BR9229143

INSTITUTO DE PESQUISAS ENERGÉTICAS E NUCLEARES INIS-BR-2927

AUTARQUIA ASSOCIADA A UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

CALCULO DOS PARÂMETROS DE SEPARAÇÃO DE UMA CENTRÍFUGA A CONTRACORRENTE COM VARIAÇÃO AXIAL DO FLUXO INTERNO

SYLVANA CAVEDON PRESTI MIGLIAVACCA

Dissertação apresentada ao
Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares
como parte dos requisitos para obtenção
do grau de "Mestre - Área Concentração em
Reatores Nucleares de Potência e Tecnologia
do Combustivel Nuclear".

Orientador:
Prof.Dr. Ivo Jordan

SÃO PAULO

1991

À minha família

AGRADECIMENTOS

Agradeço ao Dr. IVO JORDAN, meu orientador, pela sua preciosa atenção, colaboração e encorajamento na organização e elaboração deste trabalho.

Agradeço também ao Dr. OTHON LUIZ PINHEIRO DA SILVA, ao MSc. FERNANDO DA COSTA MAGALHÃES e ao MSc. JOSÉ HENRIQUE BUCHMANN pela autorização a mim concedida para o desenvolvimento desta dissertação.

Agradeço ainda aos colegas do IPEN e da COPESP que colaboraram direta ou indiretamente, de modo especial a MÔNICA DE CARVALHO VASCONCELOS, que possibilitou minha maior dedicação a este trabalho.

Finalmente agradeço à minha família pelo apoio e compreensão durante o período em que me dediquei a este trabalho, de modo especial aos meus pais e ao meu marido.

CÁLCULO DOS PARAMETROS DE SEPARAÇÃO DE UMA CENTRÍFUGA A CONTRACORRENTE COM VARIAÇÃO AXIAL DO FLUXO INTERNO

Sylvana Cavedon Presti Migliavacca

RESUMO

A presente dissertação apresenta uma revisão da teoria da separação isotópica efetuada pela centrífuga a contracorrente. A resolução da equação da difusão e convecção é feita segundo o procedimento estabelecido por ONSAGER-COHEN para o fluxo interno constante ao longo do eixo do rotor e adaptado para a variação axial do fluxo da contracorrente.

Com base neste último equacionamento é estabelecido um programa para o cálculo das composições isotópicas de uma dada centrífuga e de seus parâmetros separativos. Com esse programa é então analisada a variação dos parâmetros separativos de uma centrífuga-modelo com o fluxo de alimentação e as variáveis internas, tais como o corte e o fluxo da contracorrente. Com auxílio dessa análise é efetuada, a seguir, a otimização da referida centrífuga-modelo no sentido de maximizar o seu poder de separação.

O presente procedimento de cálculo é então comparado com resultados publicados e obtidos através de diferentes métodos, resultando em desvios menores que 20%.

CALCULATION OF THE SEPARATIVE PARAMETERS OF A C~~OU~~ounTERCURRENT CENTRIFUGE WITH AN AXIALLY VAR~~I~~YING INTERNAL FLOW

Sylvana Cavedon Presti Migliavacca

ABSTRACT

A review of the isotope separation theory for the countercurrent gas centrifuge is presented. The diffusion-convection equation is solved according to the ONSAGER-COHEN solution for the constant internal flow and adapted to an axially varying countercurrent flow.

Based on that theory, a numerical program is developed for the calculation of the isotopic compositions and the separative parameters of the centrifuge. The influence of the feed flow and the internal parameters, like cut and countercurrent flow, on the separative parameters is then analysed for a model-centrifuge, which afterwards is optimized with respect to its separative power.

Finally, a comparison between the present calculation procedure and some published results, provided by different theories, shows deviations lower then 20%.

SUMÁRIO

1 - INTRODUÇÃO

O enriquecimento isotópico do urânio constitui uma das mais importantes etapas do ciclo do combustível nuclear. Esta etapa efetua basicamente a separação dos isótopos do urânio ^{235}U e ^{238}U com a finalidade de aumentar o teor do isótopo físsil ^{235}U, em um dos compostos do urânio, acima da composição isotópica natural de 0.711%.

Os processos de separação dos isótopos estáveis baseiam-se na diferença entre as propriedades físicas e químicas desses isótopos que dependem da massa. Dentre os processos desenvolvidos para a separação dos isótopos do urânio os mais importantes são: (1) a difusão gasosa, (2) o processo da centrifugação, (3) o processo do bocal de separação (ou "jato centrífugo"), (4) os processos de separação químicos, (5) os processos eletromagnéticos e (6) os processos a laser. Muitos desses processos ocorrem em fase gasosa, onde o gás de processo empregado é o hexafluoreto de urânio UF_6, o único composto do urânio que é gasoso em temperaturas normais.

A tecnologia da difusão gasosa, que é realizada em escala industrial nos Estados Unidos, França, Inglaterra, China e URSS, onde se encontra solidamente estabelecida, está perdendo importância face à tecnologia da centrífuga a gás e dos processos a laser.

O processo da centrífuga a gás está sendo desenvolvido em usinas de escala de laboratório ou piloto, de demonstração e de produção industrial na Inglaterra, Holanda, República Federal Alemã e Japão e está despertando o maior interesse entre os atuais e futuros países separadores dos isótopos do urânio.

Os processos de separação a laser, que junto com o eletromagnético avançado constituem as tecnologias mais modernas de enriquecimento, estão sendo intensamente investigados em quase todos os países interessados no enriquecimento isotópico de urânio, devido às atraentes possibilidades que esses processos apresentam.

A separação dos isótopos de urânio por centrifugação foi feita pela primeira vez, em 1940, com as centrífugas desenvolvidas por Jesse W. Beams da Universidade de Virginia. No entanto, naquela época, a tecnologia de elementos em altas velocidades de rotação não era desenvolvida o suficiente para a produção em larga escala de urânio enriquecido. Por isso, dentro do Projeto Manhattan, o processo da centrífuga foi abandonado em 1943 em favor do processo da difusão gasosa. No entanto, a teoria básica da centrífuga a gás continuou sendo desenvolvida durante esse período.

Na Alemanha W. E. Groth conseguiu aprimorar o tamanho, velocidade e eficiência da centrífuga a gás durante um período de muitos anos depois da 2ª Guerra Mundial. Ao final dos anos 50, Gernot Zippe, que havia construído centrífugas a gás e realizado experimentos de separação isotópica do urânio na URSS, tomou parte de um programa experimental na Universidade de Virgínia, onde reproduziu seu trabalho realizado na URSS. Ele desenvolveu uma centrífuga leve e pequena porém muito estável e de longa durabilidade, da qual descendem os projetos das centrífugas modernas.

A partir de então se iniciaram os programas de implantação de usinas para produção industrial de urânio enriquecido pelo processo de centrifugação nos Estados Unidos e na República Federal Alemã. Nessa mesma época, a partir de 1960, a Comissão Norte-Americana de Energia Atômica decidiu proibir a publicação de qualquer informação técnica ou operacional relativa às centrífugas em desenvolvimento nos Estados Unidos. A mesma proibição foi estabelecida um pouco mais tarde na Alemanha, na Inglaterra e na Holanda. A partir de então as únicas informações sobre o assunto que se encontram publicadas são de caráter exclusivamente teórico ou informativo.

Também a partir de 1960, o processo da centrifugação começou a ser investigado no Japão, onde foi instituído como sendo o "projeto nacional de enriquecimento de urânio" a partir de 1970.

Em 1970 a República Federal Alemã, a Inglaterra e a Holanda, mediante o Tratado de Almelo, criaram o consórcio URENCO/CENTEC com a finalidade de realizar o desenvolvimento conjunto do processo da centrífuga a gás em escala industrial.

Em 1958 três centrífugas do modelo ZG3, desenvolvidas por Groth e seus colaboradores, foram instaladas no Instituto de Pesquisas Tecnológicas em São Paulo. Com isso o processo do enriquecimento isotópico por centrifugação começou a ser pesquisado no Brasil pelo Dr. Ivo Jordan e colaboradores [15].

A teoria da separação isotópica realizada pela centrífuga a contracorrente aborda dois aspectos distintos, que se complementam, a saber: (a) a análise da separação resultante da ação combinada da entre a contracorrente imposta e a força centrífuga gerada no movimento de rotação, onde se considera o gás de processo como uma mistura binária de dois isótopos, e (b) a análise da gás-dinâmica da circulação gasosa em contracorrente, especificada a natureza física dos meios responsáveis pela sua criação, onde o gás é considerado como um único fluido.

Uma vez definidos os parâmetros externos de uma centrífuga, tais como o comprimento, o diâmetro e a velocidade de rotação do rotor, a otimização de uma centrífuga consiste em encontrar a melhor combinação dos parâmetros internos que conduz ao máximo poder de separação. Isto é relativamente fácil de ser feito em teoria, mas somente com muito esforço pode ser realizado experimentalmente. Os parâmetros internos são definidos pelas condições de operação dadas, pelos fluxos de alimentação e de extração das frações enriquecida e empobrecida, pela posição axial na qual a alimentação é introduzida no rotor e pelas características do fluxo da contracorrente.

O cálculo teórico da otimização do desempenho de uma centrífuga é relativamente simples, pois os parâmetros internos citados acima são dados de entrada para os cálculos. Na prática, ou experimentalmente, cada variação da posição axial da alimentação requer um novo sistema de alimentação e de extração. Quanto à otimização da contracorrente, nas centrífugas, de um modo geral, ocorrem três modos de geração da circulação interna, a saber, (1) uma pequena contribuição proveniente da injeção do fluxo de alimentação no interior do rotor, (2) a contracorrente gerada pela presença de um coletor ou um obstáculo estacionário nas proximidades da tampa da qual é extraído o rejeito da separação e (3) a circulação interna de geração térmica, provocada por um gradiente, normalmente linear, de temperatura ao longo da parede do rotor ou através de uma diferença de temperatura entre as tampas do rotor. Assim, otimizar a contracorrente significa encontrar a melhor combinação entre os mecanismos térmicos e mecânicos de geração da contracorrente, e não somente a soma dos efeitos responsáveis pela circulação interna.

Outra dificuldade está em relacionar os parâmetros utilizados para descrever a contracorrente com os mecanismos físicos empregados na centrífuga (tamanho, forma e localização do coletor, principalmente). Quanto a esse aspecto, nunca se publicou informação alguma.

Na realização de ensaios experimentais com centrífugas, ou na aplicação de outros métodos de cálculo, aparece ainda um outro parâmetro interno, a saber, a pressão do gás de processo na parede do rotor, que está relacionada com os mecanismos de geração da contracorrente e com os fluxos de alimentação e extração da centrífuga.

Dessas considerações resulta então que é importante conhecer o desempenho separativo de uma centrífuga e o seu ponto ótimo de operação através de cálculos teóricos antes de proceder a uma otimização experimental.

Em vista disso, o presente trabalho tem por objetivo estabelecer um procedimento de cálculo para a obtenção dos parâmetros separativos de uma centrífuga a contracorrente quando existe variação axial do fluxo interno ao longo do seu eixo.

Desta forma é inicialmente apresentada a teoria que descreve a separação isotópica realizada pela centrífuga a contracorrente. Nesta análise, onde é considerada a variação axial do fluxo da contracorrente, foi adotada uma função de fluxo definida empiricamente a partir de estudos gás-dinâmicos do escoamento interno do gás de processo.

O cálculo das composições isotópicas no interior da centrífuga, segundo a teoria apresentada, bem como o cálculo dos parâmetros de separação, representados pelos fatores de enriquecimento β, de empobrecimento γ e de separação α, assim como pelo poder ou capacidade de separação δU e pela eficiência de separação e, é então realizado através de um programa numérico. Esses parâmetros são calculados para uma centrífuga-modelo, adotando-se diferentes valores para as variáveis de fluxo que descrevem as condições de operação, a saber o fluxo de alimentação F e o corte ϑ, assim como para os coeficientes da intensidade da contracorrente.

2 - FUNDAMENTOS DA TEORIA DE SEPARAÇÃO ISOTÓPICA

A separação dos isótopos de urânio, assim como a separação de outros isótopos estáveis, independentemente do processo utilizado, pode ser representada por uma teoria completamente geral que se aplica a qualquer mistura isotópica binária. Uma vez que as propriedades físicas e químicas dos isótopos são muito próximas, a separação realizada em uma única vez é, de modo geral, muito pequena. Por isso se faz necessária a ligação em série de vários dispositivos de separação com o objetivo de multiplicar a separação obtida. A esse conjunto de dispositivos ligados entre si para aumentar a separação chamamos de cascata de separação de isótopos. A teoria da separação dos isótopos do urânio assim realizada está descrita em detalhes nas obras de COHEN [5] e de BENEDICT et al.[1].

O menor elemento de uma usina de separação de isótopos que processa material efetuando alguma separação é chamado unidade ou elemento de separação. No caso da separação do urânio pelo processo da centrifugação a gás, uma unidade de separação é representada por uma centrífuga. Um grupo de unidades de separação ligadas em paralelo define um estágio. No estágio todas as unidades de separação são alimentadas com material de mesma composição isotópica e produzem individualmente frações enriquecidas ou produtos e frações empobrecidas ou rejeitos com a mesma composição. A ligação em série de um grupo de estágios forma então uma cascata de separação isotópica.

2.1- CARACTERÍSTICAS DA UNIDADE DE SEPARAÇÃO

O elemento de separação mais simples, representado na Figura 1, é aquele que recebe um fluxo de alimentação F da mistura isotópica binária de composição x_F do isótopo desejado (^{235}U) e fornece duas correntes, uma, a do produto, parcialmente enriquecida no isótopo desejado com fluxo P e composição x_p e outra parcialmente empobrecida no isótopo desejado, chamada corrente de rejeito, de fluxo W e composição x_w.

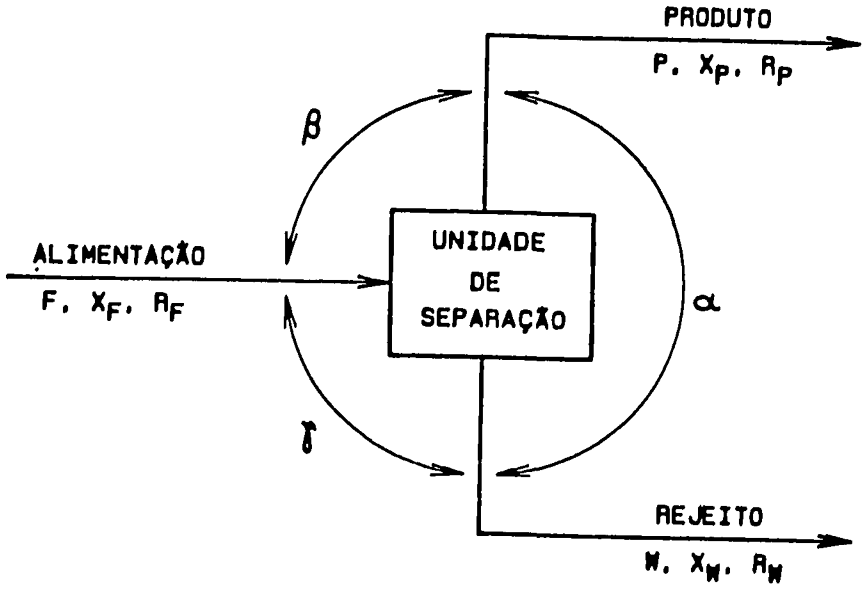


Figura 1: Elemento de separação simples

A razão de abundância, definida pela relação entre as composições do componente desejado e a do outro componente $R=x/(1-x)$ é denotada por R_F para a corrente da alimentação, R_p para a do produto e R_w para a do rejeito.

Definimos agora o fator de enriquecimento β pela relação

$$\beta = \frac{R_p}{R_F} = \frac{x_p/(1-x_p)}{x_F/(1-x_F)} \qquad (01)$$

o fator de empobrecimento γ

$$\gamma = \frac{R_F}{R_w} = \frac{x_F/(1-x_F)}{x_w/(1-x_w)} \qquad (02)$$

e finalmente, o fator de separação α

$$\alpha = \frac{R_p}{R_w} = \frac{x_p/(1-x_p)}{x_w/(1-x_w)} = \beta \times \gamma \qquad (03)$$

Chamamos de processo de separação simétrico o processo no qual os fatores de enriquecimento e de empobrecimento são iguais, $\beta=\gamma$ e portanto, $\alpha=\beta^2$, e denotamos os parâmetros para este caso por um *.

Outra propriedade fundamental da unidade de separação, a qual está relacionada não a grandezas separativas, mas aos fluxos é o corte θ. Essa propriedade é definida como sendo a relação entre o fluxo da corrente enriquecida e o fluxo da alimentação.

$$\theta = P/F = P/(P+W) \qquad (04)$$

As equações de balanço material da mistura e do isótopo desejado, respectivamente, são:

$$F = P + W \qquad (05)$$

$$F\ x_F = P\ x_P + W\ x_W \qquad (06)$$

2.2- PODER DE SEPARAÇÃO

A unidade de separação é caracterizada pelas variáveis separativas (fator de separação α ou fator de enriquecimento β) e pelas variáveis de fluxo (fluxo de alimentação F e corte θ). No entanto, nenhuma delas representa individualmente o desempenho da unidade de separação. Assim é interessante definir uma propriedade que englobe as grandezas separativas e de fluxo e que ao mesmo tempo esteja relacionada ao trabalho separativo útil produzido pela unidade de separação. Essa propriedade, chamada poder ou capacidade de separação, foi definida por DIRAC mediante a introdução do conceito de fluxo de valor, considerando que a unidade de separação produz uma variação no valor de uma quantidade de material separado. Sendo o fluxo de valor uma função U que representa o valor de uma dada quantidade de material separado, a produção de valor resultante da separação de isótopos por um elemento é dada pela variação da função U.

O fluxo de valor U é dado pelo produto do fluxo de material e uma <u>função de valor</u> V(x). Então no elemento de separação vamos ter os fluxos de valor $U_F=FV(x_F)$, $U_P=PV(x_P)$ e $U_W=WV(x_W)$ para as correntes de alimentação, produto e rejeito, respectivamente. A variação do valor produzida pelo elemento de separação é então o poder de separação δU o qual é dado pelo balanço dos fluxos de valor, a saber,

$$\delta U = PV(x_P) + WV(x_W) - FV(x_F) \qquad (07)$$

A função de valor V(x) é uma função somente da composição x e é adimensional, definida pela equação

$$V(x) = (2x-1)\ \ln\left[\frac{x}{1-x}\right] \qquad (08)$$

Esta função é simétrica em x=0.5, onde ela assume valor zero. É positiva para os demais valores de composição e aumenta tendendo ao infinito quando x se aproxima de 0 e de 1. A função V(x) permite que o aumento de valor δU efetuado pela unidade de separação seja independente da concentração isotópica do material em processamento.

Resumindo, a variação do fluxo de valor quando um fluxo de uma dada composição isotópica é fisicamente separado na unidade de separação em dois fluxos de duas composições diferentes, apresenta um significado físico, a saber, a capacidade ou poder de separação δU.

3 - TEORIA DA CENTRÍFUGA A CONTRACORRENTE

3.1- PRINCIPIO DO PROCESSO

A Figura 2 mostra um esquema de uma centrífuga a contracorrente. A centrífuga consiste de um cilindro vertical relativamente longo e de parede fina, feito de um material resistente a altas velocidades de rotação, girando ao redor de seu eixo em altas velocidades dentro de um recipiente em vácuo. O gás no interior desse cilindro, denominado rotor, está sujeito à ação de uma aceleração centrífuga milhares de vezes maior que a aceleração da gravidade. Assim se estabelece uma distribuição de pressões proveniente da ação do campo centrífugo sobre a mistura gasosa. Essa distribuição de pressão, manifestada na forma de um aumento radial de pressão no sentido do eixo para a parede do rotor, ou seja na forma de um gradiente de pressão dp/dr, é diferente para os diferentes isótopos, uma vez que a ação do campo centrífugo depende da massa. Resulta então que a mistura gasosa existente no interior do rotor sofre uma separação parcial de seus isótopos, havendo enriquecimento parcial do isótopo leve ou desejado (^{235}U) na região do eixo e empobrecimento junto à parede do rotor.

Induzindo um fluxo de contracorrente vertical entre a região empobrecida no isótopo desejado ^{235}U, perto da parede do rotor, e a corrente enriquecida perto do eixo, obtém-se uma multiplicação do efeito elementar de separação radial. Assim a diferença entre a composição do topo e do fundo do rotor da centrífuga se torna maior do que a diferença entre as duas correntes na mesma posição axial. Usualmente a contracorrente é gerada por um ou ambos mecanismos básicos: (a) por um coletor estacionário em uma das extremidades do rotor e uma placa rotativa, girando junto com o rotor, na outra extremidade; e (b) por correntes de convecção produzidas através do aquecimento de uma extremidade do rotor e resfriamento da outra ou através do estabelecimento de um gradiente de temperatura ao longo da parede do rotor.

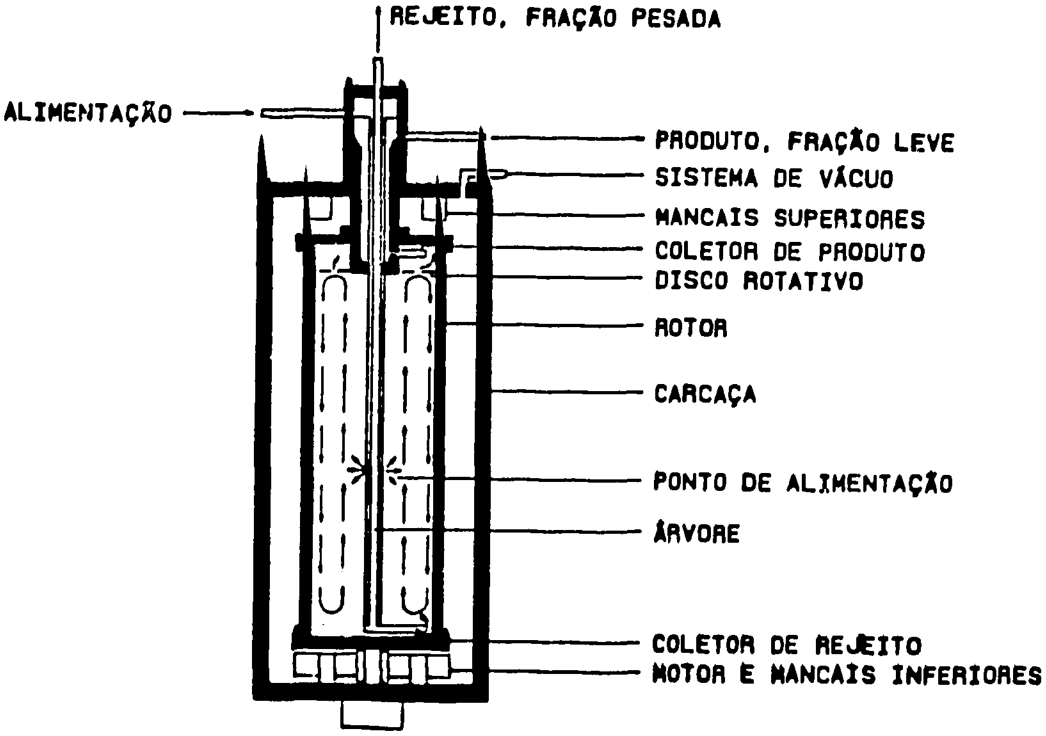


Figura 2: Esquema de uma centrífuga a contracorrente (Extraída de BENEDICT et allii [1])

3.2- FATOR DE SEPARAÇÃO DE EQUILÍBRIO

Consideremos uma centrífuga cujo rotor é simplesmente um cilindro ôco, fechado nas extremidades, de raio a e comprimento Z, que gira uniformemente em torno do seu eixo vertical com elevada velocidade angular ω (rad/s), sendo $\omega=2\Pi f$, onde f é a freqüência de rotação (Hz ou rotações/s) e que contém como gás de processo o hexafluoreto de urânio UF_6, de massa molecular M=0.352 kg/mol. Admitiremos ainda que: (a) o gás de processo segue a lei do gas ideal nas condições de pressão e temperatura que prevalecem no interior do rotor, (b) a temperatura do gás é constante e (c) o movimento do gás no interior se dá com a mesma velocidade angular ω do rotor, isto é, satisfaz a condição de "movimento de corpo rígido". Por conveniência, vamos adotar um sistema de coordenadas cilíndricas (r, θ, z) girando com o gás e com origem no eixo de rotação. Devido ao movimento de rotação, atua sobre o gás a força centrífuga por unidade de massa $\omega^2 r$, a qual estabelece na direção radial o gradiente de pressão $\partial p / \partial r$

$$\frac{\partial p}{\partial r} = \rho \omega^2 r \tag{09}$$

onde $\underline{\rho}$ é a densidade do gás no raio r.

Combinando-se essa equação com a do gás ideal

$$p = \rho \frac{R.T}{M} \tag{10}$$

onde $\underline{T}$ é a temperatura absoluta do gás (K) e $\underline{R}$ é a constante dos gases R=8.314 J/K.mol, resulta que o gradiente de densidade ao longo do raio é dado por

$$\frac{\partial \rho}{\partial r} = \frac{\rho M}{RT} \omega^2 r \tag{11}$$

A integração entre $\underline{0}$ e $\underline{r}$ da equação (11) fornece a distribuição das densidades do gás no campo centrífugo

$$\rho(r) = \rho(0) \exp\left[\frac{M(\omega r)^2}{2RT}\right] \tag{12}$$

onde $\rho(r)$ e $\rho(0)$ são as densidades do gás no raio r e no eixo do rotor (r=0) respectivamente. Da mesma forma, utilizando a equação do gás ideal, temos a distribuição das pressões, que é simplesmente a distribuição de Boltzmann no campo centrífugo

$$p(r) = p(0) \exp\left[\frac{M(\omega r)^2}{2RT}\right] \tag{13}$$

Quando r=a, resulta diretamente

$$p_a = p_o \exp\left[\frac{M(\omega a)^2}{2RT}\right] \qquad (14)$$

onde p_a é a pressão do gás na parede do rotor e p_o, no eixo.

Considerando agora o gás de processo como uma mistura binária de isótopos gasosos, onde x é a fração molar do isótopo leve ou desejado, de massa molecular M_1. O outro isótopo, de massa M_2, tem então fração molar de (1-x). As pressões parciais dos dois componentes são dadas de acordo com a lei de Dalton, por

$$p_1 = xp \qquad (15)$$

$$p_2 = (1-x)p \qquad (16)$$

onde p é a pressão total da mistura $p=p_1+p_2$.

Aplicando a equação (13) para os dois componentes resulta

$$p_1(r) = p_1(0) \exp\left[\frac{M_1(\omega r)^2}{2RT}\right] = x\ p(r) \qquad (17)$$

$$p_2(r) = p_2(0) \exp\left[\frac{M_2(\omega r)^2}{2RT}\right] = (1-x)\ p(r) \qquad (18)$$

Dividindo uma equação pela outra vamos ter a distribuição da razão de abundância molar na direção radial do rotor

$$\left[\frac{x}{1-x}\right]_r = \left[\frac{x}{1-x}\right]_{r=o} \exp\left[\frac{(M_1-M_2)(\omega r)^2}{2RT}\right] \qquad (19)$$

Por definição o fator de separação radial de equilíbrio α_o é dado por

$$\alpha_o = \frac{[x/(1-x)]_{r=o}}{[x/(1-x)]_{r=a}} \qquad (20)$$

de modo que da equação (19) resulta

$$\alpha_o = \exp\left[\frac{\Delta M(\omega a)^2}{2RT}\right] \tag{21}$$

onde $\Delta M = M_2 - M_1 = 0.003$ kg/mol é a diferença entre as massas moleculares de $^{238}UF_6$ e $^{235}UF_6$.

Analogamente o fator de separação radial local de equilíbrio $\alpha_o(r)$, isto é, o fator de separação radial de equilíbrio entre os raios r e a, é definido por

$$\alpha_o(r) = \frac{[x/(1-x)]_r}{[x/(1-x)]_a} = \exp\left[\frac{\Delta M(\omega a)^2}{2RT}\left(1 - \frac{r^2}{a^2}\right)\right] \tag{22}$$

sendo $\omega a = v$, a velocidade periférica do rotor.

Convém salientar que os fatores de separação dados pelas equações (21) e (22) se referem ao estado de equilíbrio já considerado, o qual ocorre no interior da centrífuga quando não há alimentação nem extração do gás do rotor.

3.3- EQUAÇÃO DA DIFUSÃO E CONVECÇÃO

Quando o equilíbrio do campo centrífugo da mistura gasosa no interior da centrífuga é perturbado por exemplo, pela injeção da alimentação e extração de produto e rejeito , é estabelecido na centrífuga um escoamento do gás de processo nas direções axial e radial. O movimento do gás é então determinado pelas componentes de velocidade $u=u(r,z)$ na direção radial, $w=w(r,z)$ na direção axial e $v=0$ na direção azimutal, admitindo que o gás, como um todo, gira com a velocidade angular do rotor. Este movimento do gás causa uma perturbação contínua na distribuição da concentração de equilíbrio, provocando o transporte do material no sentido de restabelecer o equilíbrio.

O transporte do componente leve (ou desejado) é descrito pelo vetor densidade do fluxo $\vec{J}$. Considerando o movimento nas direções axial e radial, o vetor $\vec{J}$ é definido pelas densidades de fluxo do componente leve na direção radial $\vec{J}_r$ e na direção axial $\vec{J}_z$ ($\vec{J}=\vec{J}_r+\vec{J}_z$). Cada uma dessas componentes é composta por um termo difusivo J_d, que descreve o fluxo de difusão do componente leve ou desejado em relação à velocidade média da mistura gasosa e por um termo convectivo J_c, que representa o fluxo do componente leve devido ao movimento da mistura como um todo.

