



Simulations Monte-Carlo dans une centrifugeuse à gaz

PHILIPPE ROBLIN
FRÉDÉRIC DONEDDU
(DCC/DPE/SPCP - CEA SACLAY)

PHILIPPE ROBLIN



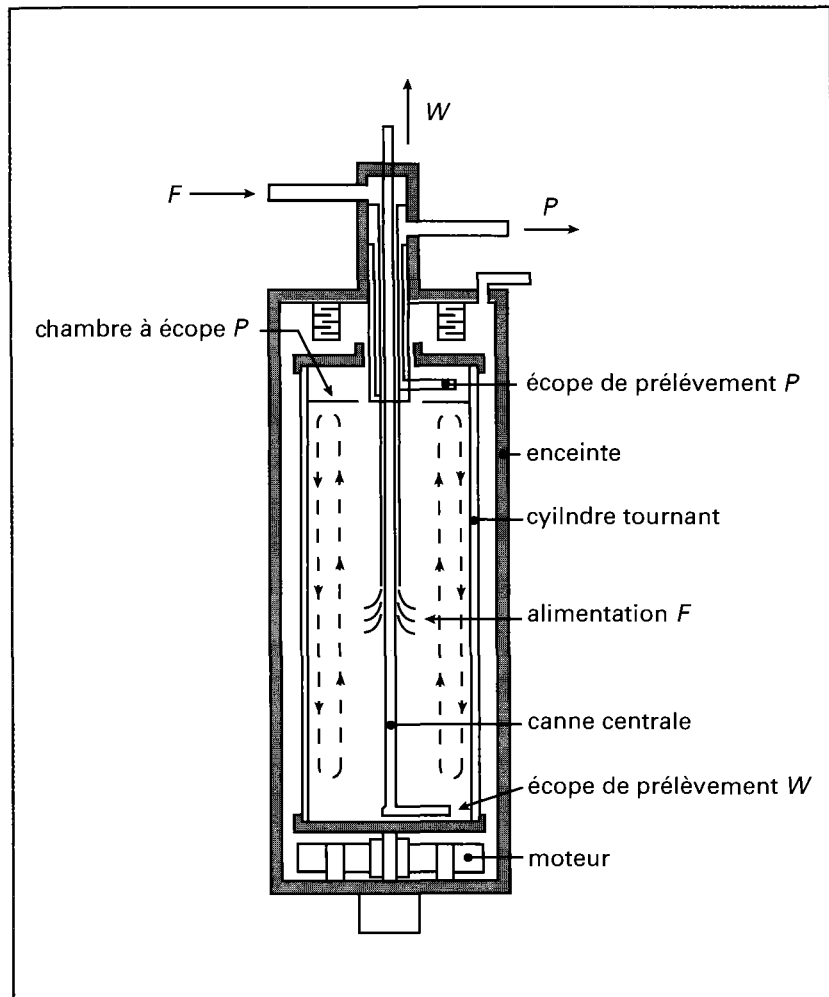
FRÉDÉRIC DONEDDU



INTRODUCTION

La séparation isotopique par centrifugation gazeuse utilise le principe d'un cylindre tournant à forte vitesse dans une enceinte à vide. Selon le schéma le plus courant, le gaz contenant le mélange d'isotopes est introduit par une canne d'alimentation axiale fixe, et se détend dans le cylindre. Soumis à une forte accélération centrifuge, il se met en rotation rigide – il n'y a donc pas de glissement à la paroi – et se stratifie radialement selon une loi de pression de type barométrique. Par diffusion de pression, les isotopes les plus lourds migrent vers la paroi du cylindre, et les plus légers vers le centre (cf. Fig 1). La pression étant fortement stratifiée, les équations Navier-Stokes des fluides continus ne sont pas valables dans l'ensemble du cylindre. Schématiquement, on distingue deux domaines. Le premier domaine, dense et proche de la paroi, est régi par les équations de Navier-Stokes. Pour le deuxième domaine, raréfié et vers le centre, ces équations ne sont plus applicables. On fait alors appel à l'équation de Boltzmann. L'essentiel du processus de séparation des isotopes se fait néanmoins dans la région dense. Le code TRYPHON, qui a été présenté précédemment [1], résout le problème de séparation isotopique dans cette zone. Dans les simulations numériques, une frontière interne sépare donc le domaine de fluide continu du domaine de gaz raréfié dans lequel se détend le gaz d'alimentation. La position radiale de cette coupure est d'ailleurs d'autant plus proche de la paroi du cylindre tournant que le gaz est lourd et que la vitesse de rotation est élevée. Dans le domaine raréfié, l'équation de Boltzmann est résolue par une méthode de type Monte-Carlo. La modélisation complète de la détente du gaz d'alimentation et de son interaction avec le gaz tournant, permet alors de fournir des conditions limites réalistes aux codes comme TRYPHON, traitant le domaine fluide. C'est l'objet de la première étude. Le cylindre de la centrifugeuse tourne dans une enceinte à vide limitée par un cylindre externe. D'un point de vue technologique, il est fondamental de connaître la puissance mécanique nécessaire pour compenser le frottement avec le gaz résiduel contenu dans l'enceinte, ainsi que les puissances thermiques dissipées sur les deux cylindres fixe et mobile, en fonction de la pression résiduelle. L'outil utilisé pour cette seconde étude est également la simulation Monte-Carlo dite directe.

