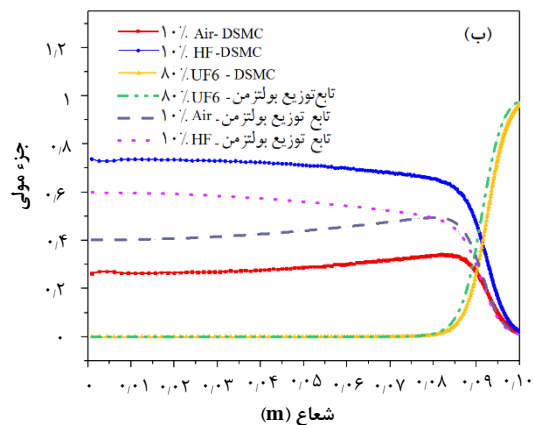
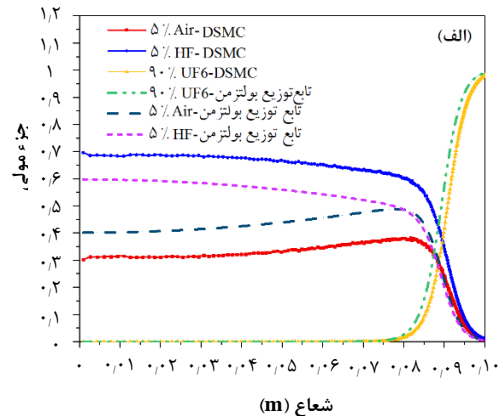


شکل ۸. تغییرات دانسیته مخلوط گازی اجزاء (الف) ۸۰ درصد گاز هگزا فلوراید اورانیم (ب) ۱۰ درصد هیدروژن فلوراید و (ج) ۱۰ درصد هوا با روش DSMC در یک ماشین سانتریفیوژ.



شکل ۹. تغییرات شار جرمی محوری در جهت شعاع در ارتفاع ۱۰ سانتی متری برای مقدار ۵ درصد مولی از گازهای هیدروژن فلوراید و هوا و مقدار ۱۰ درصد مولی از گازهای هیدروژن فلوراید و هوا همراه با گاز هگزا فلوراید اورانیم با روش DSMC.

مولکول‌های سنگین گاز در جهت حرکت جریان در کنار دیواره روتور تا بالای روتور می‌گردد و به همین ترتیب اجزاء سبک‌تر در جهت حرکت جریان در سمت محور روتور تا انتهای جریان قرار می‌گیرند. در نتیجه می‌توان گفت که در یک ماشین سانتریفیوژ با اعمال یک محرک حرارتی بر روی دیواره روتور آن، می‌توان علاوه بر جدایش شعاعی، به یک جدایش محوری نیز دست یافت. حضور گاز سبک همراه با گاز هگزا فلوراید اورانیم باعث کاهش شار جرمی محوری در جهت شعاع سانتریفیوژ می‌گردد و با افزایش میزان گازهای سبک، شار جرمی محوری در لایه استوارتسون کاهش می‌یابد.



شکل ۷. نمودار تغییرات شعاعی غلظت مخلوط گازی (الف) ۹۰ درصد گاز هگزا فلوراید اورانیم، ۵ درصد هیدروژن فلوراید و ۵ درصد هوا، (ب) ۸۰ درصد گاز هگزا فلوراید اورانیم، ۱۰ درصد هیدروژن فلوراید و ۱۰ درصد هوا با روش DSMC و روش حل تحلیلی و (ج) مقایسه دو مخلوط گازی در یک ماشین سانتریفیوژ با روش DSMC.