Considerando o elemento de volume anular <u>dV</u> de altura <u>dz</u> e espessura <u>dr</u>, as densidades de fluxo convectivas que atravessam esse volume são

$$J_{r,c} = \rho x u \tag{23}$$

$$J_{z,c} = \rho x w \tag{24}$$

Então levando-se em conta as componentes difusivas $J_{r,d}$ e $J_{z,d}$ as densidades de fluxo do isótopo desejado nas direções radial e axial são

$$J_r = J_{r,d} + \rho u x \tag{25}$$

$$J_z = J_{z,d} + \rho w x \tag{26}$$

Para a obtenção do termo difusivo na direção radial $J_{r,d}$, consideremos inicialmente a condição de equilíbrio do campo centrífugo, onde o gás gira com velocidade $v=\omega r$, e não há movimento radial do gás ($u=0$). Da equação (25) resulta

$$(J_r)_{eq} = (J_{r,d})_{eq} \tag{27}$$

No interior do campo centrífugo são observados dois fenômenos de transporte distintos: (a) o transporte do gás devido ao campo estabelecido, também chamado de "difusão de pressão", que provoca o deslocamento das moléculas do eixo para a periferia estabelecendo o gradiente de densidade $\partial\rho/\partial r$ e (b) o transporte do gás através da difusão comum ou molecular que desloca as moléculas em sentido oposto, tendendo a destruir o gradiente de densidade criado. No equilíbrio centrífugo os dois mecanismos de transporte são mutuamente contrabalançados. Assim a densidade de fluxo da difusão de pressão $(J'_{r,d})_{eq}$ na direção radial determinada pelo campo centrífugo é igual e de sinal contrário à densidade de fluxo da difusão comum $(J''_{r,d})_{eq}$,

$$(J_{r,d})_{eq} = (J'_{r,d})_{eq} + (J''_{r,d})_{eq} = 0 \qquad (28)$$

A densidade de fluxo da difusão comum é dada pela primeira lei de Fick através da expressão

$$(J''_{r,d})_{eq} = -\rho D\left(\frac{\partial x}{\partial r}\right)_{eq} \qquad (29)$$

onde D é o coeficiente de difusão mútua dos dois componentes da mistura gasosa. O produto do coeficiente de difusão mútua pela densidade ρD é dado pela expressão [12]

$$\rho D = 3.254515\ T^{0.937} \quad (kg/m.a) \qquad (30)$$

Assim na condição de equilíbrio no campo centrífugo a equação (28) fica

$$(J'_{r,d})_{eq} = -(J''_{r,d})_{eq} = \rho D\left(\frac{\partial x}{\partial r}\right)_{eq} \qquad (31)$$

O gradiente de concentração no equilíbrio $(\partial x/\partial r)_{eq}$ é obtido a partir da equação (19), derivando-se em relação a r, onde obtemos

$$\frac{\partial\ \ln[x/(1-x)]}{\partial r} = -\frac{\Delta M\omega^2 r}{RT} \qquad (32)$$

que fornece diretamente

$$\left[\frac{\partial x}{\partial r} \right]_{eq} = - \frac{\Delta M \omega^2 r x (1-x)}{RT} \qquad (33)$$

Substituindo a expressão (33) do gradiente de concentração de equilíbrio na equação (31), obtemos a densidade de fluxo do isótopo desejado devido à difusão de pressão $(J'_{r,d})_{eq}$

$$(J'_{r,d})_{eq} = - \frac{\rho D \; \Delta M \; \omega^2 r x (1-x)}{RT} \qquad (34)$$

Quando no interior do rotor ocorre o movimento do gás nas direções axial e radial, o equilíbrio do campo centrífugo é perturbado. Nessas condições a equação (34) continua representando a densidade de fluxo da difusão de pressão na direção radial, mas o gradiente de concentração da equação (29) deixa de ser o de equilíbrio e a densidade de fluxo da difusão comum é dada pela 1ª lei de Fick

$$J''_{r,d} = -\rho D \left(\frac{\partial x}{\partial r} \right) \qquad (35)$$

sendo $(\partial x/\partial r) \neq (\partial x/\partial r)_{eq}$. Neste caso, o termo difusivo da componente radial da densidade de fluxo do isótopo leve, expresso pela soma $J_{r,d} = J'_{r,d} + J''_{r,d}$ é dado por

$$J_{r,d} = - \frac{\rho D \Delta M \omega^2 r x (1-x)}{RT} - \rho D \left(\frac{\partial x}{\partial r} \right) \qquad (36)$$

e a componente radial da densidade de fluxo J_r de acordo com a equação (36) se torna

$$J_r = - \rho D \left[\frac{\Delta M \; \omega^2 r x (1-x)}{RT} + \frac{\partial x}{\partial r} \right] + \rho u x \qquad (37)$$

Na direção axial, o termo difusivo da densidade de fluxo $J_{z,d}$ é expresso diretamente pela primeira lei de Fick, uma vez que na direção axial não há ação do campo centrífugo

$$J_{z,d} = -\rho D\left[\frac{\partial x}{\partial z}\right] \qquad (38)$$

Desta forma a componente axial da densidade de fluxo se torna

$$J_z = -\rho D \frac{\partial x}{\partial z} + \rho w x \qquad (39)$$

A equação da continuidade para a densidade de fluxo do isótopo desejado $\vec{J}$ no estado estacionário é dada pela expressão

$$\nabla . \vec{J} = \mathrm{div}\ \vec{J} = 0 \qquad (40)$$

que em coordenadas cilíndricas, considerando o movimento do gás nas direções radial e axial com $J_\theta=0$ se torna

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left[rJ_r\right] + \frac{\partial J_z}{\partial z} = 0 \qquad (41)$$

Substituindo as expressões das densidades de fluxo nas direções radial (37) e axial (39) resulta a equação fundamental do transporte por difusão e convecção

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left\{-r\rho D\left[\frac{\Delta M\ \omega^2 r x(1-x)}{RT} + \frac{\partial x}{\partial r}\right] + r\rho u x\right\} + \frac{\partial}{\partial z}\left[-\rho D\frac{\partial x}{\partial z} + \rho w x\right] = 0 \qquad (42)$$

Esta equação descreve a distribuição da concentração x do isótopo desejado de uma mistura isotópica binária no estado estacionário para qualquer centrífuga onde o gás de processo se movimenta nas direções radial e axial.

3.3.1- Solução da Equação da Difusão e Convecção

Partindo da equação fundamental da difusão e convecção, admitiremos três hipóteses fundamentais:

H1: o gás de processo como um todo não apresenta movimento na direção radial, de modo que a componente da velocidade na direção radial $u=0$ e portanto o termo convectivo da densidade de fluxo radial é $\rho u x=0$;

H2: a temperatura do gás de processo é constante em toda a centrífuga (centrífuga isotérmica);

H3: o produto da densidade pelo coeficiente de difusão mútua ρD não varia com a pressão do gás no interior do rotor, mantida constante a temperatura.

A primeira hipótese considera a chamada centrífuga de vaso longo na qual o comprimento do rotor Z é grande em relação ao raio ($Z/a \gg 1$) e conseqüentemente o efeito nas tampas pode ser desprezado.

Com essas hipóteses a equação (42) se simplifica para

$$-\frac{\rho D}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left[\frac{\Delta M\ \omega^2 r^2 x(1-x)}{RT} + r\frac{\partial x}{\partial r}\right] - \rho D\frac{\partial^2 x}{\partial z^2} + \frac{\partial}{\partial z}(\rho w x) = 0 \qquad (43)$$

As condições de contorno da equação (43) são as seguintes:

a) na direção radial: no eixo e na parede do rotor a densidade de fluxo radial $J_r = 0$

$$r=0: \qquad \frac{\partial x}{\partial r} = 0 \qquad (44.a)$$

$$r=a: \qquad \frac{\partial x}{\partial r} + \frac{\Delta M\ \omega^2 a x(1-x)}{RT} = 0 \qquad (44.b)$$

b) na direção axial: nas tampas superior e inferior, o fluxo axial do componente leve é o fluxo do produto e do rejeito respectivamente extraído da centrífuga

$$z=Z: \qquad Px_P = \int_0^a J_z 2\Pi r\ dr \qquad (45.a)$$

$$z=0: \qquad Wx_W = \int_0^a J_z 2\Pi r\ dr \qquad (45.b)$$

Finalmente, devemos levar em conta que a composição da alimentação x_F está relacionada com as composições do produto x_P e do rejeito x_W pelo balanço de massa do componente desejado:

$$x_r = \theta x_p + (1-\theta)x_w \qquad (48)$$

A equação (43) juntamente com as condições de contorno (44) e (45) descrevem completamente a distribuição da concentração x do componente leve na centrífuga a contracorrente. No entanto não existe solução analítica exata para esta equação diferencial e a solução numérica exige o conhecimento da densidade de fluxo axial ρw que é o produto da densidade do gás ρ pela componente da velocidade do fluido na direção axial w.

-SOLUÇÃO DE ONSAGER-COHEN

Esta equação foi resolvida por COHEN [5], baseando-se no método utilizado por FURRY, JONES e ONSAGER [11] para a coluna termo-difusora. Por isso essa solução é conhecida por "equação de Onsager-Cohen".

Inicialmente Cohen admitiu as seguintes hipóteses simplificadoras:

H4: o gradiente da concentração do isótopo leve na direção radial $(\partial x/\partial r)$, ou seja, a variação de x com r, é muito menor que o gradiente axial $(\partial x/\partial z)$, de modo que a concentração x pode ser considerada independente de r, e tratada como um valor médio $\bar{x}$ em relação a r, que se torna função apenas de z;

H5: em decorrência da hipótese anterior, a derivada parcial $\partial x/\partial z$ pode ser aproximada por dx/dz, sendo x o valor médio considerado;

H6: a segunda derivada de x em relação a z é desprezada por ser um termo de segunda ordem $(\partial^2 x/\partial z^2=0)$;

H7: a densidade de fluxo ρw da mistura gasosa depende apenas da coordenada radial; esta hipótese considera que a intensidade e o perfil da contracorrente permanecem constantes ao longo do eixo do rotor.

Com essas hipóteses a equação (43) se torna

$$\rho w \frac{dx}{dz} = \frac{\rho D}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[\frac{\Delta M \ \omega^2 r^2 x(1-x)}{RT} + r \frac{\partial x}{\partial r} \right] \tag{47}$$

Multiplicando a equação (47) por <u>rdr</u>, pode-se integrá-la no intervalo r'=0 a r'=r segundo

$$\frac{1}{\rho D} \frac{dx}{dz} \int_0^r \rho w r' dr' = r \frac{\partial x}{\partial r} + \frac{\Delta M \ \omega^2 r^2 x(1-x)}{RT} \tag{48}$$

de modo a fornecer diretamente o gradiente de concentração radial da centrífuga a contracorrente, segundo

$$\frac{\partial x}{\partial r} = \frac{1}{r} \frac{1}{\rho D} \frac{dx}{dz} \int_0^r \rho w r' dr' - \frac{\Delta M \ \omega^2 r x(1-x)}{RT} \tag{49}$$

onde está implícito que $r(\partial x/\partial r)=0$ para r'=0.

Podemos definir agora a <u>função de fluxo</u> F(r) por

$$F(r) = 2\Pi \int_0^r \rho w r' dr' \tag{50}$$

que representa o fluxo ascendente da contracorrente entre o eixo (r=0) e o raio r, e

$$\frac{\partial F(r)}{\partial r} = 2\Pi r \rho w \tag{51}$$

sendo

$F(0)=0$ (52.a)

$F(a)=P$ na seção de enriquecimento (52.b)

$F(a)=-W$ na seção de recuperação (52.c)

Introduzindo a função de fluxo na expressão (49) do gradiente de concentração radial resulta

$$\frac{\partial x}{\partial r} = - \frac{\Delta M \ \omega^2 r x(1-x)}{RT} + \frac{1}{2\pi \rho D} \frac{dx}{dz} \frac{F(r)}{r} \tag{53}$$

Partindo agora da condição de contorno (45.a), que representa o transporte axial "líquido" do componente leve na seção de enriquecimento entre o ponto de alimentação e a tampa superior, e substituindo nela a expressão de J_z da equação (39)

$$Px_p = -2\Pi\rho D\int_0^a \frac{dx}{dz}\, r dr + 2\Pi \int_0^a \rho w r x dr \tag{54}$$

Introduzindo aí a função de fluxo F(r)

$$Px_p = -2\Pi\rho D\, \frac{dx}{dz} \int_0^a r dr + \int_0^a \frac{\partial F(r)}{\partial r}\, x dr \tag{55}$$

a resolução através da integração por partes fornece

$$Px_p = -\Pi\rho D a^2\, \frac{dx}{dz} + x(a)F(a) - \int_0^a F(r)\, \frac{\partial x}{\partial r} dr \tag{56}$$

levando em conta a Eq.(52.b) e aproximando x(a) pelo valor médio x vem

$$Px_p = -\Pi\rho D a^2\, \frac{dx}{dz} + Px - \int_0^a F(r)\, \frac{\partial x}{\partial r} dr \tag{57}$$

Introduzindo aí a expressão (53) do gradiente de concentração radial

$$P(x_p - x) = -\Pi\rho D a^2 \frac{dx}{dz} + \frac{\Delta M\omega^2 x(1-x)}{RT} \int_0^a F(r) r dr - \frac{1}{2\pi\rho D}\, \frac{dx}{dz} \int_0^a \frac{[F(r)]^2}{r}\, dr \tag{58}$$

A equação acima, que representa a condição de contorno na tampa superior com a introdução da expressão do gradiente radial de concentração, pode ser colocada na forma:

$$\left[\frac{1}{2\pi\rho D} \int_0^a \frac{[F(r)]^2}{r} dr + \Pi\rho D a^2\right] \frac{dx}{dz} = \frac{\Delta M\omega^2 x(1-x)}{RT} \int_0^a F(r) r dr - P(x_p - x) \tag{59}$$

Definindo de acordo com Cohen

$$C_1 = \frac{\Delta M\omega^2}{RT} \int_0^a F(r) r dr \tag{60}$$

$$C_2 = \Pi\rho Da^2 \qquad (61)$$

$$C_3 = \frac{1}{2\pi\rho D}\int_0^a \frac{[F(r)]^2}{r}dr \qquad (62)$$

$$C_5 = C_2 + C_3 = \Pi\rho Da^2 + \frac{1}{2\pi\rho D}\int_0^a \frac{[F(r)]^2}{r}dr \qquad (63)$$

da equação (59) resulta, em termos desses parâmetros, a equação diferencial da variação axial da concentração média x do componente leve na seção de enriquecimento da centrífuga $(Z_S \le z \le Z)$

$$C_5 \frac{dx}{dz} = C_1 x(1-x) - P(x_P - x) \qquad (64)$$

Fazendo o mesmo tratamento para a seção de recuperação $(0 \le z \le Z_S)$ a partir da condição de contorno (45-b), obtemos uma equação análoga à (64), substituindo P por -W e x_P por x_W.

$$C_5 \frac{dx}{dz} = C_1 x(1-x) - W(x - x_W) \qquad (65)$$

A integração de equação (64) entre o ponto de alimentação $z=Z_S$ cuja concentração é x_S e o topo da centrífuga $z=Z$ cuja concentração é x_P resulta na seção de enriquecimento

$$\frac{x_P}{x_S} = \frac{(C_1+P)\ \exp[(P+C_1)Z_E/C_5]}{C_1 + P\ \exp[(P+C_1)Z_E/C_5]} \qquad (66)$$

onde $Z_E = Z - Z_S$.

$$\frac{x_P}{x_S} = \frac{1 + P/C_1}{P/C_1 + \exp[-(1+P/C_1)Z_E C_1/C_5]} \qquad (67)$$

e na seção de recuperação

$$\frac{x_W}{x_S} = \frac{1 - W/C_1}{\exp[(1-W/C_1)Z_S C_1/C_5] - W/C_1} \qquad (68)$$

Para evitar perdas por mistura de composições isotópicas diferentes é interessante que no ponto de alimentação a composição x_S seja igual à composição da corrente de alimentação da centrífuga x_F. Assim as equações (67) e (68) representam as razões x_P/x_F e x_W/x_F respectivamente, as quais, no caso de baixas concentrações isotópicas, são respectivamente o fator de enriquecimento β e o inverso do fator de empobrecimento γ.

-SOLUÇÃO CONSIDERANDO A VARIAÇÃO AXIAL DO FLUXO DA CONTRACORRENTE

Partindo novamente da equação fundamental da difusão e convecção simplificada (43) e das condições de contorno radiais (44) e axiais (45) podemos admitir novas hipóteses, menos simplificadoras do que as usadas por Cohen, e seguir o método de resolução proposto por Onsager, procedimento este desenvolvido por OLANDER [29].

Inicialmente consideremos a aproximação

$$\rho w(r,z) = \rho_{eq} w(r,z) \qquad (69)$$

Nessas condições a equação (43) se torna

$$\frac{\partial}{\partial z}(\rho_{eq} w x) = \frac{\rho D}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left[\frac{\Delta M\ \omega^2 r^2 x(1-x)}{RT} + r\frac{\partial x}{\partial r}\right] + \rho D\frac{\partial^2 x}{\partial z^2} \qquad (70)$$

Multiplicando ambos os membros dessa equação por $2\Pi r'dr'$ e integrando a equação resultante de 0 a r, mediante a introdução da expressão da função de fluxo $F(r,z)$, definida por

$$F(r,z) = 2\Pi \int_0 \rho_{eq} w(r,z) r'dr' \qquad (71)$$

com auxílio das relações

$$\frac{\partial F}{\partial r} = 2\Pi r \rho_{eq} w$$

$$F(0,z) = 0$$

$$F(a,z) = P \qquad \text{na seção de enriquecimento}$$

$$F(a,z) = -W \quad \textbf{na seção de recuperação}$$

e das hipóteses H4 e H5, descritas no item anterior, a equação (70) se torna

$$\frac{\partial(Fx)}{\partial z} = 2\Pi\rho D \left[\frac{\Delta M\omega^2 x(1-x) r^2}{RT} + r \frac{\partial x}{\partial r} \right] + 2\Pi\rho D \frac{\partial^2 x}{\partial z^2} \frac{r^2}{2} \qquad (72)$$

Da equação (72) resulta então a expressão do gradiente de concentração radial, dada por

$$\frac{\partial x}{\partial r} = \frac{1}{2\pi\rho D} \frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{Fx}{r}\right) - \frac{\Delta M\omega^2 r x(1-x)}{RT} - \frac{r}{2} \frac{\partial^2 x}{\partial z^2} \qquad (73)$$

Partindo agora da condição de contorno para a seção de enriquecimento (45.a), expressa em termos da função de fluxo $F(r,z)$ e resolvidas as integrais, vem

$$Px_p = -\Pi\rho D a^2 \frac{dx}{dz} + Px(a) - \int_0^a F \frac{\partial x}{\partial r} dr' \qquad (74)$$

Introduzindo então o gradiente da concentração radial, dado pela equação (73), na equação (74) vem

$$P(x_p - x(a)) = -\Pi\rho D a^2 \frac{dx}{dz} - \int_0^a \frac{F}{2\pi\rho D} \frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{Fx}{r}\right) dr + \int_0^a \frac{F\Delta M\omega^2 r x(1-x)}{RT} dr + \int_0^a \frac{Fr}{2} \frac{\partial^2 x}{\partial z^2} dr \qquad (75)$$

Considerando agora que a variação de F e de $\rho_{eq}w$ com z tem pouca importância nesta etapa, podemos tirar as derivadas em relação a z fora das integrais em relação a r na equação acima, resultando

$$P(x_p - x(a)) = -\Pi\rho D a^2 \frac{dx}{dz} - \frac{1}{2\pi\rho D} \frac{dx}{dz} \int_0^a \frac{F^2}{r} dr + \frac{\Delta M\omega^2 x(1-x)}{RT} \int_0^a Fr\, dr + \frac{1}{2} \frac{d^2 x}{dz^2} \int_0^a Fr\, dr \quad (76$$

A segunda derivada da equação (76) pode ser eliminada considerando a equação (54), resultante da condição de contorno (45.a)

$$Px_p = -2\Pi\rho D \int_0^a \frac{dx}{dz} r dr + 2\Pi \int_0^a \rho_{eq} w r x dr \qquad (54)$$

e derivando-a em relação a z. Então, obtem-se a equação

$$0 = -\Pi\rho Da^2 \frac{d^2x}{dz^2} + 2\Pi \frac{dx}{dz} \int_0^a \rho_{eq} wr\,dr \qquad (77)$$

na qual $2\Pi\int_0^a \rho_{eq} wr\,dr = F(a,z) = P$. Então, obtem-se a equação

$$\frac{d^2x}{dz^2} = \frac{1}{\pi a^2 \rho D} P \frac{dx}{dz} \qquad (78)$$

que substituida na equação (76) fornece a equação

$$P(x_p - x(a)) = -\Pi\rho Da^2\frac{dx}{dz} - \frac{1}{2\pi\rho D}\frac{dx}{dz}\int_0^a \frac{F^2}{r}dr + \frac{\Delta M\omega^2 x(1-x)}{RT}\int_0^a Fr\,dr + \frac{1}{2\pi\rho D}\frac{dx}{dz}\int_0^a FP\left(\frac{r^2}{a^2}\right)\frac{dr}{r} \quad (79$$

que pode ser posta na forma

$$P(x_p - x(a)) = -\Pi\rho Da^2\frac{dx}{dz} + \frac{\Delta M\omega^2 x(1-x)}{RT}\int_0^a Fr\,dr - \frac{1}{2\pi\rho D}\frac{dx}{dz}\int_0^a F\left(F - P\frac{r^2}{a^2}\right)\frac{dr}{r} \qquad (80)$$

É interessante exprimirmos a concentração do isótopo leve na parede x(a) em termos da concentração média $\bar{x}$. A suposição mais razoável, nesse caso, é que o gás removido das extremidades da centrifuga tenha composição próxima à média ponderada com a distribuição de massa do gás, baseada na distribuição da densidade dada pela equação (12), definida por

$$\bar{x} = \frac{\int_0^a \rho_{eq} xr\,dr}{\int_0^a \rho_{eq} r\,dr} = \frac{\int_0^a \exp\left[-A^2(1-r^2/a^2)\right] xr\,dr}{\int_0^a \exp\left[-A^2(1-r^2/a^2)\right] r\,dr} \qquad (81)$$

onde A^2 é o parâmetro adimensional da celeridade, que representa a relação entre a velocidade periférica $v=\omega a$ e a velocidade mais provável das moléculas $\sqrt{2RT/M}$ e é aproximadamente igual ao número de Mach na parede do rotor, definido por

$$A^2 = \frac{M\omega^2 a^2}{2RT} \qquad (82)$$

A integral do denominador da equação (81) é facilmente resolvida:

$$\int_0^a \exp\left[-A^2(1-r^2/a^2)\right] r\,dr = \left[\frac{RT}{M\omega}\exp\left[-A^2(1-r^2/a^2)\right]\right]_0^a = \frac{RT}{M\omega} \qquad (83)$$

e a do numerador pode ser resolvida por partes, fornecendo

$$\int_0^a \exp\left[-A^2(1-r^2/a^2)\right] x r\,dr = \frac{RT}{M\omega}x(a) - \frac{RT}{M\omega}\int_0^a \exp\left[-A^2(1-r^2/a^2)\right]\frac{\partial x}{\partial r} \qquad (84)$$

resultando

$$\bar{x} = \left[\frac{RT}{M\omega}x(a) - \frac{RT}{M\omega}\int_0^a \exp\left[-A^2(1-r^2/a^2)\right]\frac{\partial x}{\partial r}\right]\frac{1}{RT/M\omega}$$

$$\bar{x} = x(a) - \int_0^a \exp\left[-A^2(1-r^2/a^2)\right]\frac{\partial x}{\partial r} \qquad (81.a)$$

A expressão do gradiente de concentração radial, proveniente da comparação da equação (80) com a equação (74) é dada por

$$\frac{\partial x}{\partial r} = -\frac{\Delta M\omega^2 x(1-x)r}{RT} + \frac{1}{2\pi\rho D}\frac{dx}{dz}\frac{F-Pr^2/a^2}{r} \qquad (85)$$

que introduzida na equação (81), fornece agora a expressão da concentração média ponderada

$$x= x(a) + \frac{\Delta M\omega^2 x(1-x)}{RT}\int_0^a \exp\left[-A^2\left(1-\frac{r^2}{a^2}\right)\right] r\,dr - \frac{1}{2\pi\rho D}\frac{dx}{dz}\int_0^a \exp\left[-A^2\left(1-\frac{r^2}{a^2}\right)\right]\left(F-P\frac{r^2}{a^2}\right)\frac{dr}{r} \qquad (86)$$

Substituindo x(a) dado pela expressão acima na equação (80), obtemos a equação diferencial

$$P(x_P-x) = -\Pi\rho D a^2\frac{dx}{dz} + \frac{\Delta M\omega^2 x(1-x)}{RT}\int_0^a\left\{F-P\exp\left[-A^2\left(1-\frac{r^2}{a^2}\right)\right]\right\} r\,dr$$
$$- \frac{1}{2\pi\rho D}\frac{dx}{dz}\int_0^a\left\{F-P\exp\left[-A^2\left(1-\frac{r^2}{a^2}\right)\right]\right\}\left(F-P\frac{r^2}{a^2}\right)\frac{dr}{r} \qquad (87)$$

Definindo, a exemplo de Cohen, os seguintes parâmetros

$$C_1 = \frac{\Delta M\omega^2}{RT}\int_0^a\left\{F-P\exp\left[-A^2\left(1-\frac{r^2}{a^2}\right)\right]\right\} r\,dr \qquad (88)$$

$$C_2 = \Pi\rho D a^2 \tag{61}$$

$$C_3 = \frac{1}{2\pi\rho D}\int_0^a \left\{F-P\,\exp\left[-A^2\left(1-\frac{r^2}{a^2}\right)\right]\right\}\left(F-P\frac{r^2}{a^2}\right)\frac{dr}{r} \tag{89}$$

$$C_5 = C_2+C_3 = \Pi\rho D a^2+\frac{1}{2\pi\rho D}\int_0^a \left\{F-P\,\exp\left[-A^2\left(1-\frac{r^2}{a^2}\right)\right]\right\}\left(F-P\frac{r^2}{a^2}\right)\frac{dr}{r} \tag{90}$$

chegamos agora a uma expressão equivalente à equação (64), a saber

$$C_5\,\frac{dx}{dz} = C_1 x(1-x) - P(x_p-x) \tag{91}$$

onde $C_1(z)$ e $C_5(z)$, dados respectivamente pelas equações (88) e (90), são variáveis ao longo do eixo do rotor, pois $F(r,z)$ varia com z. Nesta nova formulação está incluido o efeito da difusão axial de retorno e a concentração da parede $x(a)$ teve um tratamento mais apurado que na solução original de Cohen-Onsager.

O mesmo tratamento pode ser efetuado para a seção de recuperação, chegando-se a equações semelhantes às (88), (90) e (91), substituindo P por -W e x_p por x_w.

Vamos agora efetuar a seguinte mudança de variáveis

$$\xi = A^2\left(1-\frac{r^2}{a^2}\right) \tag{92}$$

$$\eta = z/Z \tag{93}$$

com o objetivo de simplificar as equações e normalizar as variáveis para futuros cálculos numéricos. A equação diferencial da seção de enriquecimento se torna

$$(C_5/Z)\,\frac{dx}{d\eta} = C_1 x(1-x) - P(x_p-x) \tag{94}$$

com

$$C_1 = \frac{\Delta M}{M}\int_0^{A^2}\left[F - P\,\exp(-\xi)\right]d\xi \tag{95}$$

$$C_5 = \Pi\rho Da^2 + \frac{1}{4\pi\rho DA^2}\int_0^{A^2} \frac{[F-P\ \exp(-\xi)][F-P(1-\xi/A^2)]}{1-\xi/A^2}\, d\xi \qquad (96)$$

e para a seção de recuperação

$$(C_5/\mathcal{D})\ \frac{dx}{d\eta} = C_1 x(1-x) - W(x-x_w) \qquad (97)$$

com

$$C_1 = \frac{\Delta M}{M}\int_0^{A^2}\left[F + W\ \exp(-\xi)\right]d\xi \qquad (98)$$

$$C_5 = \Pi\rho Da^2 + \frac{1}{4\pi\rho DA^2}\int_0^{A^2} \frac{[F+W\ \exp(-\xi)][F+W(1-\xi/A^2)]}{1-\xi/A^2}\, d\xi \qquad (99)$$

A resolução das equações (94) e (97) deve ser feita numericamente, como será descrito no Capítulo 4.

3.4- PODER DE SEPARAÇÃO E EFICIÊNCIAS DA CENTRÍFUGA A CONTRACORRENTRE

O poder de separação por unidade de comprimento $d(\delta U)/dz$ de uma centrífuga a contracorrente é o poder de separação de uma unidade de separação a contracorrente, que segundo COHEN [5] é expresso por

$$\frac{d(\delta U)}{dz} = \frac{P(x_p-x)}{[x(1-x)]^2}\ \frac{dx}{dz} \qquad (100)$$

onde $P(x_p-x)$ é o transporte "líquido" do isótopo desejado. Introduzindo na equação (100) a expressão de $P(x_p-x)$ dada pela equação (64) resulta

$$\frac{d(\delta U)}{dz} = \left[C_1 x(1-x) - C_5\ \frac{dx}{dz} \right] \frac{dx}{dz}\ \frac{1}{[x(1-x)]^2} \qquad (101)$$

A equação (101) mostra que $d(\delta U)/dz$ admite um valor máximo que se obtem fazendo $dx/dz=s$, admitindo $\underline{s}$ como única variável independente.

Então derivando a expressão (101) em relação a s e igualando a zero obtemos

$$\frac{d}{ds}\left[\frac{C_1 x(1-x)s}{[x(1-x)]^2} - \frac{C_5\ s^2}{[x(1-x)]^2}\right] = 0 \qquad (102)$$

que fornece a derivada

$$\left[\frac{dx}{dz}\right]_{ot} = \frac{C_1\ x(1-x)}{2C_5} \qquad (103)$$

Introduzindo essa derivada na expressão (101) resulta

$$\left[\frac{d(\delta U)}{dz}\right]_{max} = \frac{C_1^2}{4C_5} \qquad (104)$$

Integrando de $\underline{0}$ a $\underline{Z}$ a equação (104) para a centrífuga a contracorrente de comprimento Z, obtemos para o caso em que C_1 e C_5 não dependem de z a expressão

$$\delta U_{max} = \frac{C_1^2}{4C_5} Z \qquad (105)$$

que é umas das hipóteses adotadas por Cohen na sua resolução clássica da equação da difusão e convecção.