Figure 1
Schéma d'une centrifugeuse.
L'alimentation du gaz (F) est assurée par la canne centrale.
L'écope de prélèvement W permet de récupérer la fraction de gaz appauvrie en éléments légers, notée W , alors qu'une seconde écope garantit l'extraction de la fraction enrichie, notée P



LA SIMULATION MONTE-CARLO DIRECTE

Des solutions analytiques de l'équation de Boltzmann n'existent que dans des cas rares, et généralement cette équation est résolue numériquement. La méthode de Monte-Carlo utilise le principe de tirages de nombres aléatoires essentiellement en raison de la nature probabiliste des collisions moléculaires. Dans la simulation directe, dite DSMC [3] (Direct Simulation Monte-Carlo), des millions de particules sont suivies simultanément et progressent par pas de temps. Ce temps interne est identique au temps physique d'un gaz réel. Les problèmes traités peuvent donc être non stationnaires ou stationnaires. L'hypothèse du chaos moléculaire est faite, autrement dit la méthode est limitée à des gaz dont la distance moyenne entre molécules est plus grande que le diamètre moléculaire. Ces gaz sont dits dilués. Dans la simulation DSMC, le calcul est effectué dans un domaine géométriquement découpé en cellules dans lesquelles les molécules se déplacent, en collisionnant avec elles-mêmes et avec les frontières du domaine. Les grandeurs macroscopiques, comme la densité ou la vitesse du gaz, sont estimées dans ces cellules par moyenne des grandeurs moléculaires microscopiques. La méthode Monte-Carlo donne une solution numérique de l'équation de Boltzmann. Son champ d'action s'étend du régime continu, ou fluide, au régime non collisionnel. Mais d'un point de vue pratique, et pour des raisons de temps de calcul, le domaine de prédilection de DSMC est celui intermédiaire des gaz dits raréfiés. Dans des situations qui mêlent des régimes collisionnels extrêmes dans un même domaine physique, d'autres méthodes de Monte-Carlo sont plus adaptées. C'est le cas de la méthode dite de la Particule-Test, PTMC [4].

Carlo dans une centrifugeuse à gaz

PREMIÈRE ÉTUDE : SIMULATIONS À L'INTÉRIEUR DU CYLINDRE TOURNANT

La centrifugeuse de référence est une machine hypothétique permettant à la communauté scientifique de comparer les résultats obtenus sur l'optimisation des performances séparatrices [5]. Son rayon a est de 6 cm, sa vitesse périphérique Ωa est de 600 m/s, soit typiquement une vitesse angulaire Ω de 10^4 rad/s. Le gaz contenant les isotopes est l' UF_6 . La pression $p(a)$ du gaz à la paroi du cylindre est fixée à 100 Torr et la température du gaz T_0 est de 310 K en sortie de canne d'alimentation. Le domaine étudié avec DSMC présente une symétrie de révolution autour de l'axe de la canne d'alimentation. Il s'étend radialement jusqu'à $r_{max} = 5$ cm, soit au-delà de la limite fluide r_f estimée à environ $r_f = 4.5$ cm. Puisque le calcul Monte-Carlo est valable dans la zone fluide, il est en effet préférable que la zone de calcul recouvre cette zone dense. Le domaine est limité axialement à $x_{max} = 5$ cm. Au centre, le rayon de la canne d'alimentation vaut $r^o = 0.5$ cm. L'extension axiale h de l'orifice de sortie est de 1 cm et $x = 0$ correspond à un plan de symétrie (cf. Fig. 2).