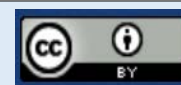


## مراجع

1. M. Khajenoori, et al, *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), 333 (2019).
2. J. Safdari, A. Noroozi, R. Toumari, *Parameters optimization of a counter-current cascade based on using a real coded genetic algorithm*, Separation Science and Technology, **52**(18), 2855-2862 (2017).
3. V.D. Borisevich, et al, *On ideal and optimum cascades of gas centrifuges with variable overall separation factors*, Chemical Engineering Science, **116**, 465-472 (2014).
4. M. Benedict, *Nuclear Chemical Engineering*, Mcgraw-Hill Book Company, Second Edition, chapter 14 (1981).
5. H.G. Wood, J.B. Morton, *Onsager's pancake approximation for the fluid dynamics of a gas centrifuge*, J. Fluid Mech. **101**, 1-31 (1980).
6. K. Cohen, *The Theory of Isotope Separation as Applied to the Large Scale Production of U235*, 103-125 (1951).
7. Soubbaramayer, *Centrifugation*, Applied Physics, **35**, 183-244 (1979).
8. D.R. Olander, *The theory of uranium enrichment by the gas centrifuge*, Progress in Nuclear Energy, **8**(1), 1-33 (1981).
9. M.D. Gunzburger, H.G. Wood, *A finite element method for the Onsager pancake equation*, Computer methods in applied mechanics and engineering, **31**(1), 43-59 (1982).
10. W. Jin, J. Ruud Van Ommen, C.R. Kleijn, *Simulation of atomic layer deposition on nanoparticle agglomerates*, Physics of Fluids, **212**(1), 146-151 (2017).
11. M. Pfeiffer, M.H. Gorji, *Adaptive particle-cell algorithm for Fokker-Planck based rarefied gas flow simulations*, Physics of Fluids, **213**(1), 1-8 (2017).
12. S. Pradhan, V. Kumaran, *The generalized Onsager model for the secondary flow in a high-speed rotating cylinder*, Journal of Fluid Mechanics, **686**(1), 109-159 (2011).
13. M. Khajenoori, et al, *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, **21**(3), 63 (2019).
14. C. Tantos, D. Valougeorgis, A. Frezzotti, *Conductive heat transfer in rarefied polyatomic gases confined between parallel plates via various kinetic models and the DSMC method*, Int. J. Heat Mass Transfer, **88**, 636-651 (2015).
15. G.A. Bird, *The DSMC method*, The University of Sydney, 208-211 (2013).
16. K.C. Tseng, et al, *Simulations of subsonic vortex-shedding flow past a 2D vertical plate in the near-continuum regime by the parallelized DSMC code*, Comp. Phys. Comm, **183**(8), 1596-1608 (2012).
17. P. Barletta, *COOL: A code for dynamic Monte Carlo simulation of molecular dynamics*, Physics of Fluids, **183**(2), 438-439 (2012).
18. P.S. Prasanth, J.K. Kakkassery, *Molecular models for simulation of rarefied gas flows using direct simulation Monte Carlo method*, Fluid Dynamics Research, **40**(4), 233-252 (2008).
19. M. Wang, Z. Li, *Gas mixing in micro channels using the direct simulation Monte Carlo methods*, International Journal of Heat and Mass Transfer, **49**, 1696-1702 (2005).
20. J-S. Wu, K-C. Tseng, Fu-Y Wu, *Parallel three-dimensional DSMC method using mesh refinement and variable time-step scheme*, Physics of Fluids, **162**(1), 166-187 (2004).
21. P. Roblin, F. Doneddu, *Rarifed gas dynamics: 22nd International Symposium*, 169 -173 (2001).
22. G.A. Bird, *Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows*, Oxford University Press, New York, (1994).
23. R.D. Bundy, E.B. Munday, *The Oak Ridge K-25 Site is managed by Martin Marietta Energy Systems, Inc. for the U.S. Department of energy*, (1991).
24. E.R. Elsharkawy, A. Abdien, E.F. Salem, *Risk assessment due to postulated accidental releases of UF<sub>6</sub> and emergency preparedness to mitigate its consequences*, International Journal Of Modern Engineering Research (IJMER), **6**(9), 58-64 (2016).
25. H. Makihara, T. ITO, *Centrifugal separation of uranium isotopes in presence of light gas*, Journal of nuclear science and technology, **26**(11), 1023-1037 (1989).
26. S.R. Auvil, *A General Analysis of Gas Centrifugation with Emphasis on the Countercurrent Production Centrifuge*, (1974).
27. H.G. Wood, T.C. Mason, *Multi-Isotope Separation in a Gas Centrifuge Using Onsager's Pancake Model*, Separation and Science Technology, **31**(9), 1185-1213 (1996).
28. C. Cercignani, *The Boltzmann equation and its applications*, Lectures series in mathematics. **68**, Berlin, New York, (1988).
29. G.J.M. Hagelaar, L.C. Pitchford, *Solving the Boltzmann equation to obtain electron transport coefficients and rate coefficients for fluid models*, Plasma Sources Sci. Technol. **14**, 722-733 (2005).

## COPYRIGHTS

©2021 The author(s). This is an open access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution (CC BY 4.0), which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, as long as the original authors and source are cited. No permission is required from the authors or the publishers.



## استناد به این مقاله

مسعود خواجه نوری، علی حقیقی اصل، سیدجابرصدردی، علی نوروزی (۱۳۹۹)، بررسی پارامترهای هیدرودینامیکی در داخل یک روتور سانتریفیوژ گازی در حضور گازهای سبک هیدروژن فلوراید و هوا با روش‌های DSMC و تابع توزیع بولتزمن، ۹۴، ۱۱۸-۱۲۷

DOI: 10.24200/nst.2020.1176

Url: [https://jonsat.nstri.ir/article\\_1176.html](https://jonsat.nstri.ir/article_1176.html)