Fazendo uma analogia com a coluna de destilação, que apresenta um comportamento separativo semelhante ao da centrífuga a contracorrente de Cohen, o <u>fluxo L de circulação interna da corrente empobrecida</u>, é expresso por

$$L = 2\Pi \int_{r_1}^{a} \rho w r\ dr \qquad (106)$$

onde r_1 é o raio da centrífuga onde a velocidade axial w muda de sinal. A soma dos fluxos ascendente e descendente no interior da centrífuga, ou seja, a magnitude do fluxo de circulação interna, sem levar em conta o sinal da velocidade axial, é dada por

$$\int_0^a |\rho w| 2\Pi r \, dr = \int_0^{r_1} \rho w 2\Pi r \, dr + \int_{r_1}^a \rho w 2\Pi r \, dr = F(r_1) + L \quad (107)$$

Considerando os fluxos extraídos da centrífuga P e W pequenos em relação à magnitude da contracorrente L, podemos admitir que os fluxos ascendente e descendente da contracorrente são iguais, a saber,

$$L = 2\Pi \int_0^{r_1} \rho w r \, dr = 2\Pi \int_{r_1}^a \rho w r \, dr = F(r_1) \quad (108)$$

Então, de acordo com a equação (107), a magnitude ou intensidade do fluxo da contracorrente no interior do rotor é

$$2L = 2\Pi \int_0^a |\rho w| r \, dr \quad (109)$$

Como qualquer unidade de separação a contracorrente, quando a centrífuga opera em refluxo total, isto é, sem introdução de alimentação nem extração de material enriquecido e empobrecido, o gradiente de concentração axial dx/dz é máximo. Neste caso o fluxo de circulação interna assume o valor ótimo L_o, expresso por

$$L_o = \frac{\pi a \rho D}{\left(\frac{1}{2} \int_0^a \left[\frac{F(r)}{L} \right]^2 \frac{dr}{r} \right)^{1/2}} \quad (110)$$

Podemos agora definir o parâmetro <u>m</u>, que mede a <u>intensidade da contracorrente</u>, pela relação

$$m = L/L_o \quad (111)$$

Então, das equações (110) e (111) vem

$$m = \frac{\left(2 \int_0^a F^2 \frac{dr}{r} \right)^{1/2}}{2\pi a \rho D} \quad (112)$$

Substituindo agora as expressões (60) e (63) de C_1 e C_5 respectivamente, na equação (105) resulta

$$\delta U_{max} = \frac{\left(\frac{\Delta M\omega^2}{2RT}\right)^2 \left[\int_0^a F(r) r \, dr\right]^2 Z}{\pi\rho D a^2 + \frac{1}{2\pi\rho D} \int_0^a \frac{[F(r)]^2}{r} dr} \qquad (113)$$

Remanejando a equação (113) mediante a utilização da equação (112), obtemos a expressão do máximo poder de separação de qualquer centrífuga de separação isotópica do urânio

$$\delta U_{max} = \frac{\pi\rho DZ}{2} \left(\frac{\Delta M\omega^2 a^2}{2RT}\right)^2 \times \frac{m^2}{1+m^2} \times \frac{4\left[\frac{1}{a^2} \int_0^a F(r) r \, dr\right]^2}{\int_0^a [F(r)]^2 \frac{dr}{r}} \qquad (114)$$

O poder de separação máximo teórico da centrífuga a contracorrente, deduzido por COHEN [5] é dado por

$$\delta U^t_{max} = \frac{\pi\rho DZ}{2} \left(\frac{\Delta M\omega^2 a^2}{2RT}\right)^2 \qquad (115)$$

Então, definindo a eficiência de separação máxima e_{max} pela relação

$$e_{max} = \delta U_{max} / \delta U^t_{max} \qquad (116)$$

temos, da expressão (114) que a eficiência máxima é

$$e_{max} = \frac{m^2}{1+m^2} \times \frac{4\left[\frac{1}{a^2} \int_0^a F(r) r \, dr\right]^2}{\int_0^a [F(r)]^2 \frac{dr}{r}} \qquad (117)$$

onde o primeiro termo define a eficiência de circulação interna e_c, que depende da intensidade ou magnitude do fluxo de circulação da contracorrente e tende a 1 quando esse fluxo se torna muito grande. Então, podemos escrever

$$e_C = \frac{m^2}{1+m^2} \qquad (118)$$

O segundo termo, por sua vez, é chamado de <u>eficiência do perfil de fluxo</u> e_f, pois, através da função de fluxo $F(r)$, depende da forma do perfil de fluxo axial da contracorrente.

$$e_f = \frac{4\left[\frac{1}{a^2} \int_0^a F(r) r \, dr\right]^2}{\int_0^a [F(r)]^2 \frac{dr}{r}} \qquad (119)$$

Portanto

$$e_{max} = e_C \times e_f \qquad (120)$$

Levando em conta agora o poder de separação real da centrifuga, dado pela equação (07), observamos um desvio do seu valor máximo, pois o gradiente de concentração axial dx/dz não é o valor ótimo da equação (103). Esse desvio é então atribuido à <u>eficiência da idealidade</u> e_I definida por:

$$e_I = \delta U/\delta U max \qquad (121)$$

Nessas condições a <u>eficiência de separação global</u> da centrifuga a contracorrente, definida por

$$e = \delta U/\delta U^t_{max} \qquad (122)$$

é composta pelas três eficiências descritas acima:

$$e = e_C \times e_f \times e_I \qquad (123)$$

Os parâmetros C_4 e C_5 dados pelas equações (60) e (63) podem agora ser expressos em função da eficiência do perfil de fluxo e_f e do parâmetro m, resultando

$$C_4 = \frac{\Delta M\omega^2 a^2}{2RT} \sqrt{2}\ \sqrt{e_f}\ \Pi a \rho D m \qquad (124)$$

$$C_5 = \Pi a^2 \rho D (1 + m^2) \qquad (125)$$

Considerando agora o caso em que o fluxo da contracorrente não é constante ao longo do eixo da centrífuga, isto é, C_4 e C_5 variam com z vamos definir, com base nas equações (118) e (119) uma <u>eficiência máxima local</u> $e_{max}(z)$

$$e_{max}(z) = \frac{d(\delta U)/dz}{\delta U^{t}_{max}/Z} \qquad (126)$$

expressa ,na seção de enriquecimento, por

$$e_{max} = \frac{m^2}{1+m^2} \times \frac{4\left[\frac{1}{a^2}\int_0^a \left\{F - P\ \exp\left[-A^2\left(1-\frac{r^2}{a^2}\right)\right]\right\} r\,dr\right]^2}{\int_0^a \left\{F - P\ \exp\left[-A^2\left(1-\frac{r^2}{a^2}\right)\right]\right\}\left(F - P\frac{r^2}{a^2}\right)\frac{dr}{r}} \qquad (127)$$

composta das eficiências de perfil de fluxo $e_f(z)$ e de circulação $e_c(z)$ locais

$$e_{max}(z) = e_f(z) \times e_c(z) \qquad (127)$$

onde

$$e_f(z) = \frac{4\left[\frac{1}{a^2}\int_0^a \left\{F - P\ \exp\left[-A^2\left(1-\frac{r^2}{a^2}\right)\right]\right\} r\,dr\right]^2}{\int_0^a \left\{F - P\ \exp\left[-A^2\left(1-\frac{r^2}{a^2}\right)\right]\right\}\left(F - P\frac{r^2}{a^2}\right)\frac{dr}{r}} \qquad (128)$$

e

$$e_c(z) = \frac{m(z)^2}{1 + m(z)^2} \qquad (129)$$

com

$$m(z) = \frac{\left[2 \int_0^a \left\{ F - P \exp\left[-A^2 \left(1 - \frac{r^2}{a^2} \right) \right] \right\} \left(F - P\frac{r^2}{a^2} \right) \frac{dr}{r} \right]^{1/2}}{2\pi a \rho D} \qquad (130)$$

Os parâmetros C_1 e C_5, dados pelas equações (88) e (90) para a seção de enriquecimento, podem ser expressos em função de e_f e de m, por equações semelhantes às equações (124) e (125). Da mesma forma, podemos expressar a eficiência do perfil de fluxo e_f e o parâmetro m em função dos parâmetros C_1 e C_5:

$$e_f = \frac{\left[C_1 M / A^2 \Delta M \right]^2}{2\Pi \rho D (C_5 - \Pi a^2 \rho D)} \qquad (131)$$

$$m = \left[\frac{C_5}{\Pi a^2 \rho D} - 1 \right]^{1/2} \qquad (132)$$

As eficiências definidas acima supõem que num segmento de comprimento do rotor dz, o fluxo da contracorrente pode ser considerado constante e, então, as considerações feitas na dedução das eficiências e_C e e_f da centrífuga são localmente válidas.

3.5 - REVISÃO DA GÁS-DINÂMICA NA CENTRÍFUGA A CONTRACORRENTE

O estudo da gás-dinâmica na centrífuga a contracorrente tem por objetivo determinar os valores e as grandezas dependentes do escoamento interno do gás, tais como a intensidade e os perfis de velocidade, cujo conhecimento é necessário à análise teórica dos parâmetros de separação. Enquanto a separação analisa o comportamento de uma mistura binária no interior do rotor, a gás-dinâmica estuda o comportamento do gás como um todo. Assim, o objetivo desta seção é descrever os meios de geração da contracorrente no interior do rotor e resumir a metodologia utilizada na investigação da gás-dinâmica aplicada à centrífuga a contracorrente.

3.5.1- Modos de Geração da Contracorrente

A fim de estudar a circulação interna, será utilizada a representação esquemática da Figura 2. De acordo com esse esquema, o gás de alimentação (UF_6) é introduzido no rotor através do orifício situado na posição axial z_F da árvore estacionária presente no eixo do rotor. A contracorrente é formada pela corrente ascendente, enriquecida no isótopo desejado ($^{235}UF_6$), que circula nas proximidades do eixo, e pela corrente descendente, empobrecida no isótopo desejado, que se desloca nas proximidades da parede do rotor. Nessas condições, o produto da separação é extraído pelo coletor superior, situado nas vizinhanças da tampa superior e protegido pela placa defletora em movimento de rotação, enquanto que o rejeito da separação é removido da centrífuga por meio do coletor inferior presente nas proximidades da tampa do fundo.

A contracorrente interna, representada pelas setas verticais na Figura 2, pode ser gerada por meios mecânicos mediante a interação do gás em rotação com obstáculos estacionários, presentes no interior do rotor, e por meios térmicos através do controle das temperaturas das tampas do rotor ou da temperatura ao longo da parede do rotor. Nesse sentido, existem atualmente quatro mecanismos elementares para a geração da contracorrente [29,34], que são os seguintes:

(1) *o acionamento pelo coletor ou placa defletora fixa*, de acordo com o qual a criação da contracorrente é provocada pela interação do coletor ou de um disco estacionário com o gás de processo em movimento de rotação. Esse mecanismo, que representa o meio mais comum para gerar a contracorrente interna, na Figura 2 é estabelecido pelo coletor inferior.

(2) *o acionamento térmico na parede do rotor*, que é determinado por uma distribuição de temperatura não uniforme ao longo do comprimento da parede do rotor, ou seja, por um gradiente de temperatura axial. Nesse caso, para manter a circulação axial no mesmo sentido da produzida pelo coletor, é necessário que, na Figura 2, a temperatura seja diminuida da extremidade inferior para a extremidade superior do rotor.

(3) *o acionamento térmico nas tampas do rotor*, que resulta quando há remoção de calor de uma das tampas e introdução de calor na outra tampa. No esquema da Figura 2, esse escoamento ocorre no mesmo sentido da circulação interna provocada pelo coletor inferior no caso em que a tampa inferior é aquecida e a superior é resfriada.

(4) *o acionamento pela alimentação* no qual a circulação do gás no interior do rotor é induzida pela injeção do fluxo de alimentação no rotor. Nesse caso, o escoamento interno provém de uma fonte (o ponto de alimentação do rotor) e de dois sumidouros representados pela remoção do gás em ambas as extremidades do rotor.

No caso mais geral, esses quatro tipos de mecanismos elementares responsáveis pela criação da contracorrente no interior do rotor podem agir simultaneamente. Nesse caso, os perfis de circulação interna provenientes de cada um desses mecanismos podem ser analisados separadamente e cada perfil pode ser modelado teoricamente, um independente dos outros. A velocidade de circulação total é então a soma dessas contribuições provenientes dos quatro mecanismos de acionamento da contracorrente. Nesse sentido, a densidade de fluxo axial, isto é, o fluxo de massa axial por área unitária, que é igual ao produto ρw da densidade ρ e da velocidade axial w e constitui a quantidade gás-dinâmica mais importante para a análise separativa da centrífuga, pode ser expressa por

$$\rho w = (\rho w)_{\mathbf{s}} + (\rho w)_{\mathbf{w}} + (\rho w)_{\mathbf{e}} + (\rho w)_{\mathbf{f}} \qquad (133)$$

onde os sub-índices $\mathbf{s}$, $\mathbf{w}$, $\mathbf{e}$ e $\mathbf{f}$ se referem ao acionamento pelo coletor, térmico na parede, térmico nas tampas e pela alimentação, respectivamente, e a densidade ρ uma função apenas da posição radial r na centrífuga, expressa pela equação (12).

Cada uma dessas densidades de fluxo parciais apresenta um *perfil radial* e uma *variação axial* distinta. Convém salientar que a possibilidade de separar as densidades de fluxo parciais e de efetuar sua soma, segundo a expressão (133), provém do fato, admitido na gás-dinâmica, que o escoamento do gás no rotor é apenas perturbado ligeiramente em relação ao escoamento primário de rotação de corpo rígido, o que permite a linearização das equações de movimento na centrífuga.

Em correspondência com a equação (133), a função de fluxo, definida pela equação (71), também pode ser desmembrada em componentes relacionadas aos acionamentos acima discutidos, de acordo com a equação

$$F = F_{\mathbf{S}} + F_{\mathbf{W}} + F_{\mathbf{E}} + F_{\mathbf{F}} \qquad (134)$$

Cabe salientar ainda que o cálculo dos parâmetros de separação da centrífuga, ao contrário do que ocorre na gás-dinâmica, não pode ser linearizado. Nesse sentido, não é possível computar os aumentos do poder de separação δU provenientes dos vários modos de acionamento da contracorrente e, em seguida, adicioná-los para obter o poder de separação total. Resulta assim que na análise separativa, na qual se tem em vista calcular o δU e os outros parâmetros de separação, é indispensável recorrer à função de fluxo total representada pela equação (134).

3.5.2- Equações de Escoamento

A física, na qual está baseada a teoria da gás-dinâmica da centrífuga a contracorrente para a separação isotópica do urânio, está concentrada nas seguintes equações:

Equações de conservação do gás como um todo

1. Massa: equação da continuidade do gás
2. Quantidade de movimento radial
3. Quantidade de movimento angular
4. Quantidade de movimento axial
5. Energia

(2–4) } Equações de Navier-Stokes

Equação termodinâmica de estado

6. Equação do gás ideal

Equação de conservação da mistura gasosa

7. Massa: equação da continuidade do isótopo desejado

Face a essas equações, a análise teórica da centrífuga pode ser dividida em duas partes, a saber, a análise gás-dinâmica e a análise separativa.

A análise gás-dinâmica trata o gás de processo UF_6 como um fluido de um único componente e tem em vista a resolução simultânea das seis primeiras equações, acima mencionadas, que fornece os valores das seis variáveis: componentes de velocidade axial, radial e azimutal e pressão, densidade e temperatura do gás. A análise separativa considera o gás de processo como uma mistura isotópica de dois componentes $(^{235}UF_6 \ / \ ^{238}UF_6)$ e tem por objetivo resolver a sétima equação do sistema de equações considerado. Desse modo, com o auxílio dos perfis de velocidade obtidos na análise gás-dinâmica, é possível determinar as concentrações do produto x_p e do rejeito x_w para valores específicos do fluxo F e da composição x_F da alimentação e do corte θ.

Considerando agora a análise gás-dinâmica na ausência de perturbações mecânicas ou térmicas do gás no interior do rotor quando se estabelece um estado de equilíbrio termodinâmico, a resolução das seis equações mencionadas mostra que o gás gira como um corpo rígido com a velocidade angular ω e se caracteriza pelas seguintes propriedades:

$$v_{\theta,eq} = \omega r \ , \quad v_{z,eq} = 0 \ , \quad v_{r,eq} = 0$$

$$\rho_{eq}/\rho_a = p_{eq}/p_a = \exp\left[-A^2\left(1 - \frac{r^2}{a^2}\right)\right] \ , \quad T_{eq} = T_0 \qquad (135)$$

onde v_z, v_r e v_θ são as componentes de velocidade nas direções axial, radial e azimutal, $\underline{p}$, $\underline{\rho}$ e $\underline{T}$ denotam as variáveis termodinâmicas pressão, densidade e temperatura, e $\underline{a}$ e $\underline{T_0}$ são, respectivamente, o raio do rotor e a temperatura do gás, indicando o sub-índice $_{eq}$ as condições de equilíbrio.

Na presença de um ou mais mecanismos de geração da contracorrente descritos acima, o campo de fluxos no interior do rotor e, portanto, a análise gás-dinâmica, se torna mais complicado, não só devido às correntes de circulação interna estabelecidas na direção axial nas proximidades da parede, como também em virtude do escoamento radial ao longo das tampas do rotor. Nesse caso afastado do equilíbrio, pode-se, porém, introduzir duas simplificações que permitem a solução das equações mencionadas.

A primeira dessas simplificações é admitir que os desvios das componentes de velocidade e das variáveis de estado termodinâmico dos respectivos valores de equilíbrio, dadas pelas equações (135), são suficientemente pequenos de modo que podem ser tratados como perturbações, como segue:

$$v_r = 0+u \;, \quad v_\theta = \omega r+v \;, \quad v_z = 0+w \qquad (136)$$
$$p = p_{eq}+\bar{p} \;, \quad \rho = \rho_{eq}+\bar{\rho} \;, \quad T = T_0+\bar{T}$$

Nessas condições é possivel linearizar as equações de conservação (massa, quantidade de movimento e de energia) em torno dos valores de equilíbrio (equações (135)) de modo que as equações resultantes contenham apenas as perturbações u, v, w, $\bar{p}$, $\bar{\rho}$ e $\bar{T}$, que são de primeira ordem. As equações assim linearizadas são as seguintes:

Equação da continuidade do gás

$$\frac{1}{r}\,\frac{\partial}{\partial r}(\rho_{eq} r u) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho_{eq} w) = 0 \qquad (137.a)$$

Equação da quantidade de movimento radial

$$-\bar{\rho} r\omega^2 - 2\rho_{eq} v\omega = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial r} + \mu \left\{ \frac{\partial}{\partial r} \left[\frac{1}{r}\,\frac{\partial}{\partial r}(ru) \right] + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right\} \qquad (137.b)$$

Equação da quantidade de movimento angular

$$2\rho_{eq}\omega u = \mu \left\{ \frac{\partial}{\partial r} \left[\frac{1}{r}\,\frac{\partial}{\partial r}(rv) \right] + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right\} \qquad (137.c)$$

Equação da quantidade de movimento axial

$$0 = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial z} + \mu \left\{ \frac{1}{r}\,\frac{\partial}{\partial r} \left(r\,\frac{\partial w}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right\} \qquad (137.d)$$

Equação da energia

$$-\rho_{eq}\omega^2 r u = k \left[\frac{1}{r}\,\frac{\partial}{\partial r} \left(r\,\frac{\partial \bar{T}}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 \bar{T}}{\partial z^2} \right] \qquad (137.e)$$

Equação de estado

$$\bar{\rho} = \left(\frac{M}{RT_o} \right) \bar{p} - \rho_{eq} \left(\frac{\bar{T}}{T_o} \right) \qquad (137.f)$$

onde μ e k são, respectivamente, a viscosidade e a condutividade térmica do gás.

Em relação a essas equações, convém lembrar que (a) os fenômenos físicos responsáveis pelo acionamento da circulação interna no rotor estão contidos nos termos do primeiro membro das equações de quantidade de movimento radial e angular e na equação da energia; (b) o primeiro membro da equação (137.b) representa a força centrífuga que atua sobre o gás; (c) o primeiro membro da equação (137.c) é a força de Coriolis e (d) o primeiro membro da equação (137.e) representa o trabalho reversível realizado sobre o gás devido à compressão ou expansão.

A segunda simplificação introduzida é considerar que apenas as regiões próximas às fronteiras sólidas contém gás de densidade significativa. Nesse sentido o gás aderente às tampas do topo e da base escoa essencialmente na direção radial formando camadas limites conhecidas por camadas de Ekman, enquanto que o gás mantido adjacente à parede do rotor pela força centrífuga se desloca na contracorrente axial. Essa circulação também constitui uma camada limite que freqüentemente é designada por camada de Stewartson. Dependendo do mecanismo de acionamento da contracorrente podem existir diversos tipos de camadas de Stewartson. Por isso na discussão apresentada por OLANDER [29] é feita a simplificação de que apenas a camada limite formada pelo escoamento gasoso nas proximidades imediatas da parede cilíndrica vertical da centrífuga é chamada de camada de Stewartson.

Convém frisar que os limites internos das camadas de Ekman e de Stewartson não são bem nítidos porque os fluxos decaem exponencialmente com a distância a partir da fronteira sólida. A espessura característica das camadas de Ekman é expressa em termos de uma quantidade adimensional chamada número de Ekman, que contem a viscosidade μ é dada por

$$\varepsilon = \frac{\mu}{\rho_a \omega a^2} \qquad (138)$$

e representa o inverso do número de Reynolds.

Quanto à camada de Stewartson, a equação (135) mostra que o gás se encontra confinado na parede do rotor pela força centrífuga na forma de uma camada muito fina, especialmente quando as velocidades periféricas são elevadas. Resulta ainda dessa equação que o parâmetro de escala característico para a massa do gás presente nessa camada é a quantidade A^2 definida pela equação (82). Por isso, costuma-se adimensionalizar a posição radial, introduzindo a escala de altura já definida pela equação (92).

Para a posição axial, costuma-se também adimensionalizar z pelo comprimento do rotor Z, introduzindo a variável η, dada pela equação (93).

Os dois tipos de escoamentos de camada limite no interior do rotor podem ser ainda submetidos a diversas simplificações nas equações de movimento linearizadas. Em qualquer caso, porém, os dois escoamentos vertical (Stewartson) e horizontal (Ekman) devem estar aproximadamente emparelhados a fim de descrever completamente o perfil de circulação do gás no interior do rotor.

Apesar do grande número de trabalhos publicados, desde o início da década de 1960, acerca da resolução das equações gás-dinâmicas da centrífuga representadas pelo sistema de equações (137), é possível classificar os métodos usados na resolução em (1) *o método da expansão em funções próprias ("eigenfunções")*, (2) *o método das camadas limites* e (3) *os métodos numéricos*.

O método da expansão em auto-funções consiste em resolver o sistema de equações linearizadas (137) admitindo que cada uma das variáveis de perturbação $f_i(r,z)$ dessas equações pode ser separada em uma parte radial e uma parte axial e expressa pelo produto de dois termos por

$$f_i(r,z) = g_i(r) \exp(-\lambda z) \qquad (139.a)$$

ou no caso das variáveis adimensionais ξ e η, por

$$f_i(\xi,\eta) = g_i(\xi) \exp(-\lambda\eta) \qquad (139.b)$$

Nessas equações, $g_i(r)$ ou $g_i(\xi)$ constitui a parte radial da perturbação e λ é o auto-valor comum a ser determinado. Desse modo, obtem-se um função axial particular $h(z)$ ou $h(\eta)$ e um conjunto distinto de auto-funções $g_i(r)$ ou $g_i(\xi)$ que formam um sistema de equações diferenciais ordinárias a ser resolvido com as condições de contorno apropriadas. O método, que vem sendo utilizado desde o início de 1960, foi revisto por OLANDER [28], é apresentado em apêndice no trabalho de SOUBBARAMAYER [34] e foi usado na aproximação de "panqueca" de Onsager descrita em detalhes no trabalho de WOOD e MORTON [39].

O método das camadas limites, considerando o sistema de equações linearizadas (137) como um problema de perturbação singular, consiste em dividir o campo de fluxos nas várias áreas definidas pelas camadas limites de Stewartson e de Ekman e em determinar o fluxo em cada uma dessas áreas. Desse modo, a resolução do problema de perturbação permite obter soluções analíticas para as áreas consideradas, as quais são finalmente combinadas ou emparelhadas de modo a formar uma solução única através do conhecido método de expansões assintóticas acopladas. Esse método de camadas limites apareceu no princípio da década de 1970 e se encontra descrito em detalhes no trabalho de SOUBBARAMAYER [34].

Os métodos numéricos têm em vista resolver o sistema de equações linearizadas (137) dividindo o interior do rotor em elementos ou superpondo-lhe uma grade e utilizando, a seguir, na solução do sistema de equações considerado, as técnicas de diferenças finitas ou de elementos finitos. As publicações nas quais se recorre a esses métodos começaram a aparecer em 1975 e o sucesso dos mesmos resultou do desenvolvimento de computadores poderosos e rápidos. A aplicação desses métodos à análise numérica do escoamento no interior da centrífuga é feito no trabalho de SOUBBARAMAYER [34].

3.5.3- Análise do Perfil de Fluxo

Os resultados que se podem esperar do estudo teórico da gás-dinâmica da centrífuga a contracorrente serão ilustrados, como é feito no artigo de OLANDER [29], por meio dos perfis de fluxo computados para o acionamento térmico da parede, para o acionamento pelo coletor e para o acionamento pela introdução da alimentação no rotor, os quais constituem, do ponto de vista prático, os mais importantes métodos de gerar a circulação gasosa no interior do rotor.

O estudo do acionamento térmico na parede foi feito por WOOD e MORTON [39], utilizando, para o cômputo do perfil de fluxo, o modelo analítico baseado no método da expansão em auto-funções e na aproximação de "panqueca" de Onsager. A centrífuga considerada para essa finalidade, que é uma das máquinas construídas por Beams e é mencionada no trabalho de MAY [24], apresenta as seguintes características:

Comprimento do rotor $Z = 335$ cm

Raio interno do rotor $a = 9.15$ cm

Temperatura média do gás $T_o = 300$ K

Pressão do gás na parede $p_a = 100$ Torr e opera sem coletor, em refluxo total. A circulação interna é produzida por uma diferença de temperatura entre a extremidade inferior e a extremidade superior de apenas 1 K, fornecendo, assim, um gradiente de temperatura ao longo da parede muito pequeno, dado por $\Delta T/Z = 3\times10^{-3}$ K/cm. Esse gradiente de temperatura produz velocidades máximas na corrente descendente, que escoa nas proximidades da parede, de cerca de 4 cm/s. A intensidade da contracorrente L, definida pela expressão (106) apresenta no plano médio do rotor (η=1/2) um valor compreendido entre 30 e 40 mgUF$_6$/s (946 a 1261 kgUF$_6$/a). Os perfis da densidade de fluxo axial $\rho_{eq}w$ foram computados para duas posições axiais η e para duas velocidades periféricas, a saber, v = 400 m/s e

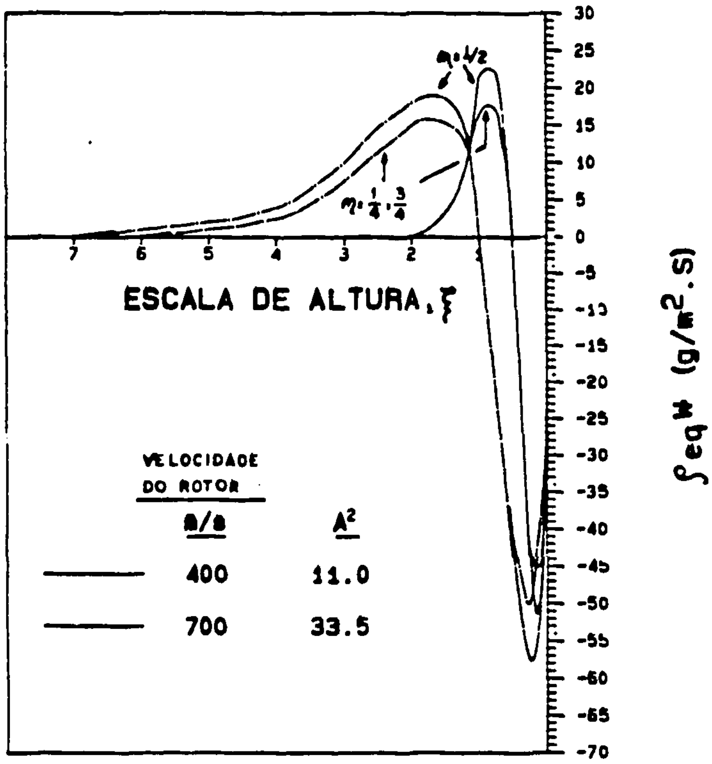


Figura 3: Perfis radiais da contracorrente em uma centrífuga com acionamento térmico na parede (extraída de OLANDER [29])

v = 700 m/s e são mostradas na Figura 3. Caso a diferença de temperatura entre o fundo e o topo fosse 10 K, ao invés de 1 K, a velocidade axial máxima e a intensidade máxima da contracorrente seriam 10 vezes maiores do que as apresentadas na Figura 3.

De acordo com a Figura 3, na qual a abcissa é expressa em unidades de escala de altura ξ, a contracorrente se extende para o interior do rotor cerca de 6 escalas de altura, na velocidade periférica de 700 m/s, e dentro de aproximadamente 2 escalas de altura, na velocidade periférica de 400 m/s. Todavia, em termos da posição radial r real, essas formas de perfis de fluxo não são muito diferentes. Usando então a equação (92) para converter escalas de altura em raios fracionários r/a, ambas as curvas correspondem a uma camada de Stewartson contida dentro dos 10% externos do raio do rotor, ou seja, em ambos os casos a camada de Stewartson apresenta uma espessura de cerca de 9 mm. Observa-se ainda na Figura 3, na qual para cada velocidade do rotor são apresentados os perfis para duas posições axiais, que a diferença desses perfis radiais é muito pequena, podendo-se afirmar então que em todas as posições axiais os perfis apresentam, a grosso modo, a mesma forma radial. As amplitudes, por outro lado, apresentam o maior valor no plano médio do rotor e tendem para zero, de uma maneira simétrica, em ambas as extremidades da centrifuga. Finalmente, da análise feita em relação aos perfis considerados, se obtém, empiricamente, a segunda expressão da densidade de fluxo para a contracorrente induzida por um gradiente de temperatura constante ao longo da parede do rotor

$$(\rho_{eq} w)_w = B'_w f_w(\xi) h_w(\eta) \qquad (140)$$

onde B'_w é um fator de amplitude proporcional ao gradiente de temperatura imposto à parede, $f_w(\xi)$ é uma função da forma radial expressa por

$$f_w(\zeta) = e^{-\zeta} - (1+2\zeta)e^{-2\zeta} \tag{141}$$

e $h_w(\eta)$ fornece a variação axial da intensidade da contracorrente segundo

$$h_w(\eta) = [4\eta\ (1-\eta)]^c \tag{142}$$

onde $c=2/3$.

O estudo do acionamento da contracorrente pelo coletor, que será utilizado, é o feito por LAHARGUE e SOUBBARAMAYER [18], no qual os fluxos obtidos na geração da circulação interna pelo coletor inferior, são computados numericamente com auxílio do programa CENTAURE, utlizando a mesma centrífuga à qual se aplicam as curvas da Figura 3. Convem mencionar aqui que, no caso do acionamento pelo coletor, os cálculos do fluxo interno da centrífuga costumam ser feitos simulando o coletor como uma tampa (inferior, no presente caso) que gira mais lentamente que a parede do rotor. Essa simulação apresenta a desvantagem segundo a qual essa deficiência da velocidade angular $\Delta\omega_B$ na extremidade inferior da centrífuga não consegue dar resposta à questão crucial de como relacionar $\Delta\omega_B$ com o tamanho, a forma e a localização radial da ponta do coletor.

No presente caso a simulação é feita escolhendo a deficiência de velocidade angular relativa $\Delta\omega_B/\omega$ de modo a gerar na posição axial η=0.05 a mesma intensidade da circulação interna L da alcançada pelo acionamento térmico na parede na posição axial η=0.5. Desse modo, sendo o acionamento pelo coletor caracterizado pelo de um disco de mesmo raio do rotor, mas girando com uma velocidade 0.8% menor do que a do rotor, são obtidas as curvas da densidade de fluxo $\rho_{eq}w$ apresentadas na Figura 4. Como é mostrado nessa figura, a variação radial da densidade de fluxo apresenta, aproximadamente, para o acionamento pelo coletor em η=0.05, a mesma forma da correspondente ao acionamento térmico na parede em η=0.5. Todavia, ao invés do decaimento simétrico da amplitude para as extremidades do rotor, o acionamento pelo coletor decresce monotonicamente do fundo para o topo da centrífuga. Além disso, a forma radial do escoamento induzido pelo coletor não se preserva por si mesmo, como ocorre com o acionamento térmico na parede.