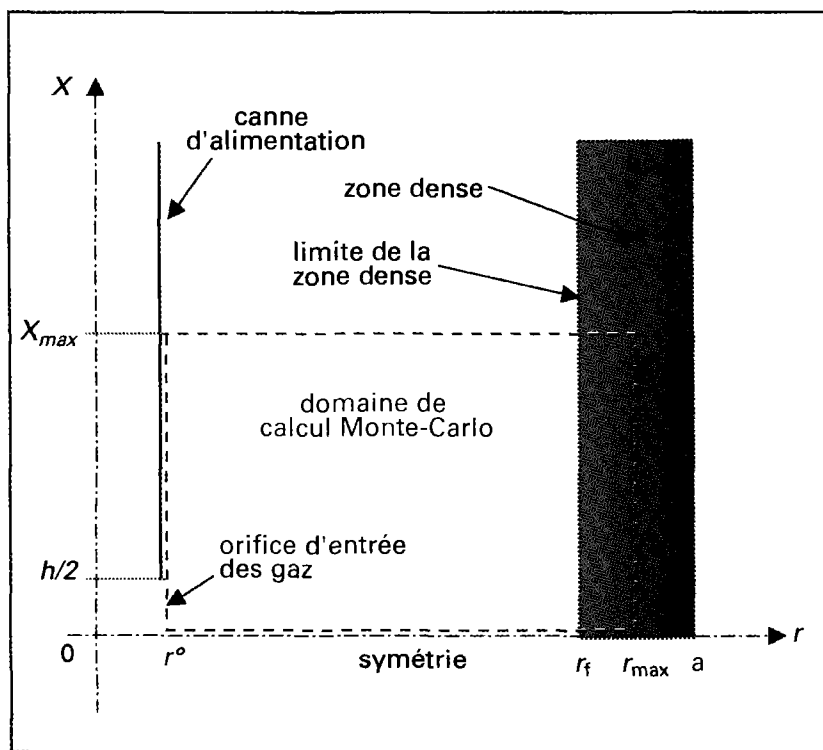


Figure 2
Schéma du domaine de calcul Monte-Carlo (en pointillés rouges). La centrifugeuse est de rayon a . Le plan coupant la centrifugeuse à mi-hauteur est un plan de symétrie. Le gaz d'alimentation est émis sur l'orifice de la canne. Une émission de molécules sur la frontière tournante en $r = r_{max}$ permet de simuler la rotation du gaz dans le domaine de calcul. La limite de zone dense est en $r = r_f$

Le débit d'alimentation simulé sur le demi-trou est de 10 mg/s. La vitesse de sortie est supposée sonique. Le gaz en rotation est simulé par une émission à partir de la frontière interne tournante, en $r = r_{max}$. En raison de la rotation rigide dans la région fluide, le gaz émis sur une demi-maxwellienne est animé de la vitesse Ωr_{max} . Le domaine, initialement vide, est découpé en mailles régulières de 100×100 . Le pas de temps est de $5 \cdot 10^{-7}$ s.

En l'absence d'alimentation, la simulation DSMC montre que le gaz émis de la frontière interne tournante conserve son profil de type barométrique jusqu'à la canne d'alimentation. Le profil de pression d'un gaz de masse molaire M est donc du type $p(r) = p(a) \exp(-x)$ où :

$$x = \frac{1}{2} \alpha [1 - (r/a)^2] \quad \alpha = (\Omega a)^2 / (RT_0 / M) \quad (1)$$

En réalité, le gaz UF_6 peut contenir des traces de HF. Au contraire de l' UF_6 , ce gaz de faible masse présente une faible stratification (cf. éq. 1).

Figure 3
Vitesse de rotation V_t (m/s)
et lignes de courant du gaz
d'alimentation dans le gaz
tournant. La frontière interne
tournante est en $r_{max} = 5$ cm.
Le gaz est émis en $r = r^0$ sur
un anneau de hauteur $h/2$