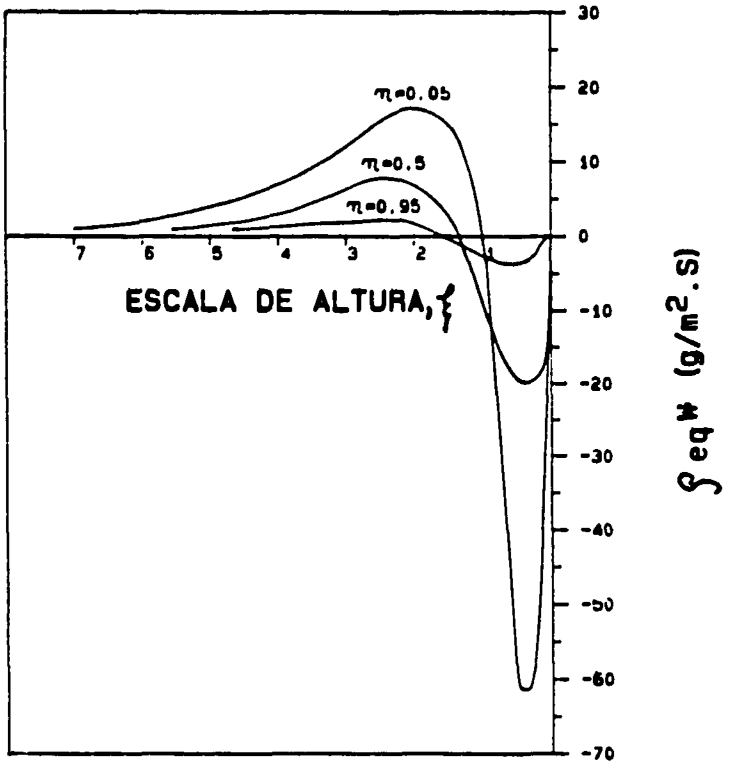


Figura 4: Perfis radiais da contracorrente em uma centrífuga com acionamento pelo coletor (extraída de OLANDER [29])

Apesar dessas dificuldades, a densidade de fluxo da contracorrente gerada pelo coletor pode ser aproximada a uma solução simples expressa pelo seguinte termo

$$(\rho_{eq}w)_s = B'_s f_s(\xi) h_s(\eta) \tag{143}$$

onde B'_s é um único fator de amplitude ajustável, quando se tem em vista usar essa solução na análise separativa. Para um modelo simplificado, a distribuição radial da contracorrente pelo coletor $f_s(\xi)$, um tanto mais larga do que a devida ao acionamento térmico na parede, pode ser admitida como apresentando a mesma forma da equação (141) adicionando-se, porém, um parâmetro ajustável $b \leq 1$, assim

$$f_s(\xi) = e^{-b\xi} - (1+2b\xi)e^{-2b\xi} \tag{144}$$

Para a variação axial da intensidade da contracorrente pode-se usar a equação aproximada

$$h_s(\eta) = \exp(-\eta/\eta_c) \tag{145}$$

onde η_c é um comprimento de decaimento axial.

Finalmente, o <u>acionamento do fluxo interno devido à injeção da alimentação</u> na posição axial η_F pode ser expresso, segundo OLANDER [29] por

$$(\rho_{eq}w)_F = \frac{2A^2}{\Pi a^2} P \; e^{-\xi}\left[1-e^{-\xi}\right] \tag{146.a}$$

para a seção de enriquecimento, e por

$$(\rho_{eq}w)_F = -\frac{2A^2}{\Pi a^2} W \; e^{-\xi}\left[1-e^{-\xi}\right] \tag{146.b}$$

na seção de recuperação.

Como no caso do acionamento térmico na parede, essas soluções são apenas aproximações. Além das aproximações feitas na obtenção das expressões (146), os efeitos do jato da alimentação (isto é, a distribuição do gás introduzido em um intervalo axial significativo), o ângulo da injeção da alimentação e a diminuição da velocidade do gás não são levados em conta nesse tratamento simplificado. No entanto, como na prática a introdução da alimentação tem um efeito de somente cerca de 10% da contracorrente total, as aproximações feitas pelas equações (146) são suficientemente adequadas para nossos fins.

4 - CÁLCULO DOS PARÂMETROS SEPARATIVOS

4.1- DESCRIÇÃO DO PROGRAMA

O cálculo dos parâmetros de separação de uma dada centrífuga de dimensões conhecidas (comprimento Z e raio a), operando com velocidade periférica $v=\omega a$ definida, será efetuado no presente trabalho através das equações provenientes da resolução da equação da difusão e convecção com variação axial do fluxo da contracorrente, apresentada no capítulo anterior.

O esquema numérico a ser seguido é descrito abaixo:

(1) a concentração da alimentação x_F, o corte θ e o fluxo de alimentação F são especificados, e são dadas a geometria do rotor (Z e a) e a velocidade periférica (através da velocidade angular ω ou da freqüência de rotação f);

(2) o valor da composição do produto x_P é estimado segundo a solução clássica de Onsager-Cohen, através da equação (67), com C_1 e C_5 calculados pelas respectivas equações (60) e (63), aproximando F(r) por $F(r,Z/2)$ ou $F(\xi,0.5)$;

(3) é calculado o valor da composição da corrente de rejeito x_W através do balanço de massa na centrífuga (eq.(06));

(4) a equação diferencial (97) é integrada numericamente com os coeficientes C_1 e C_5 calculados através das equações (98) e (99) para a seção de recuperação de $\eta=0$ até a posição de alimentação η_F definida, ou opcionalmente até que a composição x calculada no interior do rotor atinja o valor da composição da alimentação x_F, quando é desejada a condição de não mistura;

(5) a integração da equação diferencial continua na seção de enriquecimento, utilizando agora a equação (94) e as expressões (95) e (96) para os parâmetros C_1 e C_5, até que o topo da centrífuga (η=1) seja atingido;

(6) a composição no topo da centrífuga calculada no passo (5) é comparada com a estimativa inicial; se os dois valores não concordam satisfatoriamente, uma nova estimativa inicial é calculada e os cálculos repetidos a partir do passo (3);

(7) quando a solução converge, isto é, quando o valor da composição x_p estimado e o valor calculado são iguais, dentro de um erro aceitável, os parâmetros de separação são calculados através das equações (01), (02), (03) e (07).

Para efetuar essa seqüência de cálculo foi desenvolvido um programa numérico em linguagem TURBO-PASCAL para microcomputadores compatíveis com o IBM-PC, cuja listagem se encontra no Anexo I.

A fim de simplificar o equacionamento dentro do programa, definimos a equação diferencial da centrífuga a ser resolvida por

$$C_5/Z \frac{dx}{d\eta} = C_1 x(1-x) - \mathrm{Sec}(x_{extr}-x) \qquad (147)$$

onde as variáveis Sec e x_{extr} são, na seção de enriquecimento

$$\begin{aligned} \mathrm{Sec} &= P \\ x_{extr} &= x_p \end{aligned} \qquad (148.a)$$

e na seção de recuperação

$$\begin{aligned} \mathrm{Sec} &= -W \\ x_{extr} &= x_w \end{aligned} \qquad (148.b)$$

A definição das seções de enriquecimento e de recuperação é dada pela posição axial η, no caso de ser dada a posição da alimentação η_F, ou pelo valor da composição x, no caso de se adotar a condição de não mistura.

Da mesma forma, os parâmetros C_4 e C_5 são dados por

$$C_4 = \frac{\Delta M}{M} \int_0^{A^2} \left[F - \mathrm{Sec}\ \exp(-\xi) \right] d\xi \qquad (149)$$

$$C_5 = \Pi \rho D a^2 + \frac{1}{4 \Pi \rho D A^2} \int_0^{A^2} \frac{[F - \mathrm{Sec}\ \exp(-\xi)].[F - \mathrm{Sec}(1 - \xi/A^2)]}{1 - \xi/A^2} d\xi \qquad (150)$$

A função de fluxo $F(\xi,\eta)$ usada no presente cálculo, será a dada pela formulação simplificada de OLANDER [29]. A função de fluxo adotada, segundo a propriedade da superposição dos modos de acionamento da contracorrente, será composta por um termo devido ao acionamento térmico na parede F_w, um termo devido ao acionamento pelo coletor F_s e um termo devido ao fluxo gerado pela introdução da alimentação no rotor F_F:

$$F = F_w + F_s + F_F \qquad (151)$$

A função do fluxo devido ao acionamento térmico na parede é obtida a partir da expressão da densidade de fluxo $(\rho_{eq} w)_w$ dada pelas equações (140), (141) e (142):

$$F_w = B_w \left[e^{-b_w \xi} - (1 + b_w \xi)\ e^{-2 b_w \xi} \right] \left[4\eta(1-\eta) \right]^c \qquad (152)$$

Da mesma forma a componente da função de fluxo devida ao acionamento pelo coletor é obtida a partir das equações (143), (144) e (145):

$$F_s = B_s \left[e^{-b_s \xi} - (1 + b_s)\ e^{-2 b_s \xi} \right] e^{-\eta/\eta_s} \qquad (153)$$

e o termo devido ao fluxo gerado pela alimentação vem da equação (146):

$$F_r = Sec \left[2e^{-\xi} - e^{-2\xi} \right] \qquad (184)$$

A função de fluxo assim calculada satisfaz à condição

$$F(0,\eta) = \begin{cases} P & \text{na seção de enriquecimento} \\ -W & \text{na seção de recuperação} \end{cases}$$

e $F(A^2,\eta)$ tende a zero.

Os coeficientes B_w e B_s, expressos em $kgUF_6/a$, como já foi mencionado, são proporcionais à intensidade dos fluxos gerados pelo acionamento térmico na parede e pelo coletor estacionário na extremidade inferior do rotor, respectivamente. Os coeficientes b_w e b_s $(b\leq1)$ definem o perfil radial das respectivas funções de fluxo. Segundo OLANDER [29], o perfil de fluxo devido ao acionamento térmico na parede é bem representado com $b_w=1$, enquanto que o perfil devido ao coletor, por apresentar uma distribuição radial mais larga, pode ser definido por $b_s=1/2$. Os parâmetros c e η_s definem o decaimento axial do fluxo da contracorrente para cada tipo de acionamento, sendo adotado, segundo OLANDER, $c=2/3$ para a contracorrente térmica e $\eta_s=0.5$ para a contracorrente gerada pelo coletor.

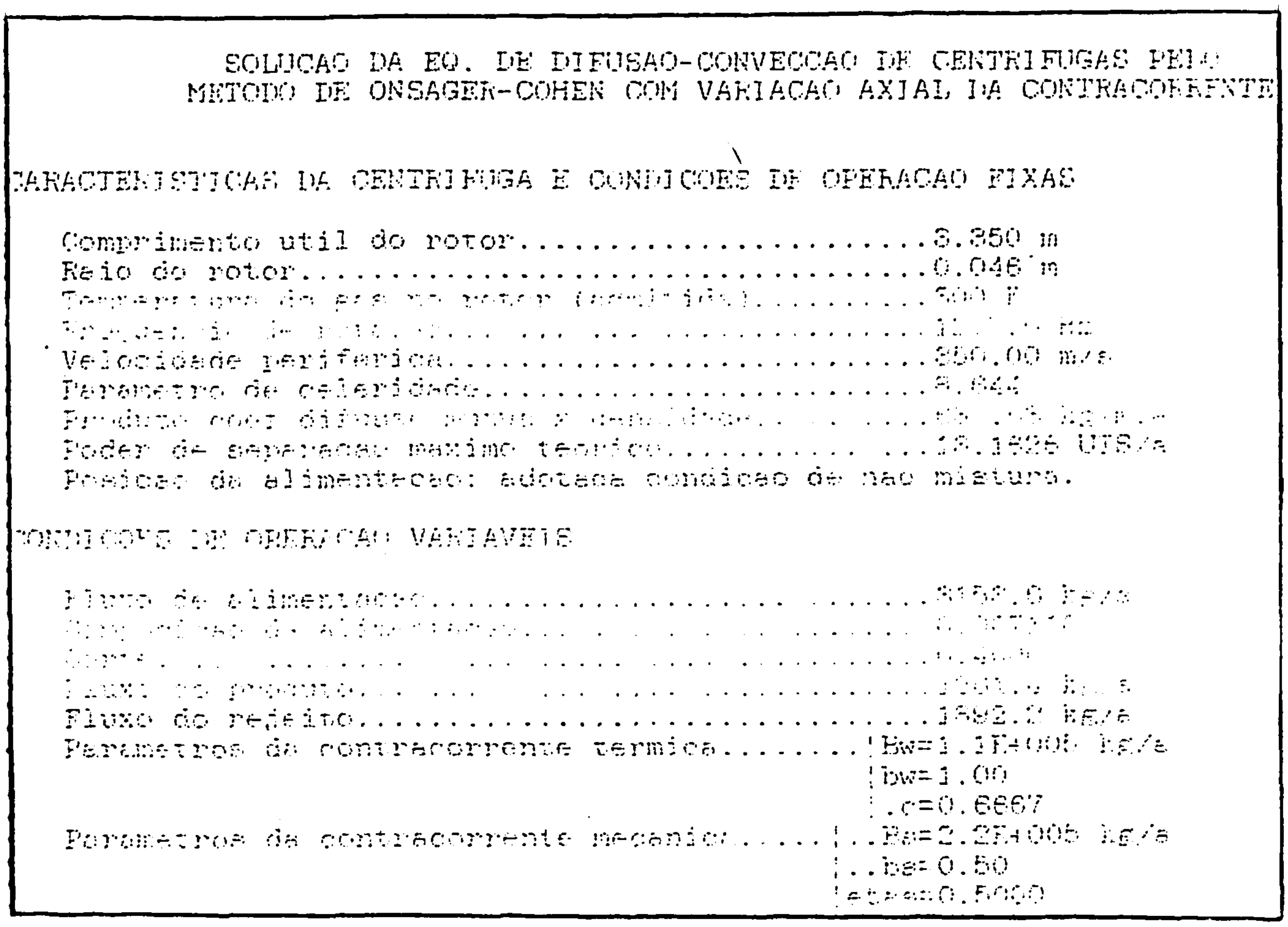
O programa, denominado SIMSEP2, ao ser carregado, inicialmente solicita os dados e condições de operação da centrífuga, necessários ao cálculos:

- o fluxo de alimentação F $(kgUF_6/a)$
- o corte θ
- o comprimento útil do rotor Z (m)
- o diâmetro interno do rotor 2a (m)
- a temperatura média admitida do gás T (K)
- a freqüência de rotação da centrífuga f (Hz)
- os coeficientes da contracorrente de origem térmica: B_w $(kgUF_6/a)$, b_w e c

- **os coeficientes da contracorrente de origem mecânica: B_s $(kgUF_6/s)$, b_s e η_s**
- Opção 1: posição de alimentação dada - entrar com $\eta_F(=1-Z_F/Z)$

  Opção 2: adotar condição de não mistura

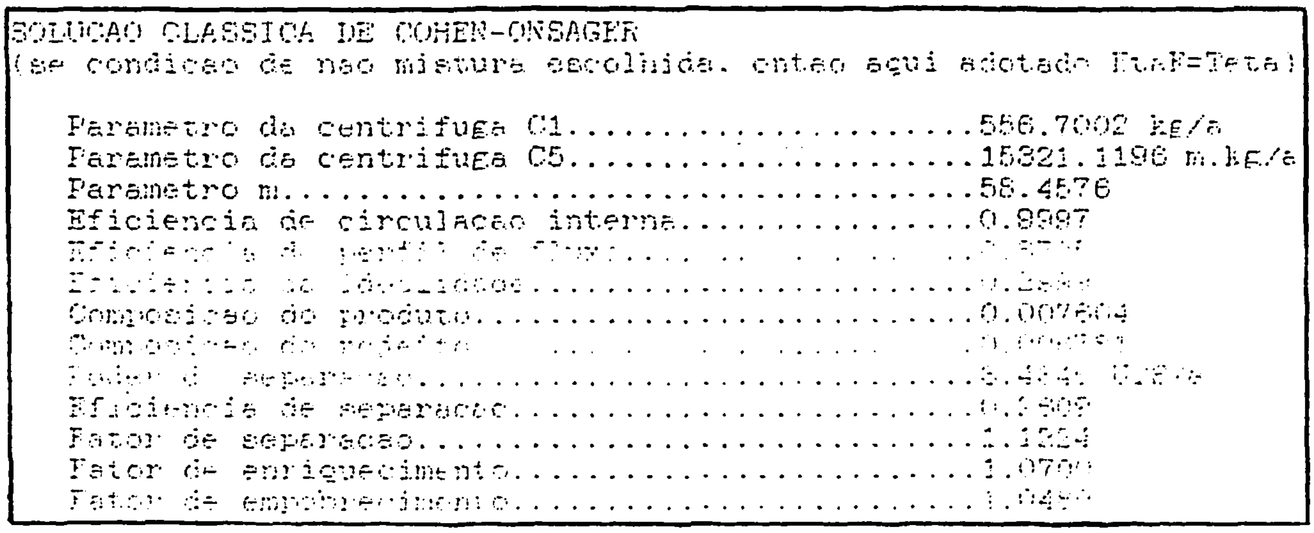
A composição da alimentação adotada é a do urânio natural x_F= 0.711%. A seguir são calculadas algumas grandezas características da centrífuga e do processo como a velocidade $v=2\Pi af$, o parâmetro de celeridade A^2 através da equação (82), o produto da densidade pela difusividade mútua do UF_6 ρD pela equação (30), o poder de separação máximo teórico δU^t_{max} através da equação (115) e os fluxos do produto P e do rejeito W. Os dados introduzidos e esses parâmetros são impressos, segundo a Figura 5.



```
            SOLUCAO DA EQ. DE DIFUSAO-CONVECCAO DE CENTRIFUGAS PEL
        METODO DE ONSAGER-COHEN COM VARIACAO AXIAL DA CONTRACORRENTE

ARACTERISTICAS DA CENTRIFUGA E CONDICOES DE OPERACAO FIXAS

   Comprimento util do rotor.......................3.350 m
   Raio do rotor...................................0.046 m
   Temperatura do gas no rotor (media).............[illegible]
   Frequencia de rotacao...........................[illegible] Hz
   Velocidade periferica...........................550.00 m/s
   Parametro de celeridade.........................8.644
   Produto coef difusao mutua x densidade..........[illegible]
   Poder de separacao maximo teorico...............18.1826 UTS/s
   Posicao da alimentacao: adotada condicao de nao mistura.

ONDICOES DE OPERACAO VARIAVEIS

   Fluxo de alimentacao............................3152.0 kg/s
   Composicao da alimentacao.......................[illegible]
   Corte...........................................[illegible]
   Fluxo do produto................................[illegible] kg/s
   Fluxo do rejeito................................1882.2 kg/s
   Parametros da contracorrente termica........|Bw=1.1E+006 kg/s
                                               |bw=1.00
                                               |.c=0.6667
   Parametros da contracorrente mecanica.....|..Bs=2.2E+005 kg/s
                                             |..bs=0.50
                                             |etas=0.5000
```

Figura 5: Listagem dos dados da centrífuga a ser simulada

Tem início então o cálculo da estimativa inicial da composição do produto x_p. Os parâmetros C_1 e C_5 são calculados pelas equações (149) e (150) com Sec=0 e para η=0.5. A composição x_p é então calculada pela equação (67). A composição do rejeito x_w é obtida pelo balanço material do componente desejado (06). Os demais parâmetros separativos são então calculados pelas equações (01), (02) e (03) para os fatores de enriquecimento β, empobrecimento γ e separação α, o poder de separação δU é obtido através da equação (07) e as eficiências de separação e, do perfil de fluxo e_f e de circulação e_c usando respectivamente as equações (122), (131) e (118), com o parâmetro m calculado pela equação (132). Esses parâmetros são também impressos como é mostrado na Figura 6.

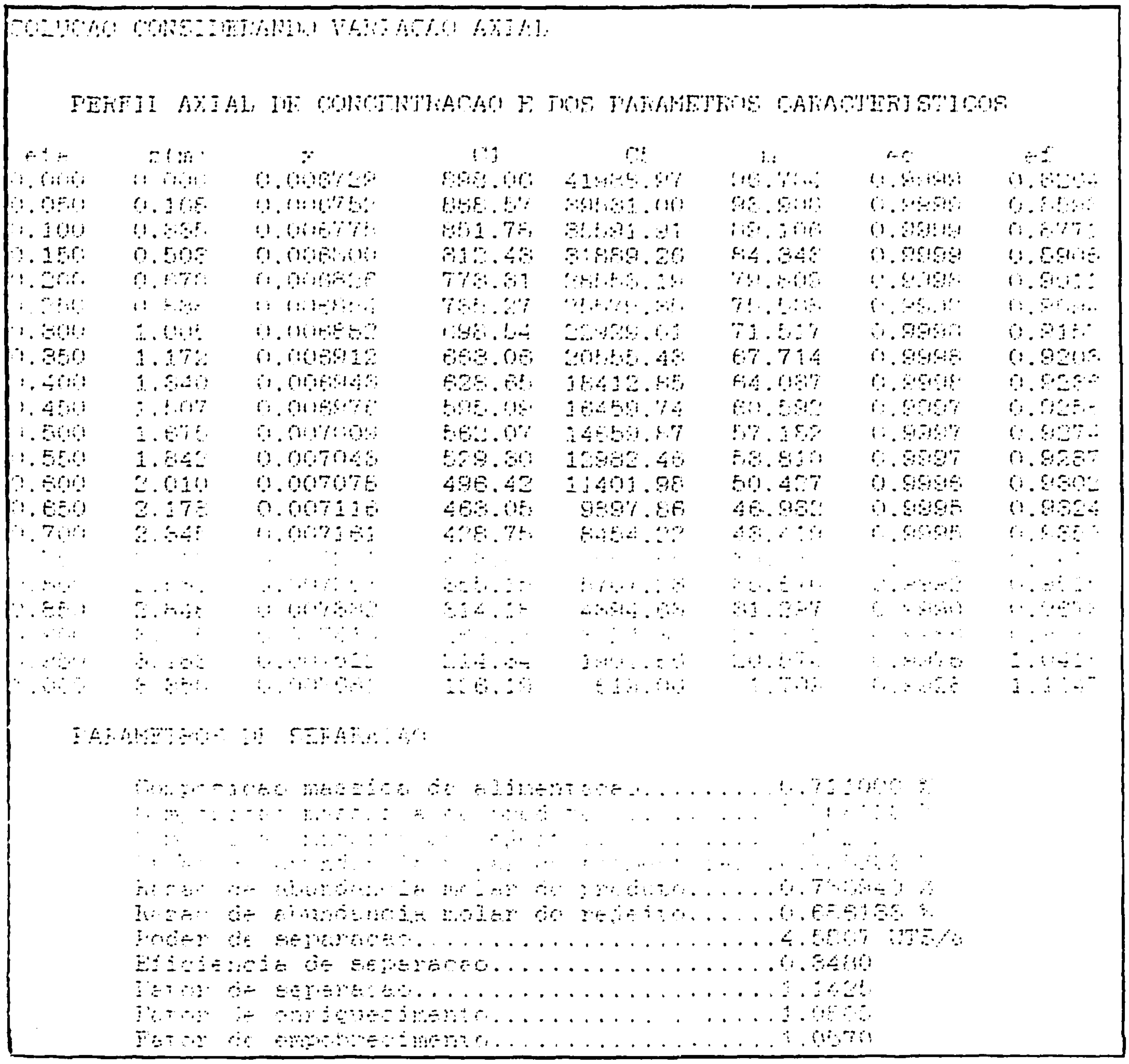


```
SOLUCAO CLASSICA DE COHEN-ONSAGER
(se condicao de nao mistura escolhida. entao aqui adotado FuaF=Teta)

   Parametro da centrifuga C1......................556.7002 kg/a
   Parametro da centrifuga C5......................15321.1196 m.kg/a
   Parametro m.....................................58.4576
   Eficiencia de circulacao interna................0.8997
   Eficiencia do perfil de fluxo...................[illegible]
   [illegible]......................................[illegible]
   Composicao do produto...........................0.007604
   Composicao do rejeito...........................[illegible]
   Poder de separacao..............................[illegible]
   Eficiencia de separacao.........................[illegible]
   Fator de separacao..............................1.1324
   Fator de enriquecimento.........................1.070[illegible]
   Fator de empobrecimento.........................1.04[illegible]
```

Figura 6: Listagem dos parâmetros separativos obtidos através da solução clássica de Cohen-Onsager, usados como estimativa inicial

O cálculo da composição x_p considerando a variação axial do fluxo interno da contracorrente é feito segundo o roteiro descrito acima. Após a convergência da composição x_p, os parâmetros que têm variação axial, a saber, a composição x, os parâmetros C_1 e C_5, o

parâmetro da contracorrente m e as eficiências de circulação e_c e do perfil de fluxo e_f são calculados ao longo do eixo do rotor. O parâmetros de separação característicos da centrífuga β, γ, α, δU e a **eficiência e são obtidos como no caso anterior pelas equações (01), (02), (03), (07) e (122) respectivamente. Todos esses resultados são** impressos no formato apresentado na Figura 7.



```
SOLUCAO CONSIDERANDO VARIACAO AXIAL

     PERFIL AXIAL DE CONCENTRACAO E DOS PARAMETROS CARACTERISTICOS

0.000    0.000     0.008729     898.00   41985.97   [illegible]   [illegible]   [illegible]
0.050    0.168     [illegible]  868.57   [illegible] [illegible]  [illegible]   [illegible]
0.100    [illegible] [illegible] 851.76  [illegible] [illegible]  [illegible]   0.8771
0.150    0.503     [illegible]  812.48   31889.26   84.343        0.9999        [illegible]
0.200    [illegible] [illegible] 778.61  [illegible] 79.808       [illegible]   [illegible]
0.250    [illegible] [illegible] 756.27  [illegible] [illegible]  [illegible]   [illegible]
0.300    [illegible] [illegible] [illegible] [illegible] 71.517   [illegible]   [illegible]
0.350    1.172     0.006912     663.06   20855.48   67.714        0.9998        [illegible]
0.400    1.340     [illegible]  [illegible] 18412.85 64.087       [illegible]   [illegible]
0.450    [illegible] [illegible] [illegible] 16459.74 [illegible] [illegible]   [illegible]
0.500    1.676     [illegible]  560.07   [illegible] [illegible]  0.9997        [illegible]
0.550    1.842     0.007045     529.80   12982.46   [illegible]   0.9997        0.9267
0.600    2.010     0.007076     496.42   11401.98   50.427        0.9996        0.9302
0.650    2.178     0.007116     463.05   9897.86    46.952        0.9995        0.9324
0.700    [illegible] 0.007161   428.75   [illegible] [illegible]  0.9995        [illegible]
[illegible]
[illegible]
[illegible]
[illegible]
[illegible]                                                                     1.041
[illegible]                                                                     1.114

   [illegible]

      [illegible]
      [illegible]
      [illegible]
      [illegible]
      [illegible]
      Razao de abundancia molar do rejeito......0.656155 %
      Poder de separacao......................4.5067 UTS/a
      Eficiencia de separacao.................0.3480
      Fator de separacao......................1.1424
      Fator de enriquecimento.................1.0800
      Fator de empobrecimento.................1.0570
```

Figura 7: Apresentação dos resultados separativos da centrífuga, considerando variação axial da contracorrente

4.1.1 - Métodos Numéricos Utilizados

As integrais que aparecem nas equações de C_1 e C_5 são resolvidas numericamente utilizando a Regra de Simpson [8]. No programa em linguagem Pascal, isto é feito através da função INTEGRAL, que se encontra listada juntamente com o programa SIMSEP2 no Anexo I. A integral $\int_a^b f(x)dx$ com $y=f(x)$ é calculada numericamente através da fórmula

$$I = \frac{h}{3}\left[y_0+4y_1+2y_2+4y_3+2y_4+\ \ldots\ +2y_{n-4}+4y_{n-3}+2y_{n-2}+4y_{n-1}+y_n\right] \qquad (155)$$

onde h é o passo de integração dado por

$$h = \frac{b-a}{n} \qquad (156)$$

O número de intervalos n para a integração na direção radial foi avaliado através do cálculo dos parâmetros C_1 e C_5 e do poder de separação δU obtidos na resolução da equação fundamental da difusão e convecção de Onsager-Cohen (equações 60, 63, 67, 68 e 07). Os cálculos foram efetuados considerando uma centrífuga com as seguintes características, definidas por OLANDER [29]:

comprimento do rotor $Z = 3.35$ m
diâmetro interno do rotor $2a = 0.183$ m
temperatura média do gás $T = 300$ K
velocidade periférica $v = 700$ m/s
fluxo de alimentação $F = 3153.6$ kgUF_6/a
corte $\theta = 0.4$
coeficiente da contracorrente térmica $B_w = 107222.4$ kg/a
coeficiente da contracorrente mecânica $B_s = 220752$ kg/a

A influência do número de intervalos n sobre o resultado dos parâmetros C_1 e C_5 pode ser observada nas Figuras 8 e 9 respectivamente para diferentes posições axiais η. Na Figura 10 é mostrada a variação do valor do poder de separação calculado com o número de intervalos para a integração radial.

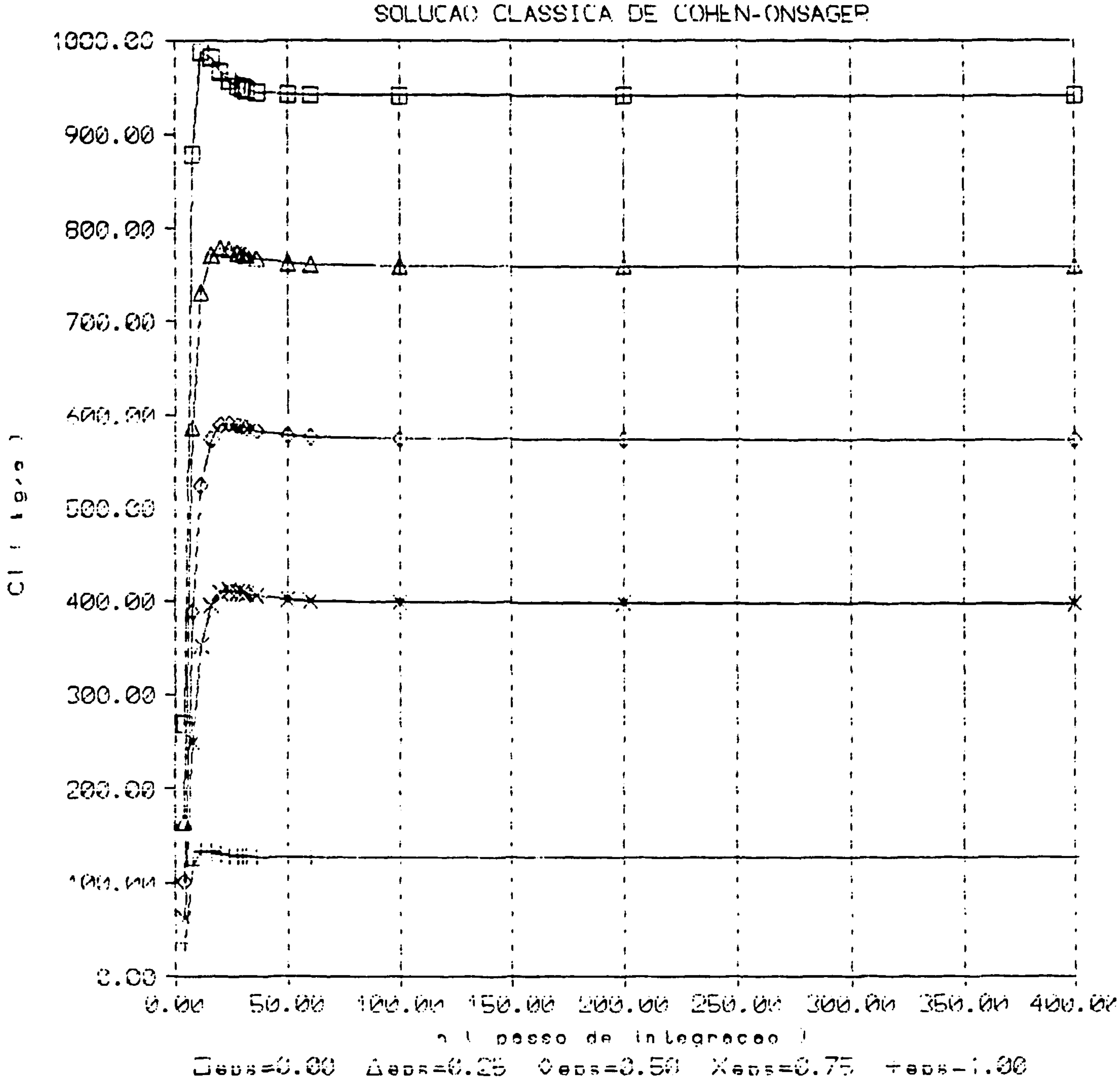


Figura 8: Variação do parâmetro C_1 com o número de intervalos radiais utilizado em seu cálculo

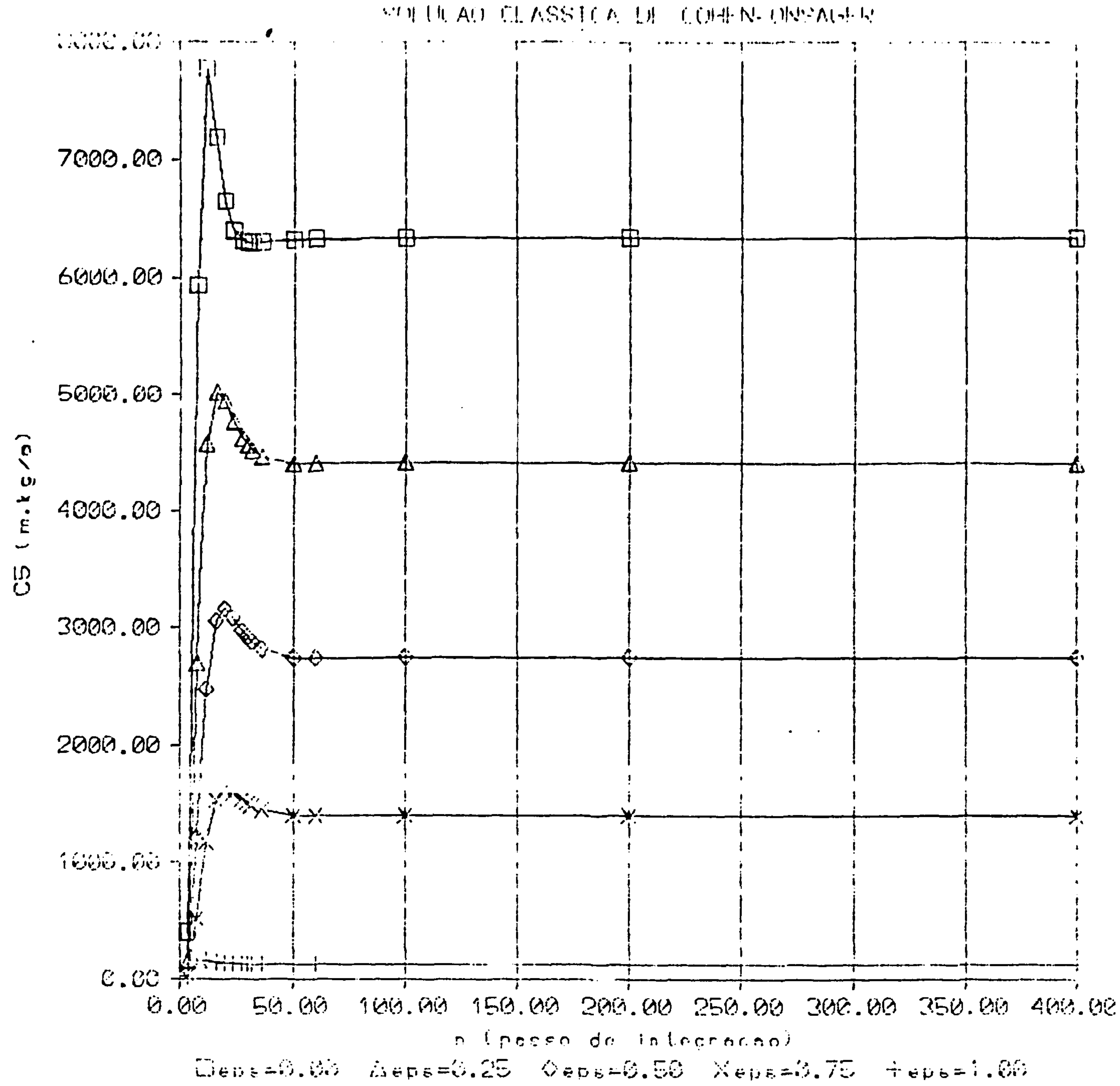


Figura 9: Variação do parâmetro C_5 com o número de intervalos radiais utilizado em seu cálculo

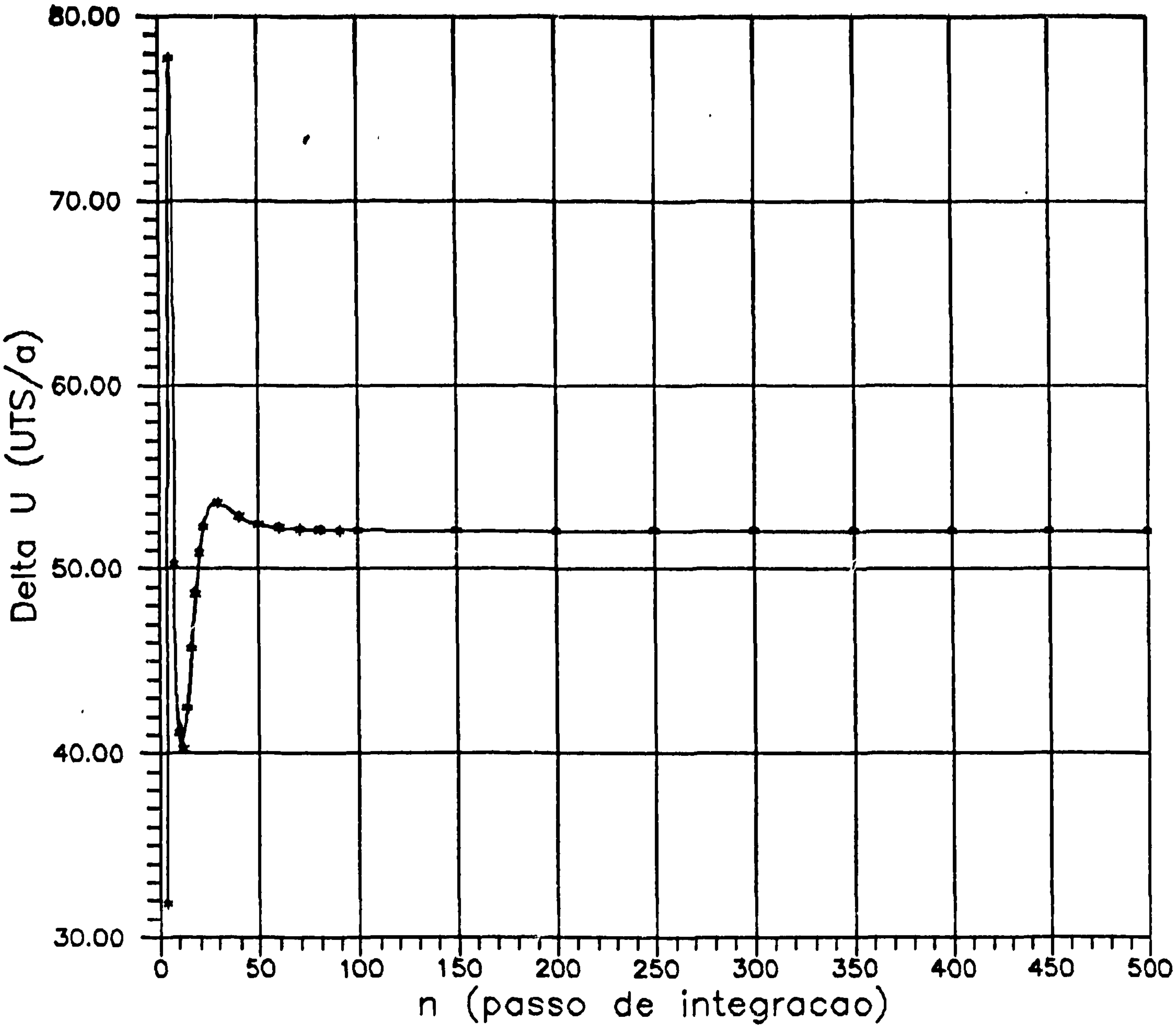


Figura 10: Variação do poder de separação δU calculado através da solução de Cohen-Onsager com o número de intervalos radiais utilizado em seu cálculo

Com base nas Figuras 8 a 10 escolhemos n=100 intervalos na direção radial para o cálculo das integrais.

A solução da equação diferencial definida pela expressão (147) e pela função EQDIF no programa SIMSEP2, é feita pelo método de Runge-Kutta de quarta ordem.

Esse método tem três propriedades distintas:

1- é um método de um estágio: para determinar y_{m+1} precisamos somente da informação disponível no ponto precedente, x_m e y_m;

2- concorda com a resolução de equações diferenciais por Série de Taylor até os termos em h^4;

3- não exige o cálculo de quaisquer derivadas de f(x,y), mas somente da própria função.

Seja a equação diferencial y'=f(x,y), o valor da variável y no estágio m+1 é dado por

$$y_{m+1} = y_m + \frac{h}{6}\left[k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4 \right] \quad (157.a)$$

$$k_1 = f(x_m, y_m) \quad (157.b)$$

$$k_2 = f(x_m + h/2, y_m + hk_1/2) \quad (157.c)$$

$$k_3 = f(x_m + h/2, y_m + hk_2/2) \quad (157.d)$$

$$k_4 = f(x_m + h, y_m + hk_3) \quad (157.e)$$

onde h é o passo de integração, definido pela equação (156).

Este método exige o conhecimento do valor inicial da função, assim a equação é resolvida de $\eta=0$ até $\eta=1$ com $x(0)=x_w$ estimado . O passo de integração no presente caso é inversamente proporcional ao número de intervalos definidos na direção axial Nintz, inicialmente estimado em Nintz=20. Utilizando a regra prática de Collatz [8] temos que se

$$\left| \frac{k_2 - k_3}{k_1 - k_2} \right|$$

se tornar muito grande (no programa foi adotado o limite de 100) então o valor do passo deve ser diminuido, ou seja, o número de intervalos na direção axial Nintz deve ser aumentado.

A estimativa de um novo valor inicial para o cálculo da equação diferencial, descrita pelo passo (7) do esquema de cálculo apresentado, é feito pelo Método de Newton-Raphson [8].

Seja f(x) definida pela equação diferencial completa (seção de recuperação e de enriquecimento) mais o balanço de massa do isótopo leve na centrífuga e x a composição do produto x_p. Definimos

$$F(x) = f(x) - x = 0 \tag{158}$$

a equação cuja solução deve ser encontrada. A primeira estimativa de x_p é feita através da solução clássica de Cohen-Onsager. As estimativas seguintes são feitas segundo a expressão

$$x_n = x_{n-1} - \frac{F(x_{n-1})}{F'(x_{n-1})} \tag{159}$$

A derivada $F'(x_{n-1})$ é obtida numericamente através de um pequeno incremento Δx em x_{n-1} e o cálculo de F(x) para esse novo valor. Então a derivada é estimada por

$$F'(x_{n-1}) = \frac{F(x_{n-1}) - F(x_{n-1}+\Delta x)}{\Delta x} \tag{160}$$

Tendo em vista os primeiros resultados obtidos na convergência do sistema numérico, introduzimos um fator de amortecimento na fórmula de Newton-Raphson, cujo valor é variável. Assim o segundo termo do segundo membro da equação (159) é multiplicado por 1/amort. O valor inicial para a variável amort foi escolhido 2 para centrífugas de alta velocidade (v>500 m/s) e 1 para centrífugas de baixa velocidade (v<500 m/s). No caso do sistema divergir da solução, fato que é detectado através do aumento da relação $x_{calculado}/x_{inicial}$ até no máximo 10, o valor do fator de amortecimento é diminuido (amort é multiplicado por dois).

Estabelecemos como critério de convergência que a diferença entre o valor calculado numa iteração e o valor inicial estimado nessa mesma iteração seja menor que 1×10^{-8}. Esse valor foi escolhido com base na precisão usualmente observada em experiências de separação realizadas.

4.2- RESULTADOS OBTIDOS

Tendo o programa SIMSEP2 operacional, começamos então a utilizá-lo, adotando os dados da centrífuga padronizada no "Workshop" de Roma [36]:

$v = 600$ m/s

$2a = 0.5$ m

$Z/d = 10 \Rightarrow Z = 5$ m

$T = 320$ K

e os parâmetros da contracorrente, definidos por OLANDER [29]:

$b_w = 1$

$c = 0.66$

$b_s = 0.5$

$\eta_s = 0.5$

Assim temos cinco variáveis a serem exploradas e analisadas, a saber: o fluxo de alimentação F, o corte ϑ, a posição axial da alimentação no interior do rotor η_F e os coeficientes da intensidade da contracorrente devido ao acionamento térmico na parede B_w e devido ao acionamento pelo coletor B_S.

4.2.1- Variação dos Parâmetros da Contracorrente B_w e B_S

Escolhendo as condições de operação

$F = 3000$ kgUF$_6$/a

$\theta = 0.5$

$\eta_F = 0.5$ (seção de enriquecimento = seção de recuperação) calculamos o desempenho separativo da centrífuga, utilizando os dados acima, para diversos parâmetros da contracorrente B_w e B_s. Os valores do poder de separação δU assim obtidos se encontram na Tabela 1. Esses resultados podem ser representados em três dimensões pela superfície apresentada na Figura 11 ou na forma de curvas de nível como é mostrado na Figura 12.

TABELA 1

Valores do poder de separação δU (UTS/a) da centrífuga de Roma para diversos coeficientes da contracorrente B_w e B_s (kg/a)

$F=3000$ kg/a $\theta=0.5$ $\eta_F=0.5$

$b_w=1$ $c=0.66$ $b_s=0.5$ $\eta_s=0.5$

Bw (kg/a) Bs (kg/a)	0	10 000	50 000	100 000	150 000	200 000	250 000	300 000
0	-	-	-	17.50	29.97	37.12	39.12	37.90
[illegible]	-	-	-	[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]
50 000	-	-	15.99	32.24	42.03	45.10	45.12	41.95
100 000	-	-	30.42	43.10	45.42	46.55	45.40	41.25
150 000	-	30.05	40.97	48.50	50.20	45.12	44.15	39.68
[illegible]	[illegible]	39.47	45.65	[illegible]	50.08	46.76	42.91	37.75
[illegible]	[illegible]	44.45	[illegible]	[illegible]	[illegible]	44.34	[illegible]	[illegible]
[illegible]	46.24	[illegible]	[illegible]	46.57	[illegible]	42.61	[illegible]	[illegible]
350 000	47.55	48.42	48.54	45.48	44.75	40.35	35.72	31.56
400 000	45.11	45.55	46.51	46.43	42.41	37.55	33.51	29.55
450 000	47.74	47.94	47.15	44.16	39.95	35.55	31.37	27.57
[illegible]	46.71	46.62	[illegible]	[illegible]	37.45	[illegible]	[illegible]	[illegible]

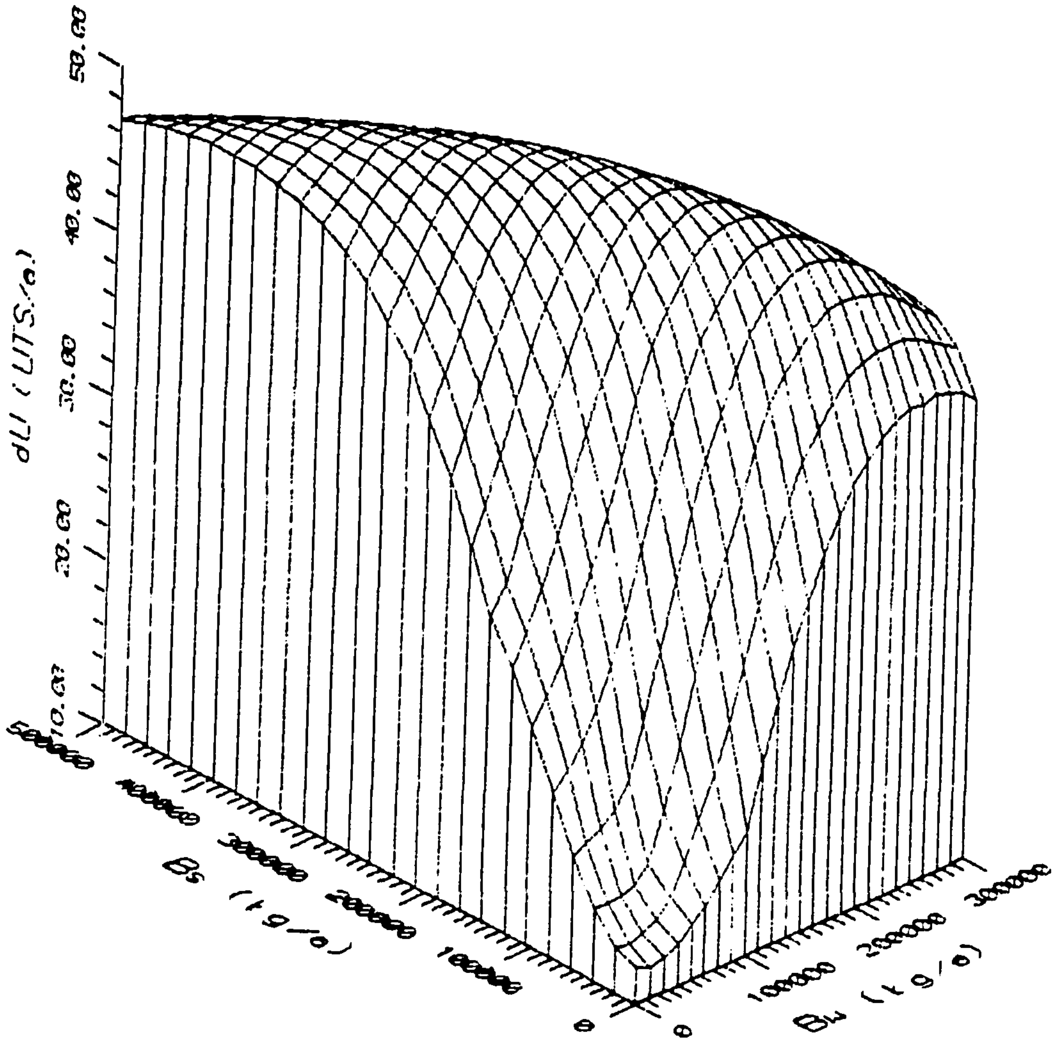


Figura 11: Variação do poder de separação δU da centrífuga de Roma com os parâmetros de intensidade da contracorrente B_w e B_s

$F=3000$ kg/a $\quad \theta=0.5 \quad \eta_F=0.5$

$b_w=1 \quad c=0.66 \quad b_s=0.5 \quad \eta_s=0.5$

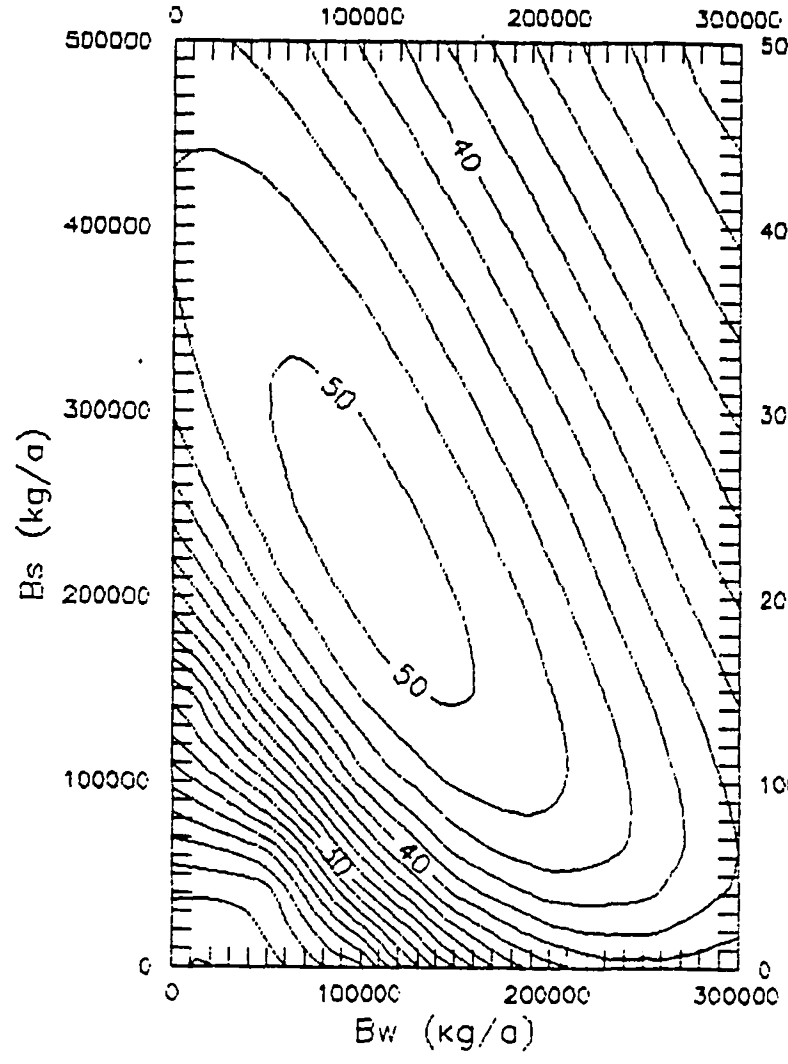


Figura 12: Curvas de nível do poder de separação δU da centrífuga de Roma com os parâmetros de intensidade da contracorrente B_w e B_s

$F=3000$ kg/a $\quad \theta=0.5 \quad \eta_F=0.5$

$b_w=1 \quad c=0.66 \quad b_s=0.5 \quad \eta_s=0.5$

As duas figuras mostram que existe um par dos parâmetros B_w e B_s ótimo que maximiza o poder de separação da centrífuga para as condições de operação especificadas. O poder de separação nesse ponto é maior do que o de uma centrífuga cuja geração da contracorrente é puramente térmica (B_s=0) ou puramente mecânica (B_w=0). Assim a otimização de uma centrífuga deve levar em conta simultaneamente os dois mecanismos de geração da contracorrente.

Entre os pontos calculados na Tabela 1, os parâmetros B_w=100000 kg/a e B_s=250000 kg/a apresentaram o melhor desempenho separativo.

4.2.2- Variação dos Parâmetros de Operação F e θ

Adotando o par

$$B_w = 100\ 000 \text{ kg/a}$$

$$B_s = 250\ 000 \text{ kg/a}$$

vamos agora avaliar a influência dos parâmetros externamente controláveis, ou seja, as condições de operação da centrífuga: o fluxo de alimentação F e o corte θ.

Novamente, mantendo os demais dados fixos nos valores já citados e variando somente o fluxo F e o corte θ, obtivemos os resultados do poder de separação δU apresentados na Tabela 2 para cada ponto. Assim como no item anterior as Figuras 13 e 14 representam os valores da Tabela 2 na forma de uma superfície e de curvas de nível respectivamente.

TABELA 2

Valores do poder de separação δU (UTS/a) da centrífuga de Roma
para diversos fluxos de alimentação F e corte θ

B_w= 100000 kg/a B_s=250000 kg/a η_F=0.5
b_w=1 c=0.66 b_s=0.5 η_s=0.5

corte F (kg/a)	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8
1 000	19.32	30.07	33.04	32.99	34.05	25.95	24.23	-
1 500	26.03	39.18	44.52	44.90	41.95	36.64	29.55	-
2 000	31.34	45.64	50.85	50.86	46.65	40.70	32.91	23.54
2 500	35.54	50.11	54.49	53.52	49.40	43.15	35.14	25.41
3 000	38.86	53.05	56.64	55.12	50.51	44.59	36.66	26.86
3 500	41.47	54.92	57.61	55.65	51.87	45.39	37.74	28.05
4 000	43.50	55.93	$\boxed{57.76}$	55.54	51.87	45.76	35.50	29.05
4 500	[illegible]	55.81	57.34	54.34	[illegible]	45.32	[illegible]	[illegible]
5 000	45.26	56.22	55.54	54.04	50.88	45.57	33.83	31.65

Pelas Figuras 13 e 14, verificamos que existe uma condição de operação ótima para a centrífuga de Roma com alimentação no meio do rotor (η_F=0.5) e cuja contracorrente é definida pelos coeficientes B_w=100000 kg/a e B_s=250000 kg/a. Dentre os pontos calculados essas condições são: o fluxo de alimentação F=4000 kg/a e o corte θ=0,3.

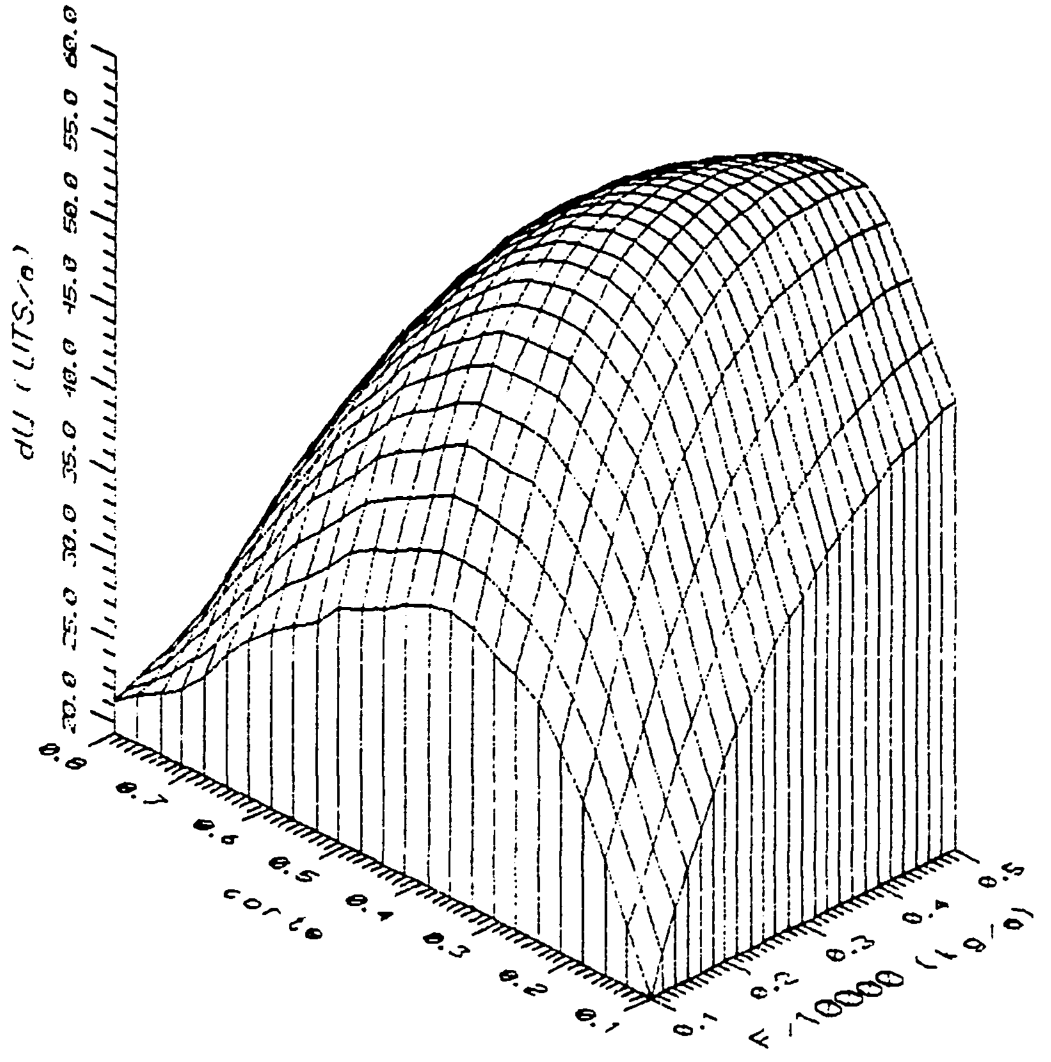


Figura 13: Variação do poder de separação δU da centrifuga de Roma com o fluxo de alimentação F e com o corte θ

B_w=100000 kg/a B_s=250000 kg/a η_F=0.5

b_w=1 c=0.66 b_s=0.5 η_s=0.5

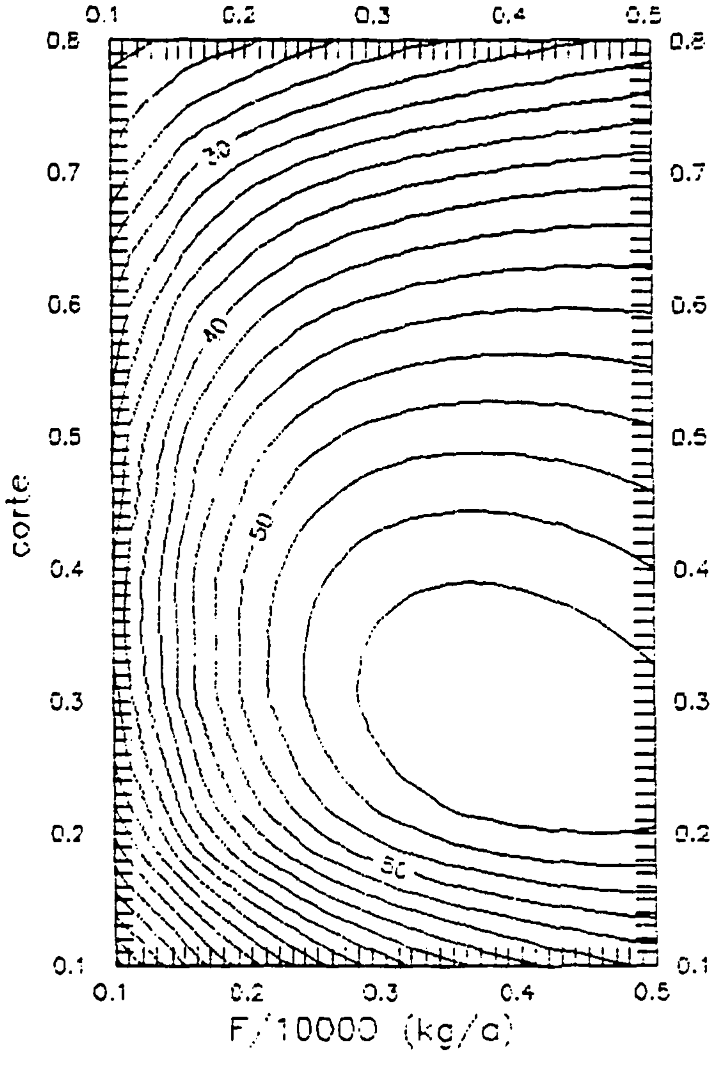


Figura 14: Curvas de nível do poder de separação δU da centrífuga de Roma com o fluxo de alimentação F e com o corte θ

B_w=100000 kg/a B_s=250000 kg/a η_F=0.5

b_w=1 c=0.66 b_s=0.5 η_s=0.5

Também foram construídos os gráficos das Figuras 15 e 16 do poder de separação δU com o fluxo de alimentação e dos fatores de separação α, de enriquecimento β e de empobrecimento γ com o fluxo de alimentação F respectivamente para o corte θ=0.5. Através desses gráficos podemos visualizar melhor a influência do fluxo de alimentação sobre o desempenho de uma centrífuga e comparar o formato das curvas com os usualmente obtidos em ensaios experimentais.

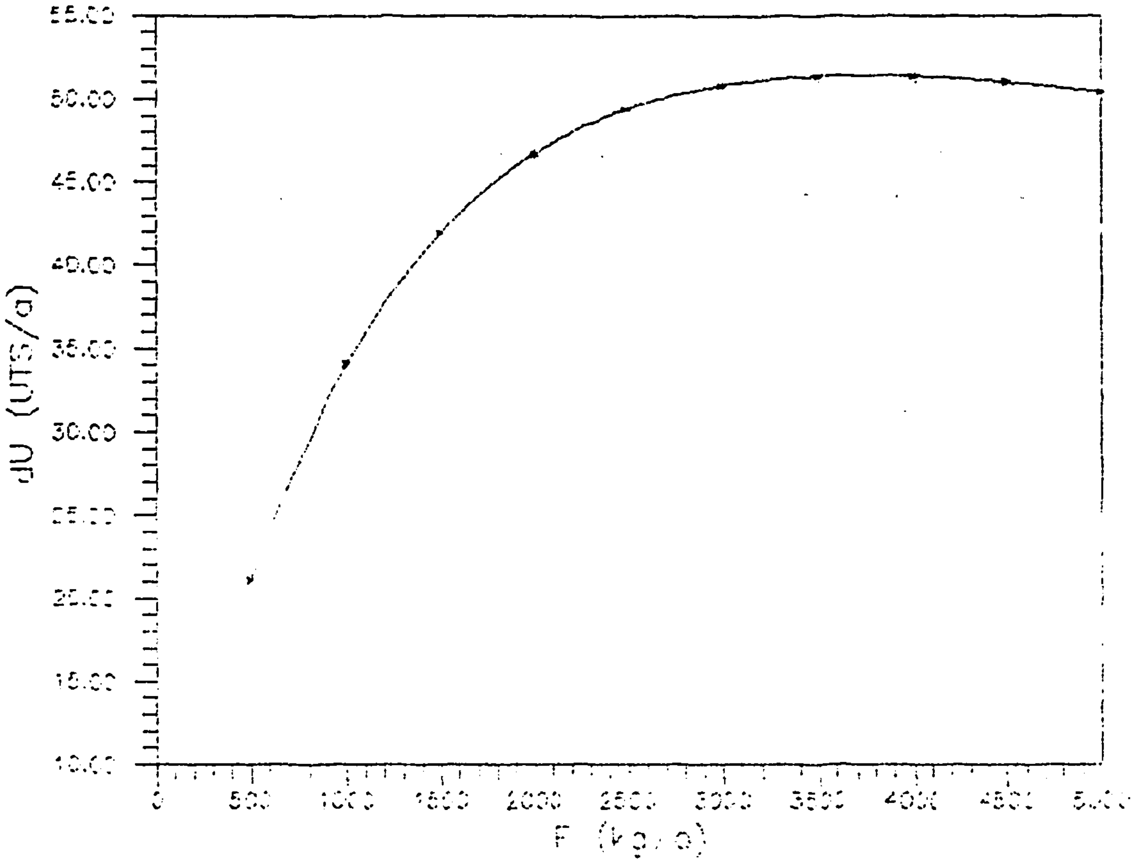


Figura 15: Variação do poder de separação δU da centrífuga de Roma com o fluxo de alimentação F

B_w=100000 kg/a B_s=250000 kg/a η_F=0.5 θ=0.5

b_w=1 c=0.66 b_s=0.5 η_s=0.5

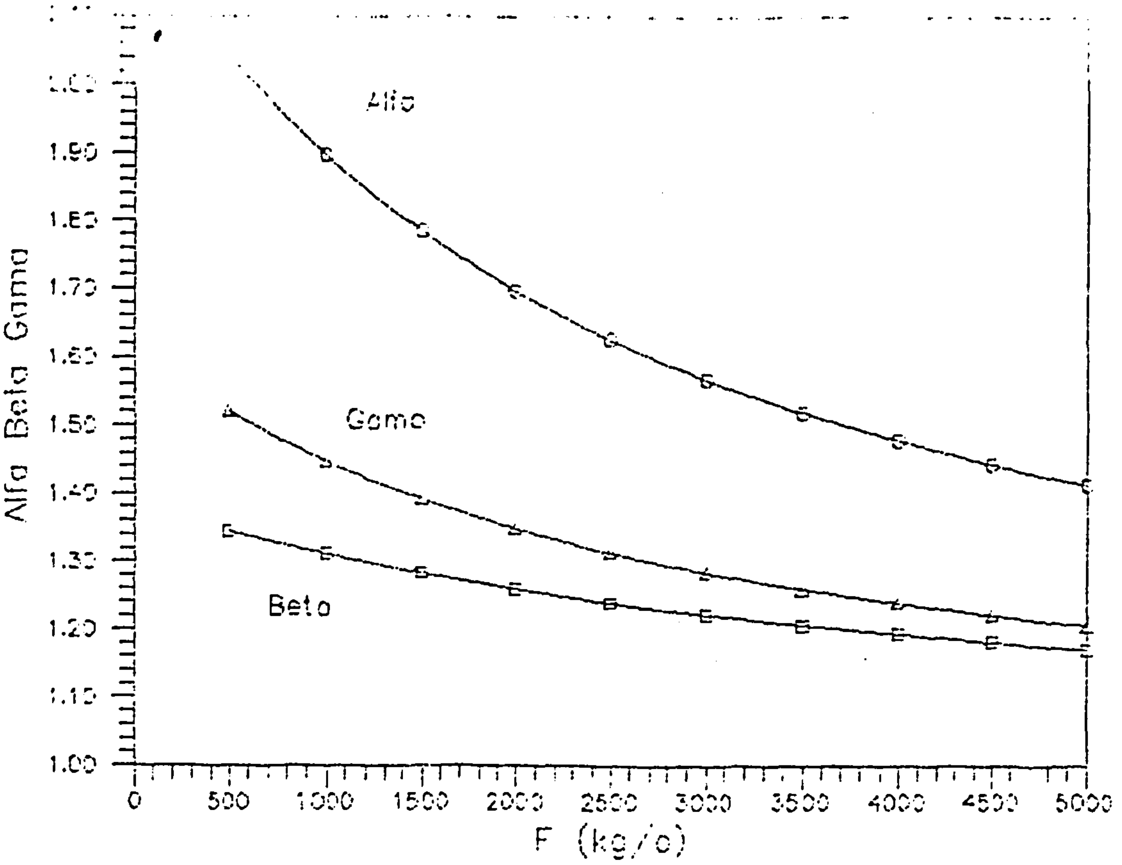


Figura 16: Variação dos fatores de separação α, enriquecimento β e empobrecimento γ da centrífuga de Roma com o fluxo de alimentação F

B_W=100000 kg/a B_S=250000 kg/a η_F=0.5 θ=0.5

b_W=1 c=0.66 b_S=0.5 η_S=0.5

A influência do corte θ também pode ser observada isoladamente nas Figuras 17 e 18 para o fluxo de alimentação F=3000 kg/a com a posição de alimentação fixa η_F=0.5, como no resto desse estudo, e nas Figuras 19 e 20 para a condição de não mistura, na qual η_F é definido pela posição axial em que a composição local é igual à composição da corrente de alimentação, $x=x_F$=0.00711. A variação de η_F com o corte é mostrada na Figura 21.

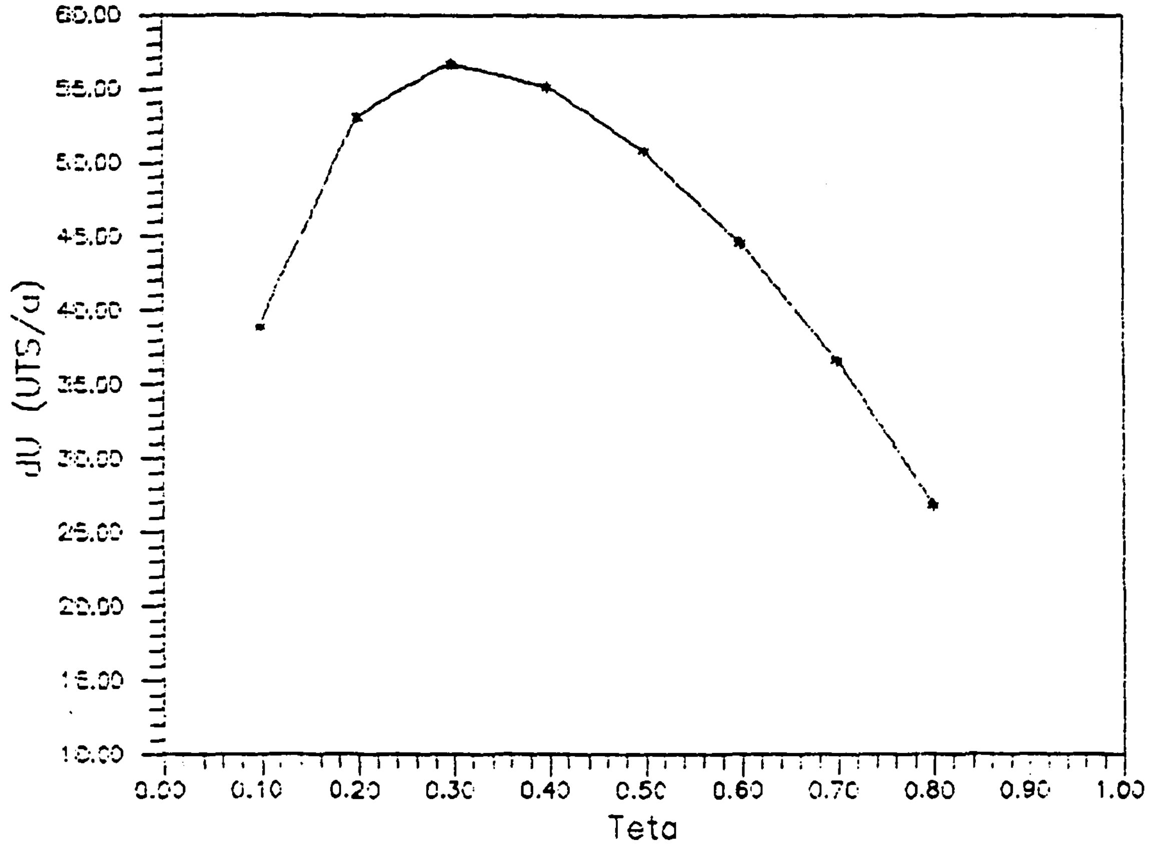


Figura 17: Variação do poder de separação δU da centrífuga de Roma com o corte θ

B_w=100000 kg/a B_s=250000 kg/a η_F=0.5   F=3000 kg/a

b_w=1   c=0.66 b_s=0.5 η_s=0.5

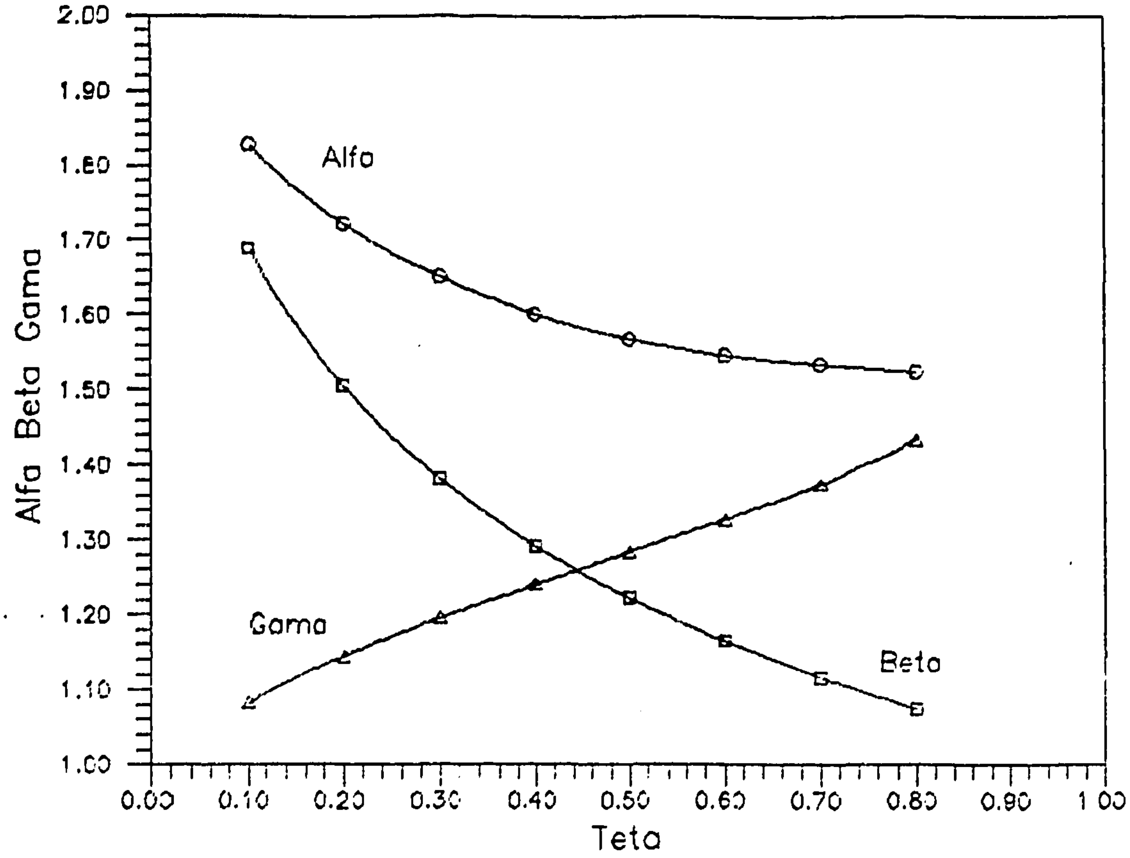


Figura 18: Variação dos fatores de separação α, enriquecimento β e empobrecimento γ da centrífuga de Roma com o corte θ

B_w=100000 kg/a B_s=250000 kg/a η_F=0.5 F=3000 kg/a

b_w=1 c=0.66 b_s=0.5 η_s=0.5

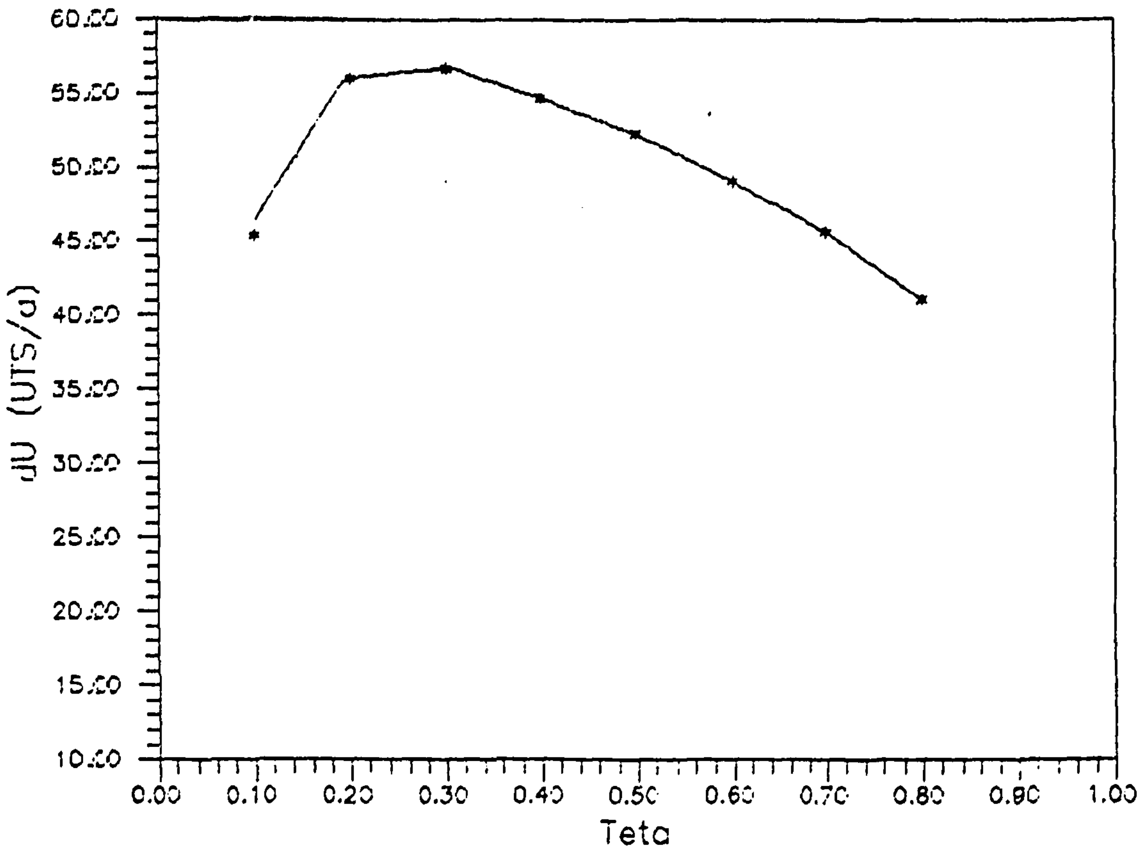


Figura 19: Variação do poder de separação δU da centrifuga de Roma com o corte θ

B_w=100000 kg/a B_s=250000 kg/a F=3000 kg/a

condição de não mistura

b_w=1 c=0.66 b_s=0.5 η_s=0.5

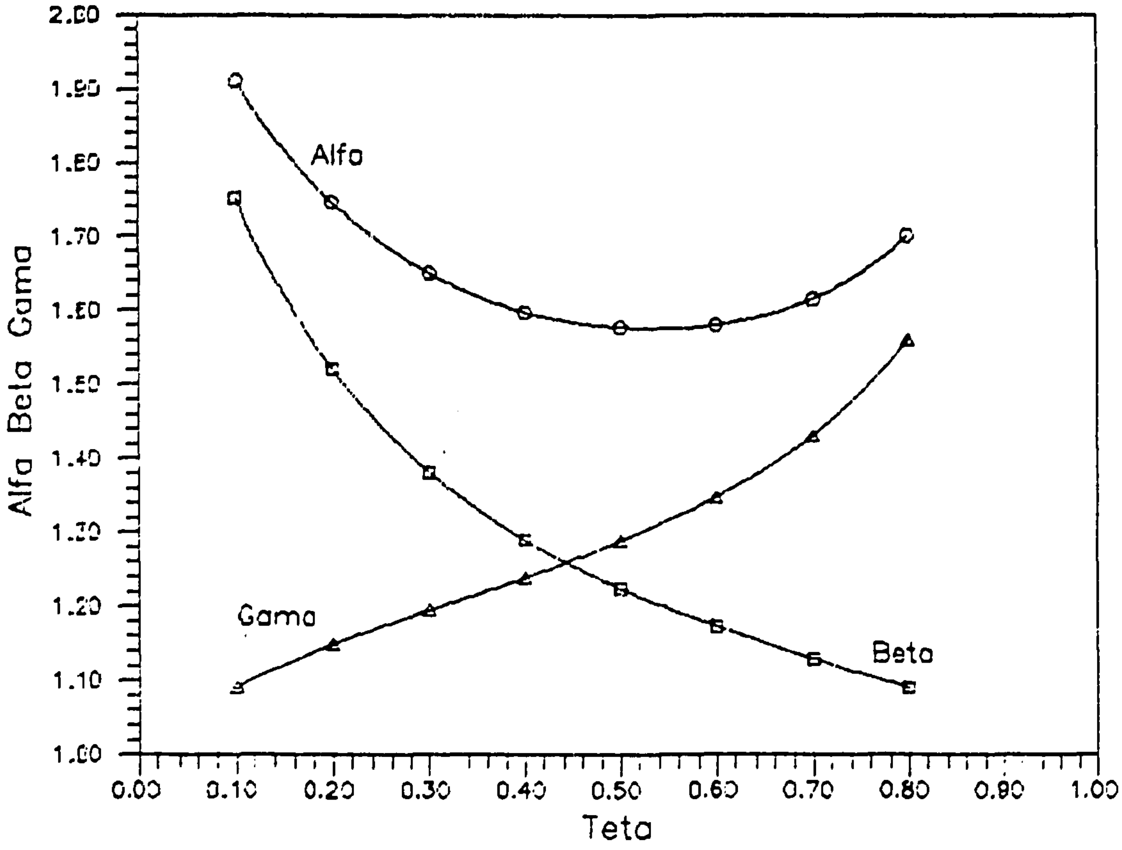


Figura 20: Variação dos fatores de separação α, enriquecimento β e empobrecimento γ da centrífuga de Roma com o corte θ

B_w=100000 kg/a B_s=250000 kg/a F=3000 kg/a

condição de não mistura

b_w=1 c=0.66 b_s=0.5 η_s=0.5

As curvas dos parâmetros de separação obtidas com uma posição de alimentação η_F fixo e com condição de não mistura, são bem semelhantes, no entanto a Figura 21 mostra que o ponto de alimentação ótimo para o caso da condição de não mistura varia quase linearmente com o corte θ.

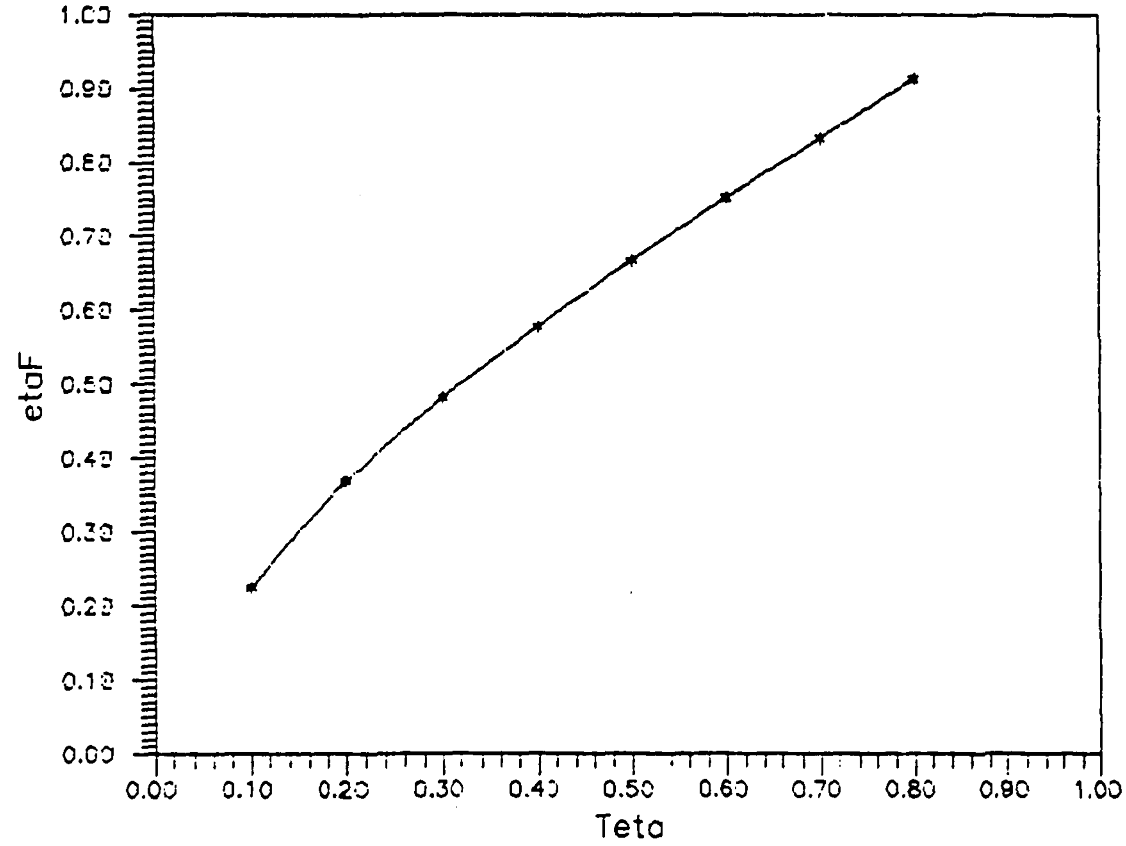


Figura 21: Variação da posição de alimentação η_F definida pela condição de não mistura em função do corte θ

B_w=100000 kg/a B_s=250000 kg/a F=3000 kg/a

condição de não mistura

b_w=1 c=0.66 b_s=0.5 η_s=0.5

4.2.3- Variação da Posição Axial de Alimentação η_F

Com o objetivo de avaliar a influência da posição axial da alimentação no interior do rotor da centrífuga, fixamos:

$F = 3000$ kg/a

$\theta = 0.5$

$B_W = 100\ 000$ kg/a

$B_S = 250\ 000$ kg/a

Os parâmetros de separação obtidos se encontram na Tabela 3 e são representados pelas Figuras 22 e 23. A centrífuga com $\eta_F=0$ se constitui toda por uma seção de enriquecimento (a alimentação é introduzida pela extremidade inferior) enquanto que $\eta_F=1$ representa uma centrífuga formada só por uma seção de recuperação (a alimentação é introduzida pela extremidade superior do rotor).

Por outro lado, adotando a condição de não mistura os resultados obtidos são

$\alpha = 1.5775$

$\beta = 1.2245$

$\gamma = 1.2883$

$\delta U = 52.24$ UTS/a

A posição de alimentação neste caso definida pela composição local $x=x_F=0.00711$ é $\eta_F=0.67$, como pode ser observado na Figura 25 do próximo item.

Notamos que a posição de alimentação que fornece o maior poder de separação, segundo a Figura 22 é diferente do valor obtido considerando a condição de não mistura.

TABELA 3

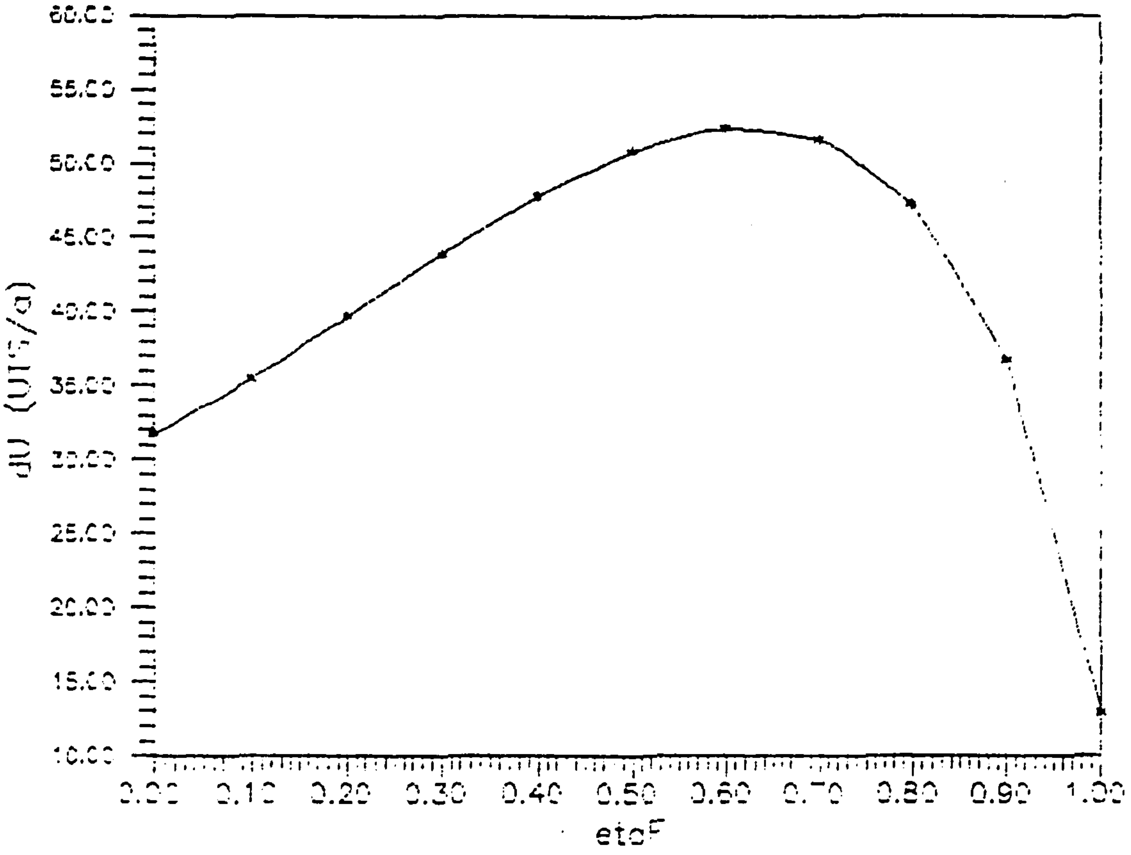
Parâmetros separativos da centrífuga de Roma com diversas posições axiais de alimentação η_F

$F=3000$ kg/a $\theta=0.5$ $B_W=100000$ kg/a $B_S=250000$ kg/a

η_F	Z_E(m)	α	β	γ	δU(UTS/a)
0.0	5.0	1.4257	1.1758	1.2126	31.74
0.1	4.5	1.4549	1.1856	1.2272	35.44
0.2	4.0	1.4870	1.1961	1.2431	39.65
0.3	3.5	1.5181	1.2061	1.2587	43.87
0.4	3.0	1.5460	1.2148	1.2726	47.75
0.5	2.5	1.5676	1.2215	1.2833	50.81
0.6	2.0	1.5787	1.2248	1.2889	52.41
0.65	1.75	1.5786	1.2248	1.2888	52.40
0.7	1.5	1.5735	1.2233	1.2863	51.67
0.8	1.0	1.5425	1.2138	1.2709	47.27
0.9	0.5	1.4649	1.1889	1.2322	36.74
1.0	0.0	1.2539	1.1128	1.1269	12.95

Nas listagens obtidas notamos que os parâmetros C_1 e C_5 e as eficiências e_C e e_f e conseqüentemente o parâmetro m não variam com a posição axial da alimentação. Isto é óbvio tendo em vista a expressão desses parâmetros.

A presente análise foi repetida para o corte $\theta=0.3$. Os resultados obtidos foram semelhantes aos de $\theta=0.5$, apresentando apenas um deslocamento do máximo das curvas para um valor de η_F maior.



<u>Figura 22</u>: Variação do poder de separação δU com a posição axial de alimentação η_F para a centrifuga de Roma

$F=3000$ kg/a $\theta=0.5$

$B_w=100000$ kg/a $B_s=250000$ kg/a

$b_w=1$ $c=0.66$ $b_s=0.5$ $\eta_s=0.5$

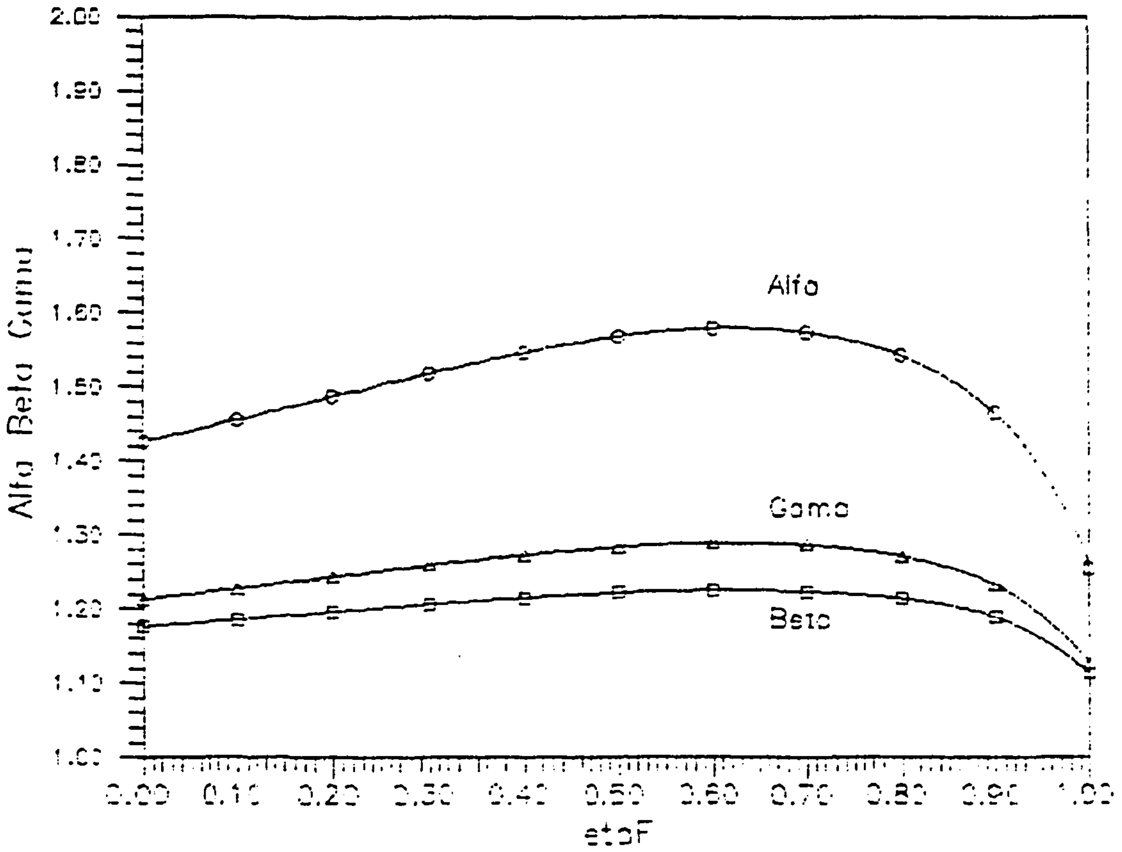


Figura 23: Variação dos fatores de separação α, enriquecimento β e empobrecimento γ com a posição axial de alimentação η_F para a centrifuga de Roma

$F=3000$ kg/a $\vartheta=0.5$

$B_w=100000$ kg/a $B_s=250000$ kg/a

$b_w=1$ $c=0.66$ $b_s=0.5$ $\eta_s=0.5$

4.2.4- Variação dos Parâmetros Internos da Centrífuga ao Longo do Eixo do Rotor

Vamos agora estudar o perfil axial da concentração do isótopo desejado x e dos demais parâmetros da centrífuga que apresentam variação axial, a saber os parâmetros C_1 e C_5, as eficiências e_C e e_f e o parâmetro da contracorrente m. Para isso escolhemos os resultados obtidos com os seguintes dados:

F = 3000 kg/a

$\theta = 0.5$

B_W = 100 000 kg/a $b_W = 1$ $c = 0.66$

B_S = 250 000 kg/a $b_S = 0.5$ $\eta_S = 0.5$

Os resultados assim obtidos encontram-se nas Tabelas 4 e 5.

Na Figura 24 é mostrado o perfil de concentração axial x para o caso em que a posição da alimentação η_F é definida em 0.5 $(Z_E=Z_S)$ e na Figura 25 observamos o perfil de concentração para o caso em que é adotada a condição de não mistura. Na Figura 24 observamos que a alimentação x_F=0.00711 é introduzida num ponto em que a concentração média é x=0.00679. Pela Figura 25 tiramos que a posição axial de alimentação em que não ocorre mistura isotópica é $\eta_F \cong 0.67$.

TABELA 4

Listagem'dos resultados obtidos para a centrifuga de Roma

F=3000 kg/a θ=0.5 η_F=0.5

B_W=100000 kg/a B_S=250000 kg/a

```
PERFIL AXIAL DE CONCENTRACAO E DOS PARAMETROS CARACTERISTICOS

 eta      z(m)       x           C1         C5          m        ec        ef
0.000    0.000    0.005549    1071.73    11123.62    8.788    0.9872    0.5580
0.050    0.250    0.005666    1041.57    10582.87    8.569    0.9866    0.5544
0.100    0.500    0.005787     987.21     9570.19    8.143    0.9851    0.5515
0.150    0.750    0.005910     932.28     8601.26    7.713    0.9835    0.5482
0.200    1.000    0.006037     879.27     7719.79    7.300    0.9816    0.5443
0.250    1.250    0.006165     828.83     6928.87    6.909    0.9795    0.5400
0.300    1.500    0.006295     781.03     6220.65    6.538    0.9771    0.5354
0.350    1.750    0.006424     735.70     5584.28    6.187    0.9745    0.5306
0.400    2.000    0.006552     692.55     5008.67    5.850    0.9716    0.5258
0.450    2.250    0.006677     651.25     4483.50    5.526    0.9683    0.5212
0.500    2.500    0.006791     611.45     3999.67    5.209    0.9645    0.5171
0.550    2.750    0.006874     572.74     3549.33    4.895    0.9599    0.5137
0.600    3.000    0.006962     534.74     3125.98    4.581    0.9545    0.5113
0.650    3.250    0.007056     497.01     2724.09    4.261    0.9478    0.5104
0.700    3.500    0.007157     459.07     2339.62    3.931    0.9392    0.5117
0.750    3.750    0.007269     420.38     1969.42    3.585    0.9278    0.5160
0.800    4.000    0.007396     380.24     1611.46    3.215    0.9118    0.5250
0.850    4.250    0.007546     337.68     1264.84. .2.810    0.8876    0.5419
0.900    4.500    0.007737     291.09      929.72    2.354    0.8471    0.5740
0.950    4.750    [illegible] [illegible] [illegible] [illegible] 0.7656  0.6450
1.000    5.000    0.008871     150.57      262.16    0.919    0.4577    1.0079

PARAMETROS DE SEPARACAO

    Composicao massica da alimentacao.........0.711000 %
    Composicao masssica do produto............0.867100 %
    Composicao massica do rejeito.............0.554900 %
    Razao de abundancia molar de alimentacao..0.725233 %
    Razao de abundancia molar do produto......0.885851 %
    Razao de abundancia molar do rejeito......0.565119 %
    Poder de separacao..........................[illegible] UTS/a
    Eficiencia de separacao...................0.9205
    Fator de separacao........................1.5675
    Fator de enriquecimento...................1.2215
    Fator de empobrecimento...................1.2833
```

TABELA 5

Listagem dos resultados obtidos para a centrífuga de Roma

F=3000 kg/a θ=0.5 condição de não mistura

B_W=100000 kg/a B_S=250000 kg/a

PERFIL AXIAL DE CONCENTRACAO E DOS PARAMETROS CARACTERISTICOS

eta	z(m)	x	C1	C5	m	ec	ef
0.000	0.000	0.005528	1071.73	11123.62	8.788	0.9872	0.5580
0.050	0.250	0.005645	1041.57	10582.87	8.569	0.9866	0.5544
0.100	0.500	0.005764	987.21	9570.19	8.143	0.9851	0.5515
0.150	0.750	0.005888	932.28	8601.26	7.718	0.9835	0.5482
0.200	1.000	0.006014	879.27	7719.79	7.300	0.9816	0.5443
0.250	1.250	0.006142	828.53	6928.87	6.909	0.9795	0.5400
0.300	1.500	0.006271	781.03	6220.65	6.538	0.9771	0.5354
0.350	1.750	0.006400	735.70	5584.28	6.187	0.9745	0.5306
0.400	2.000	0.006527	692.55	5008.67	5.850	0.9716	0.5258
0.450	2.250	0.006651	651.25	4483.50	5.526	0.9683	0.5212
0.500	2.500	0.006770	611.45	3999.67	5.209	0.9645	0.5171
0.550	2.750	0.006883	572.74	3549.33	4.895	0.9599	0.5137
0.600	3.000	0.006985	534.74	3125.93	4.581	0.9545	0.5113
0.650	3.250	0.007076	497.01	2724.09	4.261	0.9478	0.5104
0.700	3.500	0.007175	459.07	2339.62	3.931	0.9392	0.5117
0.750	3.750	0.007287	420.38	1969.42	3.585	0.9278	0.5160
0.800	4.000	0.007414	380.24	1611.46	3.215	0.9118	0.5250
0.850	4.250	0.007564	337.68	1264.84	2.810	0.8876	0.5419
0.900	4.500	0.007718	[illegible]	925.70	2.354	0.8471	[illegible]
0.950	4.750	0.008048	230.96	606.62	1.807	0.7658	0.6450
1.000	5.000	0.008692	150.57	262.15	0.919	0.4577	1.0079

PARAMETROS DE SEPARACAO

Composicao massica da alimentacao.........0.711000 %
Composicao massica do produto............0.869229 %
Composicao massica do rejeito............0.552771 %
Razao de abundancia molar da alimentacao..0.725233 %
Razao de abundancia molar do produto......0.888045 %
Razao de abundancia molar do rejeito......0.563868 %
Poder de separacao.......................11.2442 UTS/a
Eficiencia de separacao..................0.3298
Fator de separacao.......................1.5775
Fator de enriquecimento..................1.2245
Fator de empobrecimento..................1.2863

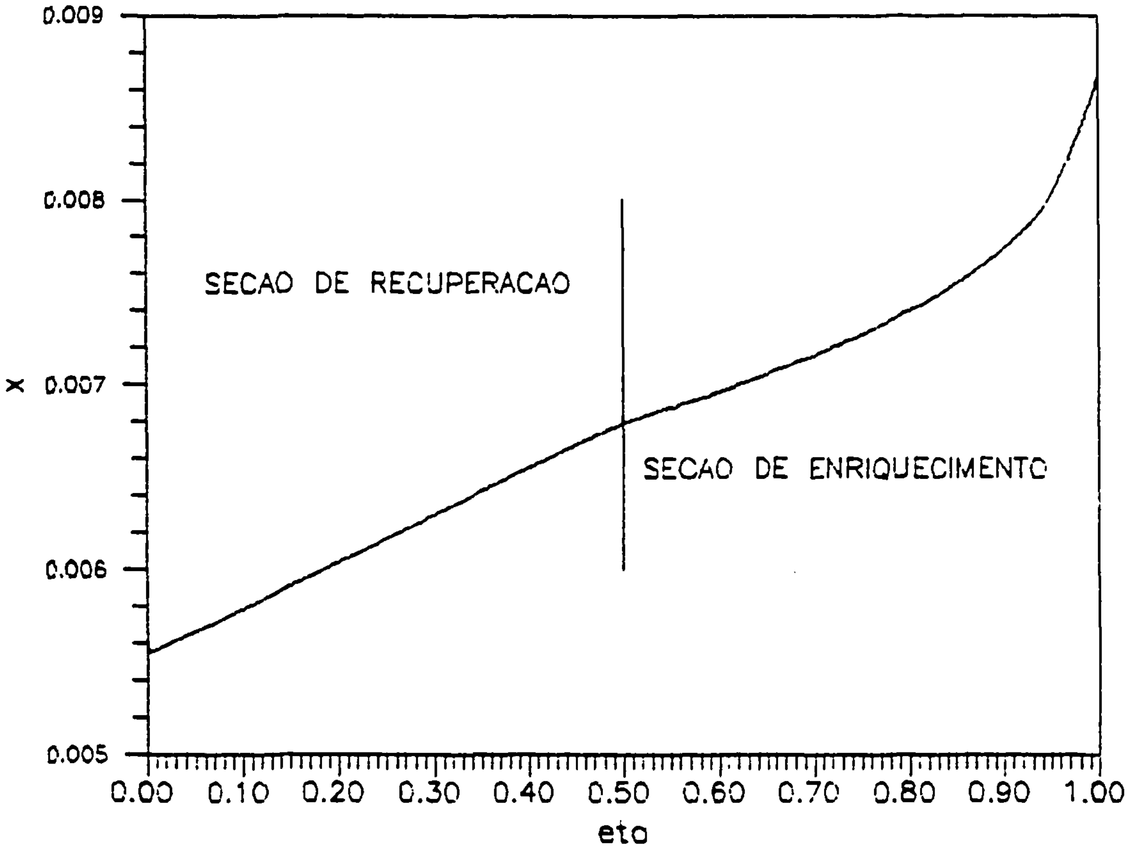


Figura 24: Gradiente axial de concentração do isótopo desejado x para a centrífuga de Roma

$F=3000$ kg/a $\theta=0.5$ $\eta_F=0.5$

$B_w=100000$ kg/a $B_s=250000$ kg/a

$b_w=1$ $c=0.66$ $b_s=0.5$ $\eta_s=0.5$

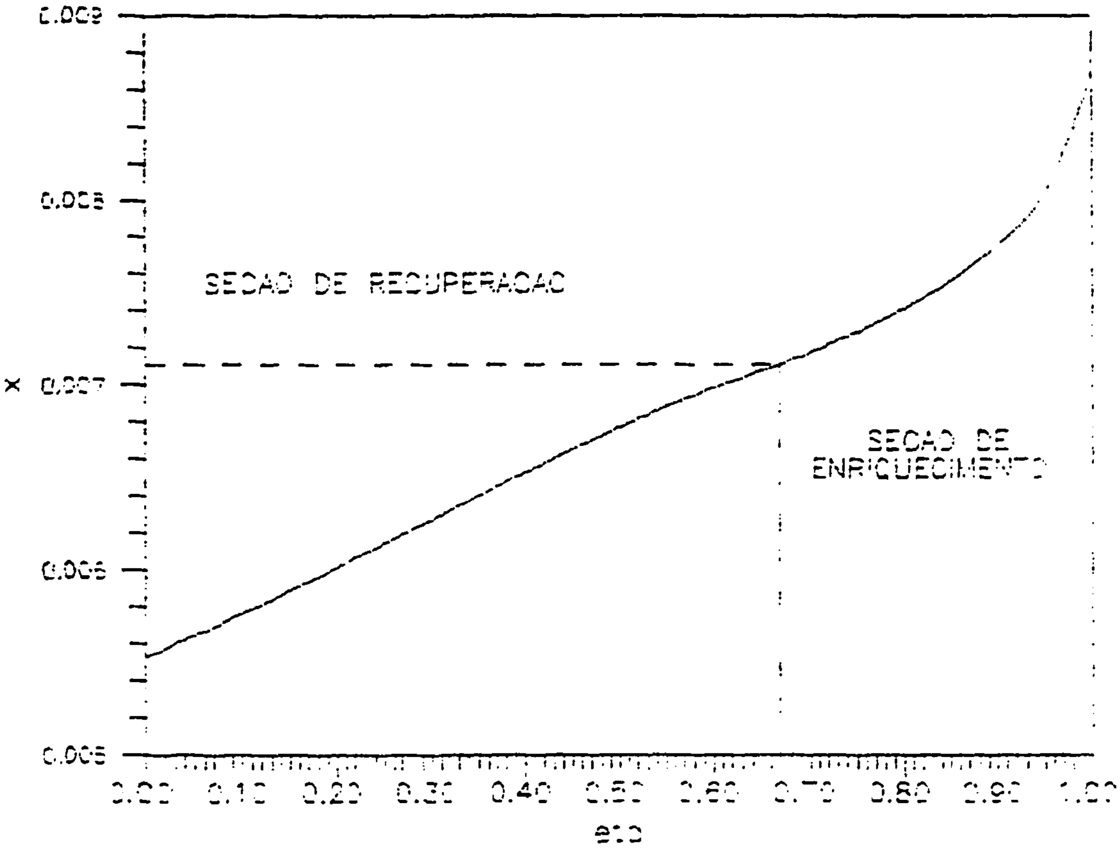


Figura 25: Gradiente axial de concentração do isótopo desejado x para a centrífuga de Roma

$F=3000$ kg/a $\theta=0.5$

condição de não mistura

$B_w=100000$ kg/a $B_s=250000$ kg/a

$b_w=1$ $c=0.66$ $b_s=0.5$ $\eta_s=0.5$

As Figuras 26, 27 e 28 mostram respectivamente a variação dos parâmetros C_1 e C_5, das eficiências locais de circulação e_c e do perfil de fluxo e_f, bem como da eficiência máxima local e_{max} e do parâmetro m ao longo do eixo do rotor. Essas curvas são válidas para qualquer posição de alimentação η_F adotada, o que inclui a condição de não mistura.

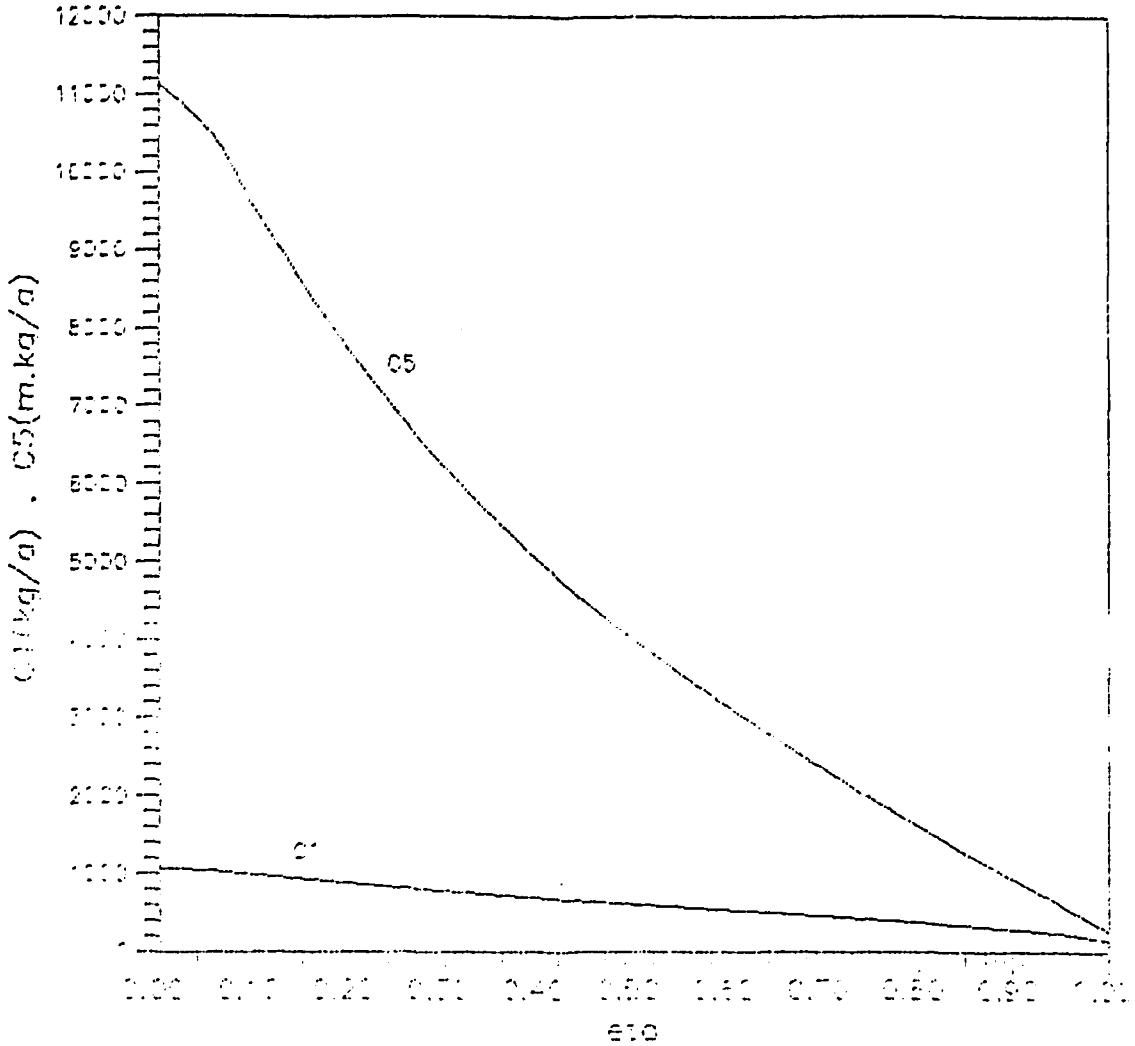


Figura 26: Variação axial dos parâmetros C_1 e C_5 para a centrífuga de Roma

$F=3000$ kg/a $\theta=0.5$

$B_w=100000$ kg/a $B_s=250000$ kg/a

$b_w=1$ $c=0.66$ $b_s=0.5$ $\eta_s=0.5$

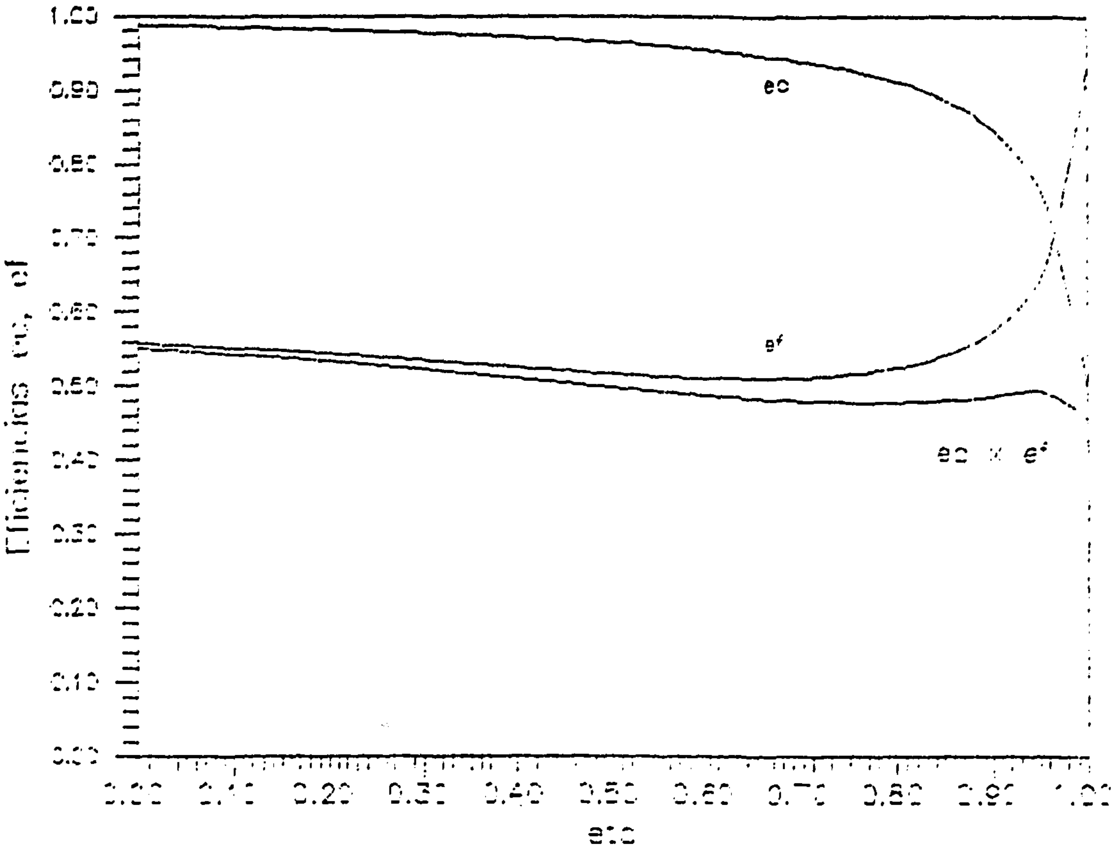


Figura 27: Variação axial das eficiências e_c e e_f para a centrífuga de Roma

$F=3000$ kg/a $\theta=0.5$

$B_w=100000$ kg/a $B_s=250000$ kg/a

$b_w=1$ $c=0.66$ $b_s=0.5$ $\eta_s=0.5$

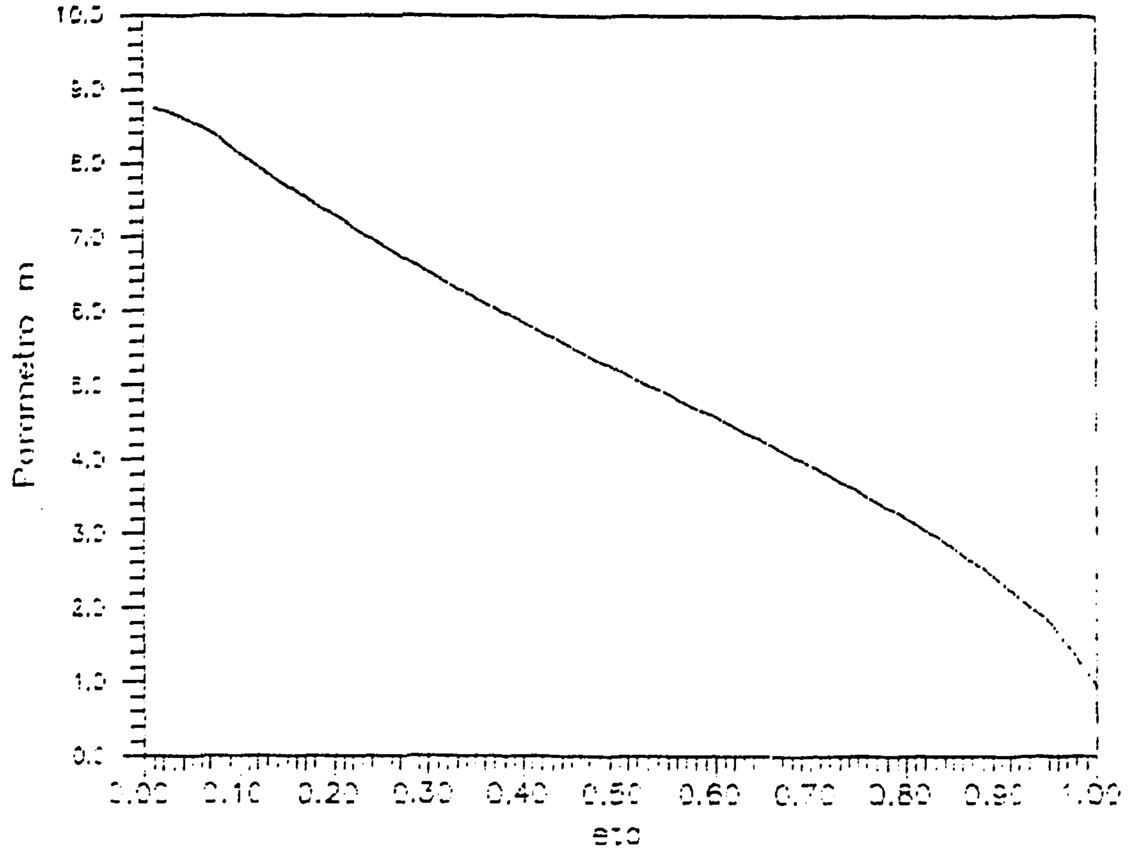


Figura 28: Variação axial do parâmetro de circulação *m* para a centrífuga de Roma

F=3000 kg/a θ=0.5

B_w=100000 kg/a B_s=250000 kg/a

b_w=1 c=0.66 b_s=0.5 η_s=0.5

A variação da eficiência de circulação interna e_c e do parâmetro *m* ao longo do rotor demonstram o decaimento da intensidade do fluxo da contracorrente da base para o topo da centrífuga.

4.2.5 - Otimização da Centrífuga de Roma

A otimização de uma centrífuga, do ponto de vista separativo, constitui em encontrar o conjunto de parâmetros que maximizem o seu poder de separação δU.

Definidos os parâmetros externos da centrífuga de Roma, a saber o comprimento Z=5 m, o raio do rotor a=0.25 m e a velocidade periférica v=600 m/s e a temperatura T=320 K, fixados os coeficientes da contracorrente referentes ao perfil e decaimento axial b_w, c, b_s e η_s, adotando a condição de não mistura para a posição axial da alimentação, restam as condições de fluxo F e θ e os coeficientes da intensidade da contracorrente B_w e B_s a serem otimizados.

Com base nos resultados apresentados na Tabela 1 podemos definir a otimização da contracorrente da centrífuga de Roma para a condição de operação estudada, a saber fluxo de alimentação F=3000 kg/a, corte θ=0.5, fixando a posição de alimentação no meio do rotor η_F=0.5. Nessas condições a contracorrente de geração térmica ao longo da parede do rotor deve ter intensidade de B_w=100000 kg/a e a de geração mecânica B_s= 250000 kg/a, fornecendo um poder de separação de 50.81 UTS/a, correspondente à eficiência de separação e=0.32.

Da mesma forma, para uma dada configuração da contracorrente da centrífuga de Roma, definida pelos parâmetros B_w e B_s, podemos realizar a otimização das suas condições de operação. Assim, segundo os resultados mostrados na Tabela 2, para B_w=100000 kg/a e B_s=250000 kg/a, o melhor desempenho separativo é obtido quando a centrífuga de Roma opera com fluxo de alimentação F=4000 kg/a e corte θ=0.3, resultando no poder de separação δU=57.76 UTS/a, correspondente à eficiência de separação e=0.37.

4.3 - COMPARAÇÃO COM RESULTADOS PUBLICADOS

A fim de verificar o procedimento de cálculo aqui apresentado, vamos comparar seus resultados com dados publicados, obtidos por diferentes métodos, numéricos ou analíticos, de diferentes centrífugas, descritas por seus autores.

Primeiramente OLANDER [29], utilizando o presente desenvolvimento teórico, para uma centrífuga com as seguintes características

$$a = 0.0915 \text{ m}$$

$$Z = 3.35 \text{ m}$$

$$T = 300 \text{ K}$$

$$v = 700 \text{ m/s}$$

$$\delta U^{t}_{max} = 210.60 \text{ UTS/a}$$

adotando a condição de não mistura, nas condições de operação

$$F = 3153.6 \text{ kg/a}$$

$$\theta = 0.4$$

com os coeficientes da contracorrente

$$B_w = 107\ 222.4 \text{ kg/a}$$

$$B_s = 220\ 752.0 \text{ kg/a}$$

que representam as intensidades da contracorrente térmica e mecânica otimizadas da referida centrífuga, obteve o poder de separação δU = 49.5 UTS/a. Mediante o uso do programa SIMSEP2 com os dados acima obtivemos δU = 54.3 UTS/a, representando uma diferença de $\Delta\delta U$=9.7%. Este desvio pode ser devido a aproximações numéricas ou ao emprego de diferentes valores para propriedades e constantes como por exemplo o produto da densidade pelo coeficiente de difusividade mútua do UF_6 o ρD, uma vez que as equações empregadas são praticamente as mesmas mas o autor não apresenta todos os dados utilizados.

SCHÖNFELDER [33], numa análise da influência de diferentes tamanhos de furo da placa rotativa, situada na extremidade do produto, apresenta diversos valores do desempenho separativo. Dentre os casos testados, Schönfelder obteve, para uma centrífuga com as seguintes características

$$a = 0.25 \text{ m}$$

$$Z = 10 \text{ m}$$

$$T = 320 \text{ K}$$

$$v = 600 \text{ m/s}$$

$$\eta_F = 0.5$$

$$\delta U^{t}_{max} = 316.83 \text{ UTS/a}$$

nas condições de operação

$$F = 3153.6 \text{ kg/a}$$

$$\theta = 0.5$$

o maior valor para o poder de separação δU=85.36 UTS/a, correspondente a e=26.7%. Através do presente trabalho, otimizando os parâmetros B_W e B_S obtivemos δU=101.69 UTS/a, correspondente a e=32.1% (B_W= 174000 kg/a e B_S= 277000 kg/a), representando um desvio de $\Delta\delta U$=19.1% no poder de separação e de Δe=16.8% na eficiência de separação. A diferença observada nos desvios acima é principalmente devida a diferentes valores do produto ρD utilizados no cálculo do poder de separação máximo teórico. No entanto, o resultado obtido por Schönfelder não é necessariamente relativo à otimização interna da referida centrífuga, uma vez que foram testados poucos casos sem a preocupação de otimizar o diâmetro do furo da placa rotativa.

SOUBBARAMAYER [34] também desenvolveu uma extensão do método das médias radiais, utilizado na resolução de Cohen-Onsager, para fluxos internos com variação axial. Uma centrífuga com as seguintes características

$a = 0.25$ m

$Z = 2.5$ m

$T = 320$ K

$v = 600$ m/s

$\eta_F = 0.54$

$\delta U_{max}^{t} = 79.21$ UTS/a

nas condições de operação

$F = 3153.6$ kg/a

$\theta = 0.5$

forneceu, em condições ótimas de geração da contracorrente:

$\delta U = 38$ UTS/a

$e = 43\%$

$\alpha = 1.46$

Nossos cálculos, feitos com B_W e B_S otimizados, admitido B_W=55000 kg/a e B_S=213000 kg/a, no entanto resultaram em δU=25.46 UTS/a e e=32.1%, o que representa um desvio de $\Delta\delta U$=33.0% no poder de separação e de Δe=25.6% na eficiência global. No entanto Soubbaramayer considera em sua análise do escoamento interno da contracorrente todos os mecanismos de geração da contracorrente.

Comparando agora os resultados obtidos por RÄTZ [31] na operação de uma centrifuga com as seguintes caracteristicas

$a = 0.25$ m

$Z = 1$ m

$T = 320$ K

$v = 400$ m/s

$\eta_F = 0.695$

$\delta U_{max}^{t} = 6.26$ UTS/a

e com os parâmetros de fluxo dados por

$$F = 788.4 \text{ kg/a}$$

$$\theta = 0.5$$

em condições ótimas de geração da contracorrente, expressas por

$$\delta U = 1.75 \text{ UTS/a}$$

$$e = 28\%$$

com o nosso procedimento de cálculo, que nessas condições fornece

$$\delta U = 1.70 \text{ UTS/a}$$

$$e = 27\%$$

Isso representa uma diferença de $\Delta\delta U$=2.9% no poder de separação e de Δe=3.6% na eficiência de separação.

5 - CONCLUSÃO

O principal objetivo do presente trabalho foi estabelecer um procedimento de cálculo, mediante o desenvolvimento de um programa numérico, para a obtenção dos parâmetros separativos de uma dada centrífuga com variação axial do fluxo interno da contracorrente. Este objetivo foi plenamente atingido e o programa foi utilizado em diversas situações com o objetivo de analisarmos o comportamento de uma centrífuga-modelo.

Na presente simulação devem ser conhecidos , ou estimados, os parâmetros que descrevem a contracorrente de geração térmica mediante o estabelecimento de um gradiente de temperatura ao longo da parede do rotor e a contracorrente devida ao acionamento mecânico de um coletor estacionário na extremidade da fração empobrecida extraída do rotor. Esses parâmetros são dados pelos respectivos coeficientes relativos à intensidade da contracorrente B_w e B_s, relativos ao perfil de fluxo radial b_w e b_s e ao seu decaimento axial c e η_s.

O comportamento separativo da centrífuga estudada, em termos do poder de separação δU, aumenta até um máximo quando o fluxo de alimentação é aumentado. Também existe um valor ótimo do corte θ que maximiza o poder de separação para um dado conjunto dos demais parâmetros. Quanto à intensidade da contracorrente, conforme postulado por diversos autores, existe uma configuração para a geração da contracorrente, representada no presente trabalho pelos coeficientes B_w e B_s, que acopla os dois mecanismos descritos acima e maximiza o desempenho separativo da centrífuga.

A posição axial da introdução do fluxo de alimentação no interior da centrífuga é mais uma variável a ser definida e otimizada no projeto de uma centrífuga. Observamos que para uma dada condição de operação e um dado par dos coeficientes da intensidade da contracorrente, existe um ponto ótimo de alimentação, que é diferente da posição de alimentação onde não ocorre mistura de correntes com composições diferentes, definida na condição de não mistura.

A otimização do comportamento separativo de uma dada centrífuga através da otimização dos parâmetros de entrada deste procedimento de cálculo se mostrou relativamente extensa e trabalhosa, porém viável.

O procedimento desenvolvido através do programa numérico SIMSEP2 mostrou boa concordância com resultados publicados, dentro de uma faixa da ordem de 20%.

Finalmente, o presente trabalho pode ser melhorado e extendido nos seguintes sentidos:

(a) o programa numérico pode tornar-se mais rápido mediante o emprego de rotinas de cálculo desenvolvidas por firmas especializadas;

(b) esse programa facilitaria o procedimento de otimização de uma centrífuga, talvez até possibilitando o desenvolvimento de um algorítmo numérico;

(c) um trabalho extremamente interessante seria proceder à otimização do modelo apresentado de modo a encontrar o conjunto de parâmetros da contracorrente que melhor represente os resultados experimentais de uma dada centrífuga.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

[01] BENEDICT, M.; PIGFORD, T.H.; LEVI, H.W. *Nuclear chemical engineering*. 2.ed. New York, McGraw-Hill, 1981.

[02] BERGER, M.H. *Computer extended series for a thermally driven gas centrifuge*. Oak Ridge Gaseous Diffusion Plant, TN , Jun. 1986. (K/OA-5787).

[03] BERGER, M.H. *Practical computation of multidimensional thermal flows in a gas centrifuge*. Oak Ridge Gaseous Diffusion Plant, TN, Dec. 1982. (K/OA-5325).

[04] BERMEL, W.; COESTER, E.; RÄTZ, E. Review paper on centrifuge technology and status of the URENCO CENTRIFUGE PROJECT. In: CENTRE D'ETUDES NUCLEAIRES DE SACLAY and CITE SCIENTIFIQUE PARCS ET TECHNOPOLES. *Separation phenomena in liquids and gases: proceedings of the 2nd workshop on ... held in Ile de France SUD, 10-14 July, 1989*. Versailles, 1989. p.195-265.

[05] COHEN, K. *The theory of isotope separation as applied to the large-scale production of* U^{235}. New York, McGraw-Hill, 1951.

[06] CONLISK, A.T. The effect of aspect ratio and feed flow rate on separative power in a gas centrifuge. *Chem. Eng. Sci. 41*(10): 2619-2650, 1986.

[07] CUNZHEN, Z. & CONLISK, A.T. Separation in a gas centrifuge at high feed flow rate. *J. Fluid Mech.*, *208:* 355-373, 1989.

[08] DORN, D.S. & McCRACKEN, D.D. *Cálculo numérico com estudos de casos em Fortran IV*. São Paulo, Ed. Campus Ltda., 1981.

[09] ECKERT, M. Isotope separation in the centrifugal field of a gas ultracentrifuge. In: KRAUSE, E. & HIRSCHEL, E.H. ***Processes of*** *Fluid Mechanics in gas centrifuges: DFVLR Colloquium on ... held in Porz-Wahn, 14 May 1970*, p.71-79. (Conf.700557-6) (K-Trans-61-1).

[10] FUJII, Y.; NOMURA, M.; ONITSUKA, H.; TAKEDA, K. Anomalous isotope fractionation in uranium enrichment process. *J. Nucl. Sci. and Technol.*, 26(11): 1023-1037, 1989.

[11] FURRY, E.M.; JONES, R.C.; ONSAGER, L. On the theory of isotope separation by thermal diffusion. *Phys. Rev*, 55: 1083-1095, 1939.

[12] GMELIN *Handbuch der Anorganischen Chemie*. UErg C8, Springer, Berlin-Heidelberg, p.115, 1980.

[13] HIRSCHEL, E.H. Radial flow through a one-dimensional gas centrifuge. In: *Processes of Fluid Mechanics in gas centrifuges: DFVLR Colloquium on ... held in Porz-Wahn, 14 May 1970*. p.121-145. (Conf.700557-7) (K-Trans-61-3).

[14] HOGLUNG, R.L. *Overview of uranium enrichment technologies: technical and economic perspective*. Oak Ridge Gaseous Diffusion Plant, TN, May. 1987. (K/OA-6076).

[15] JORDAN, I. *Separação dos isótopos de urânio pelo processo da centrifugação em fase gasosa*. São Paulo, Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, maio 1980. (Informação IPEN 3).

[16] JORDAN, I. & BUCHMANN, J.H. *Teoria da separação isotópica na centrifuga a contracorrente e cálculo dos parâmetros de separação*. São Paulo, Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, jul. 1983 (Publicação IPEN C-5).

[17] KRÄMER, H.G. & ERICHSEN, L. *Uranisotopentrennung in Zentrifugen.* Bonn, Deutsches Atomforum E.V., 1985.

[18] LAHARGUE, J.P. & SOUBBARAMAYER A numerical model for the investigation of the flow and isotope concentration field in a ultracentrifuge. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, *15*: 259-273, 1978.

[19] LANGBEIN, G. Status of the flow theory tasks in the project "Uranuim Enrichment With Gas Centrifuges". In: KRAUSE, E. & HIRSCHEL, E.H. eds., *Processes of fluid mechanics in gas centrifuges: DFVLR Colloquium on ... held in Porz-Wahn, 14 May 1970.* p.15-24, (Conf.700557-9).

[20] LOTZ, M. Solutions of the Navier-Stokes equations for flow in countercurrent gas centrifuges. In: KRAUSE, E. & HIRSCHEL, E.H. *Processes of fluid mechanics in gas centrifuges: DFVLR Colloquium on ... held in Porz-Whan, 14 May 1970.* p.81-91. (Conf.700557-10) (K-Trans-61-2).

[21] MAKIHARA, H. & ITO, T. Centrifugal separation of uranuim isotopes in presence of light gas. *J. Nucl. Sci. Technol.*, *26*(11): 1023-1037, 1989.

[22] MAKKIHARA, H. & ITO, T. Separation characteristcs of gas centrifuges: approximate analysis of separation performance. *J. Nucl. Sci. Technol.*, *25*(8): 649-660, 1988.

[23] MATSUDA, T.; TAMURA, N.; SAWADA, K. Three-dimensional numerical simulation of flows past scoops in a gas centrifuge. *J. Fluid Mech.*, *201*: 203-221, 1989.

[24] MAY, W.G. Separative parameters of gas centrifuges. *AICHE Symp. Ser.* 73(169), 1977.

[25] **NAKAYAMA, W & TORII, T. Numerical analysis of separative power of isotope centrifuges, (I). *J. Nucl. Sci. Technol.*, 11(11): 495-504, 1974.**

[26] OLANDER, D.R. The gas centrifuge. *Sci. Am.*, 239(3): 27-33, 1978.

[27] OLANDER, D,R, Separative performance transient in a gas centrifuge. *Nucl. Technol.*, 44: 307-314, 1979.

[28] OLANDER, D.R. Technical basis of the gas centrifuge. *Adv. Nucl. Sci. Technol.*, *6: 105-174*, 1972.

[29] OLANDER, D.R. The theory of uranium enrichment by the gas centrifuge. *Prog. Nucl. Energy*, 8:1-33, 1981.

[30] RÄTZ, E. *Analytische Lösungen für die Trennleistung von Gaszentrifugen zur Urananreicherung*. Berlin, 1983. (Verfahrenstechnik genehmigte Dissertation zur Erlangung des akademischen Grades Doktor Ingenieur, Technischen Universität Berlin).

[31] RÄTZ, E. Separation characteristics of centrifuges under extreme operating conditions. In: TECHNISCHE HOCHSCHULE DARMSTADT. *Separation penomena in liquids and gases: proceedings of the workshop on ... held in Darmstadt, 20-23 July, 1987*. Darmstadt, 1987. p.384-418.

[32] RÄTZ, E. Uranium isotope separation in the gas centrifuge. In: VON KARMAN INSTITUTE FOR FLUID DYNAMICS. *Aerodynamic separation of gases and isotopes: VKI lecture series entitled ... held in Rhode Saint Genese, Belgium, may 29 - june 2, 1978*. Belgium, 1978.

[33] SCHÖNFELDER, R. Influence of different product baffle holes on the flow pattern and concentration lines in a gas centrifuge. In: TECHNISCHE HOCHSCHULE DARMSTADT. *Separation penomena in liquids and gases: proceedings of the workshop on ... held in Darmstadt, 20-23 July, 1987*. Darmstadt, 1987. p.658-699.

[34] SOUBBARAMAYER Centrifugation. In: VILLANI,S., ed. *Uranium enrichment*. Springer Verlag, Berlin, 1979, p.183-243.

[35] SPINKS, N. & WILSON, D.J. *TWIST - A numerical technique for calculating the steady-state mass fraction variation in an axi-symmetric binary gas misture subjected to pressure gradients*. Lucas Heights, Australian Atomic Energy Commission Research Establishment, Apr. 1973. (AAEC/E-261).

[36] TECHNISCHE HOCHSCHULE DARMSTADT. *Separation phenomena in liquids and gases: proceedings of the workshop on ... held in Darmstadt, 20-23 July, 1987*. Darmstadt, 1987.

[37] VON HALLE, E. *Procedure for the calculation of the separative performance of a countercurrent gas centrifuge*. Oak Ridge, TN, U.S. Department of Energy, Jul. 1981. (K/OA-5013).

[38] WHITLEY, S. The uranium ultracentrifuge. *Phys. Technol.*, 10: 26-33, 1979.

[39] WOOD,H.G. & MORTON,J.B. Onsager's pancake approximation for the fluid dynamics of a gas centrifuge. *J. Fluid Mech.*, 101: 1, 1980.

[40] ZIPPE,G. Status of Centrifuge Technology. In: TECHNISCHE HOCHSCHULE DARMSTADT. *Separation penomena in liquids and gases: proceedings of the workshop on ... held in Darmstadt, 20-23 July, 1987*. Darmstadt, 1987. p.153-176.

ANEXO I

Listagem do programa SIMSEP2

```
Program SimSepCentr;

label 100;

Const R=8.314;              {constante dos gases - J/kg.mol}
      MM=0.352;           • {massa molecular do UF6 - kg/mol}
      DeltaMM=0.003;        {diferenca de MM dos isotopos de U - kg/mol}
      xF=0.00711;           {composicao da alimentacao - U natural}

Type VetorR=array[1..500] of real;

Var L,Teta,Z,a,T,fr,P,W,v,A2,RoD,C2,dUmt:real;
    Bw,bmw,c,Bs,bms,etas:real;
    csi,etaF,ZE,passo,hp,Sec,Rp,Rw,Rf:real;
    OpAlim,Resp:char;
    xP,xPi,xW,C1,C5,s,ef,ec,el,dU,e,alfa,beta,gama:real;
    n,I,Nintz,cont,acert:integer;
    xextr,xpa,dx,xp1,xp2:real;
    eta,x,Intg:vetorR;
    out,Arq:text;

Function F(csi,eta:real):real;
Var Fw,Fs,Ff:real;
Begin
  if (eta=1) or (eta=0) then Fw:=0
                        else Fw:=Bw*(exp(-bmw*csi)-(1+bmw*csi)*exp(-2*bmw*csi))*exp(c*ln(4*eta*(1-eta)));
  Fs:=Bs*(exp(-bms*csi)-(1+bms*csi)*exp(-2*bms*csi))*exp(-eta/etas);
  Ff:=Sec*(2*exp(-csi)-exp(-2*csi));
  F:=Fw+Fs+Ff;
End;

Function Integral(Intg:vetorR;n:integer;hp:real):real;
{ Calcula a integral de uma funcao colocada no vetor Intg, pela Regra de}
{Simpson, com n intervalos e passo hp}
Var k:integer;
    som:real;
Begin
  som:=Intg[1]+4*Intg[2];
  k:=2;
  repeat
  begin
    k:=k+1;
    som:=som+2*Intg[k];
    k:=k+1;
    som:=som+4*Intg[k];
  end;
  until k=n;
  som:=som+Intg[n+1];
  Integral:=som*hp/3;
End;

Function Csi(eta:real):real;
Var k:integer;
Begin
  Intg[1]:=0;
  csi:=hp;
  for k:=2 to n+1 do
  begin
```

```
    Intg[k]:=F(csi,eta)-Sec*exp(-csi);
    csi:=csi+hp;
    if abs(csi-A2)<1E-14 then csi:=A2;
  end;
  Cs1:=Delta*V/(A2*Integral(Intg,n,hp));
End;

Function Cs5(eta:real):real;
{Deve sempre ser usada depois da funcao Cs1}
Var k:integer;
Begin
  Intg[1]:=0;
  csi:=hp;
  for k:=2 to n do
  begin
    Intg[k]:=Intg[k]*(F(csi,eta)-Sec*(1-csi/A2))/(1-csi/A2);
    csi:=csi+hp;
  end;
  Intg[n+1]:=0;
  Cs5:=C2+Integral(Intg,n,hp)/(4*Pi*Rch*A2);
End;


Function EqDif(eta,x:real):real;
Begin
  if abs(eta-etaF)<1E-14 then eta:=etaF;
  if abs(eta-1)<1E-14 then eta:=1;
  case OpAlin of
    '1': if eta>=etaF then begin
                             Sec:=P;
                             xextr:=xpi;
                           end
                      else begin
                             Sec:=-V;
                             xextr:=xv;
                           end;
    '2': if x>=xF then begin
                         Sec:=P;
                         xextr:=xpi;
                       end
                  else begin
                         Sec:=-V;
                         xextr:=xv;
                       end;
  end;
  C1:=Cs1(eta);
  C5:=Cs5(eta);
  EqDif:=2/C5*(C1*x*(1-x)-Sec*(xextr-x));
End;

Procedure RungeKutta(x1,x2,y1:real;
                    var Nintc:integer;       {numero de intervalos}
                    var xv,yv:vetorN);
label 100;
var k1,k2,k3,k4:real;
Begin
  passo:=(x2-x1)/Nintc;
  i:=1;
  xv[1]:=x1;
```

```
  yv[1]:=y1;
  repeat
    100:k1:=EqDif(xv[I],yv[I]);
    k2:=EqDif(xv[I]+passo/2,yv[I]+passo*k1/2);
    k3:=EqDif(xv[I]+passo/2,yv[I]+passo*k2/2);
    k4:=EqDif(xv[I]+passo,yv[I]+passo*k3);
    if abs((k2-k3)/(k1-k2))>100 then begin
                                     passo:=passo/2;
                                     Nintz:=2*Nintz;
                                     goto 100;
                                   end;
    yv[I+1]:=yv[I]+passo/6*(k1+2*k2+2*k3+k4);
    xv[I+1]:=xv[I]+passo;
    I:=I+1;
  until abs(xv[I]-x2)<=1E-14;
End;

Function Valor(x:real):real;
Begin
  Valor:=(2*x-1)*ln(x/(1-x));
End;

Begin    {programa}
  ClrScr;
  writeln('           SOLUCAO DA EQ. DE DIFUSAO-CONVECCAO DE CENTRIFUGAS PELO');
  writeln('         METODO DE ONSAGER-COHEN COM VARIACAO AXIAL DA CONTRACORRENTE');
  writeln;
  write('Fluxo de alimentacao [kg/s]: ');readln(L);
  write('Corte: ');readln(Teta);
  write('Comprimento util do rotor [m]: ');readln(Z);
  write('Diametro do rotor [m]: ');readln(a);a:=a/2;
  write('Temperatura media do gas no rotor [K]: ');readln(T);
  write('Frequencia de rotacao [Hz]: ');readln(fr);
  P:=Teta*L;            {fluxo do produto - kg/s}
  W:=(1-Teta)*L;        {fluxo do rejeito - kg/s}
  v:=2*Pi*fr*a;         {velocidade periferica - m/s}
  A2:=MM*v*v/(2*R*T);   {parametro de celeridade}
  RoD:=3.254515*exp(0.987*ln(T)); {prod. coef. difusao mutua * densid. - kg/m.s}
  C2:=Pi*a*a*RoD;
  dUmt:=RoD*Pi*2/2*sqr(DeltaM*v*v/(2*R*T))*238/352; {poder de sep. max. teorico - UTS/s}
  write('Parametros da contracorrente termica:  -Bw [kg/s]: ');readln(Bw);
  write('                                       -bw: ');readln(bmw);
  write('                                       -c: ');readln(c);
  write('Parametros da contracorrente mecanica: -Bs [kg/s]: ');readln(Bs);
  write('                                       -bs: ');readln(bms);
  write('                                       -etas: ');readln(etas);
  writeln('Escolha: 1=posicao da alimentacao dada - ZE ou etaF');
  writeln('         2=condicao de nao mistura');
  readln(OpAlim);
  if OpAlim='1' then begin
                       write('Posicao da alimentacao (etaF=1-ZE/Z, ZE=comp.secao de enriq.):');
                       readln(etaF);
                     end
                else etaF:=Teta;
  ZE:=Z*(1-etaF);
  writeln;
  write('Deseja a saida do programa na tela (T) ou na impressora (P)? ');readln(Resp);
  Resp:=UpCase(Resp);
  if Resp='P' then Assign(out,'LST:')
```

```
            else Assign(out,'CON:');
Reset(out);
if Resp='T' then ClrScr;
writeln(out,'               SOLUCAO DA EQ. DE DIFUSAO-CONVECCAO DE CENTRIFUGAS PELO');
writeln(out,'             METODO DE ONSAGER-COHEN COM VARIACAO AXIAL DA CONTRACORRENTE');
writeln(out);
writeln(out);
writeln(out,'CARACTERISTICAS DA CENTRIFUGA E CONDICOES DE OPERACAO FIXAS');
writeln(out);
writeln(out,'   Comprimento util do rotor........................',Z:4:3,' m');
writeln(out,'   Raio do rotor....................................',a:4:3,' m');
writeln(out,'   Temperatura do gas no rotor (admitida)...........',T:3:0,' K');
writeln(out,'   Frequencia de rotacao............................',fr:4:1,' Hz');
writeln(out,'   Velocidade periferica............................',v:5:2,' m/s');
writeln(out,'   Parametro de celeridade..........................',A2:5:3);
writeln(out,'   Produto coef.difusao mutua x densidade...........',RoD:5:2,' kg/m.s');
writeln(out,'   Poder de separacao maximo teorico................',dUmt:5:4,' UTS/s');
write(out,'   Posicao da alimentacao:');
if OpAlim='1' then writeln(out,' comp. secao de enriq....',ZE:4:3,' m');
if OpAlim='2' then writeln(out,' adotada condicao de nao mistura.');
writeln(out);
writeln(out,'CONDICOES DE OPERACAO VARIAVEIS');
writeln(out);
writeln(out,'   Fluxo de alimentacao.............................',L:4:1,' kg/s');
writeln(out,'   Composicao da alimentacao........................',xF:7:6);
writeln(out,'   Corte............................................',Teta:5:4);
writeln(out,'   Fluxo do produto.................................',P:4:1,' kg/s');
writeln(out,'   Fluxo do rejeito.................................',W:4:1,' kg/s');
writeln(out,'   Parametros da contracorrente termica........|Bw=',Bw:4,' kg/s');
writeln(out,'                                               |bw=',bmw:3:2);
writeln(out,'                                               |.c=',c:5:4);
writeln(out,'   Parametros da contracorrente mecanica.....|..Bs=',Bs:4,' kg/s');
writeln(out,'                                             |..bs=',bms:3:2);
writeln(out,'                                             |etas=',etas:5:4);
writeln(out);

{Estimativa inicial - teoria classica de Cohen-Onsager}

n:=100;            {numero de intervalos radiais}
hp:=A2/n;         {passo para integracao radial - Regra de Simpson}
Sec:=0;
C1:=Cs1(0.5);
C5:=Cs5(0.5);
{calculo de xp,m e ef}
xp:=(C1+P)/(P-C1*exp(-(C1+P)*ZE/C5))*xF;
m:=sqrt(C5/(Pi*a*a*RoD)-1);
ec:=m*m/(1+m*m);
ef:=sqr(C1/A2*MM/DeltaM)/(2*Pi*RoD*(C5-Pi*RoD*a*a));
beta:=xp*(1-xF)/(xF*(1-xp));
xw:=(xF-Teta*xp)/(1-Teta);                  {balanco de massa}
dU:=L*(Teta*Valor(xp)+(1-Teta)*Valor(xw)-Valor(xF))*238/352;
e:=dU/dUmt;
eI:=e/(ef*ec);
gama:=xF*(1-xw)/(xw*(1-xF));
alfa:=beta*gama;
writeln(out,'SOLUCAO CLASSICA DE COHEN-ONSAGER');
writeln(out,'(se condicao de nao mistura escolhida, entao aqui adotado EtaF=Teta)');
writeln(out);
writeln(out,'   Parametro da centrifuga C1......................',C1:6:4,' kg/s');
```

```
  writeln(out,'  Parametro da centrifuga C5......................',C5:6:4,' m.kg/s');
  writeln(out,'  Parametro m.....................................',m:5:4);
  writeln(out,'  Eficiencia de circulacao interna................',ec:5:4);
  writeln(out,'  Eficiencia de perfil de fluxo...................',ef:5:4);
  writeln(out,'  Eficiencia de idealidade........................',ei:5:4);
  writeln(out,'  Composicao do produto...........................',xp:7:6);
  writeln(out,'  Composicao do rejeito...........................',xw:7:6);
  writeln(out,'  Poder de separacao..............................',dU:5:4,' UTS/s');
  writeln(out,'  Eficiencia de separacao.........................',e:5:4);
  writeln(out,'  Fator de separacao..............................',alfa:5:4);
  writeln(out,'  Fator de enriquecimento.........................',beta:5:4);
  writeln(out,'  Fator de empobrecimento.........................',gama:5:4);
  writeln(out,chr(12));

{fim da estimativa inicial}
  writeln(out,'SOLUCAO CONSIDERANDO VARIACAO AXIAL');
  writeln(out);
  cont:=0;
  writeln;
  writeln('cont  xW inicial   xP inicial   xP calculado     dx     novo xP   Nintz  amort');
  Nintz:=20;
  if v>500 then amort:=2
          else amort:=1;
  xp1:=xp;
  repeat
  begin   {ciclo da solucao de F(x)=0}
    cont:=cont+1;
    xpi:=xp;
    if cont<5 then begin xw:=(xF-Teta*(xpi+1E-8))/(1-Teta);
                         RungeKutta(0,1,xw,Nintz,eta,x);
                         xpa:=x[Nintz+1];
                   end;
    xw:=(xF-Teta*xpi)/(1-Teta);
    if xw<0 then goto 100;
    RungeKutta(0,1,xw,Nintz,eta,x);
    if cont<5 then dx:=(xpa-x[Nintz+1])/(1E-8)-1;
    xp:=xpi-(x[Nintz+1]-xpi)/(amort*dx);    {Metodo de Newton-Raphson com fator de amortecimento variavel}
    xp2:=xp1;
    xp1:=xpi-(x[Nintz+1]-xpi)/(amort*2*dx);
    write(' ',cont:2,'  ',xw:9:8,'  ',xpi:9:8,'    ',x[Nintz+1]:9:8,'  ',dx:8,' ',xp:9:8,'  ',Nintz:2,'    ');
    writeln(amort:4);
    if (x[Nintz+1]/xpi)>10 then begin
                          100:amort:=amort*2;
                          xp:=xp2;
                          end;
  end;
  until abs(xpi-x[Nintz+1])<=1E-8;        {ciclo da solucao de F(x)=0}
  xp:=x[Nintz+1];
  xw:=(xF-Teta*xp)/(1-Teta);
  dU:=L*(Teta*Valor(xp)+(1-Teta)*Valor(xw)-Valor(xF))*238/352;
  e:=dU/dUmt;
  Rp:=xp/(1-xp)*238/235;
  Rw:=xw/(1-xw)*238/235;
  Rf:=xF/(1-xF)*238/235;
  alfa:=Rp/Rw;
  beta:=Rp/Rf;
  gama:=Rf/Rw;
  writeln(out);
  writeln(out,'    PERFIL AXIAL DE CONCENTRACAO E DOS PARAMETROS CARACTERISTICOS');
```

```
  writeln(out);
  writeln(out,' eta    z(m)     x         C1        C5       m        ec        ef');
{ Assign(Arq,'C:\PLOT1\CONCAX.DAT');
  Rewrite(Arq);  }
  for cont:=1 to l do
  begin
    if abs(eta[cont]-1)<1E-14 then eta[cont]:=1;
    C1:=Cs1(eta[cont]);
    C5:=Cs5(eta[cont]);
    m:=sqrt(C5/(Pi*a*a*RoD)-1);
    ec:=m*m/(1+m*m);
    ef:=sqr(C1/A2*MM/DeltaM)/(2*Pi*RoD*(C5-Pi*RoD*a*a));
    write(out,eta[cont]:4:3,'   ',eta[cont]*Z:4:3,'   ',x[cont]:7:6,'  ',C1:8:2,'  ',C5:8:2,'   ',m:5:3,'   ',ec:5:4);
    writeln(out,'   ',ef:5:4);
{    writeln(Arq,eta[cont],x[cont]);   }
  end;
{  Close(Arq);   }
  writeln(out);
  writeln(out,'    PARAMETROS DE SEPARACAO');
  writeln(out);
  writeln(out,'        Composicao massica da alimentacao.........',xF*100:7:6,' %');
  writeln(out,'        Composicao massica do produto............',xp*100:7:6,' %');
  writeln(out,'        Composicao massica do rejeito............',xw*100:7:6,' %');
  writeln(out,'        Razao de abundancia molar da alimentacao..',Rf*100:7:6,' %');
  writeln(out,'        Razao de abundancia molar do produto......',Rp*100:7:6,' %');
  writeln(out,'        Razao de abundancia molar do rejeito......',Rw*100:7:6,' %');
  writeln(out,'        Poder de separacao........................',dU:5:4, ' UTS/a');
  writeln(out,'        Eficiencia de separacao...................',e:5:4);
  writeln(out,'        Fator de separacao........................',alfa:5:4);
  writeln(out,'        Fator de enriquecimento...................',beta:5:4);
  writeln(out,'        Fator de empobrecimento...................',gama:5:4);
  Close(out);
End.
```