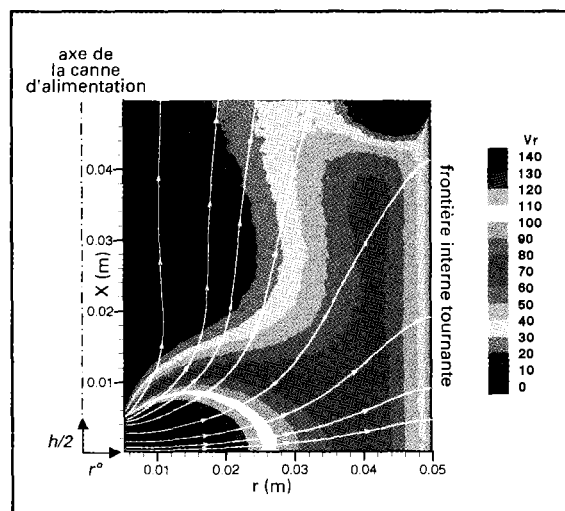
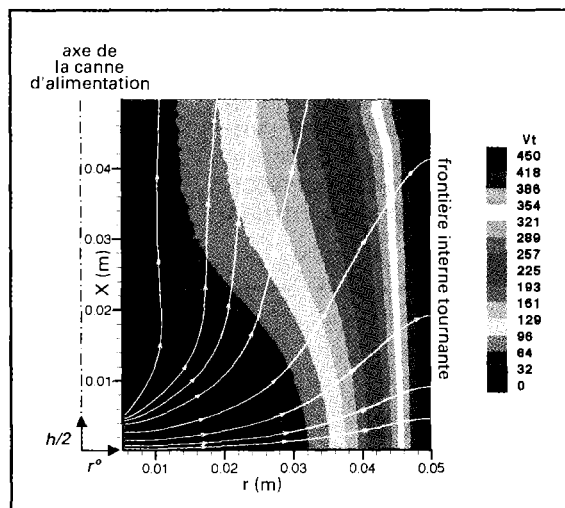


Figure 4
Vitesse radiale V_r (m/s)
et lignes de courant du gaz
d'alimentation dans le gaz
tournant. La frontière interne
tournante est en $r_{max} = 5$ cm.
Le gaz est émis en $r = r^0$ sur
un anneau de hauteur $h/2$

Ainsi, lorsque le mélange est mis en rotation, la région centrale est quasi vidée de gaz lourd et peuplée essentiellement de gaz léger.

Le rapport des pressions partielles est de l'ordre de 10^6 au centre pour la machine étudiée. Au cours de la détente, le gaz d'alimentation se met en rotation (cf. Fig. 3) du fait des collisions avec le mélange de gaz tournant, à une vitesse proche de la vitesse locale du gaz tournant – à savoir 500 m/s à 5 cm de l'axe – et sa vitesse radiale baisse fortement (cf. Fig. 4). A la frontière du domaine fluide, la simulation DSMC

fournit donc les informations comme le profil de débit de matière déposée, les vitesses radiales et vitesses de rotation du gaz d'alimentation.

Ces informations doivent alors être intégrées comme conditions limites du calcul de l'écoulement interne, nécessaires à l'évaluation des performances séparatrices de la centrifugeuse.

SECONDE ÉTUDE : SIMULATIONS DANS L'ENCEINTE

Dans une centrifugeuse à gaz, le cylindre intérieur est mobile alors que le cylindre extérieur, celui de l'enceinte à vide, est fixe. L'enceinte, à savoir l'espace entre ces deux cylindres, communique avec le centre de la machine et contient donc essentiellement du HF. Il en est de même pour l'espace séparant le couvercle tournant de la centrifugeuse avec celui, fixe, de l'enceinte (cf. Fig. 1). L'échauffement induit par la rotation peut être à l'origine de problèmes de tenue du matériau en température, mais aussi de perturbations du profil thermique le long du cylindre tournant, source du contre-courant nécessaire à l'obtention des performances séparatrices. Il est donc utile de connaître l'échauffement produit par la rotation du cylindre en fonction de la pression de gaz léger. Le degré de vide dans l'enceinte est assuré dyna-

miquement par la rotation elle-même, par l'intermédiaire d'une pompe moléculaire. Le problème de physique traité est analogue à celui de Couette [6]. Un écoulement de Couette résulte de la présence d'un fluide contenu entre deux plaques dont l'une est fixe et l'autre animée d'une vitesse d'entraînement. Il peut également s'agir – comme dans le cas présent – de cylindres coaxiaux dont l'un ou l'autre, ou les deux, peuvent être animés d'une vitesse de rotation. Dans la littérature, les problèmes de Couette ont été mis en équations pour des fluides incompressibles ou compressibles en régime continu. Pour le problème présenté, ces équations ne sont pas applicables et les simulations Monte-Carlo sont le seul recours. Dans les cas limites de très faibles pressions d'enceinte, le régime peut être considéré comme non collisionnel ou moléculaire. Il est alors possible de donner des solutions analytiques ou semi-analytiques comparables aux simulations DSMC hors collision. Dans la limite des fluides continus décrits par les équations de Navier-Stokes, des formules sont

Carlo dans une centrifugeuse à gaz

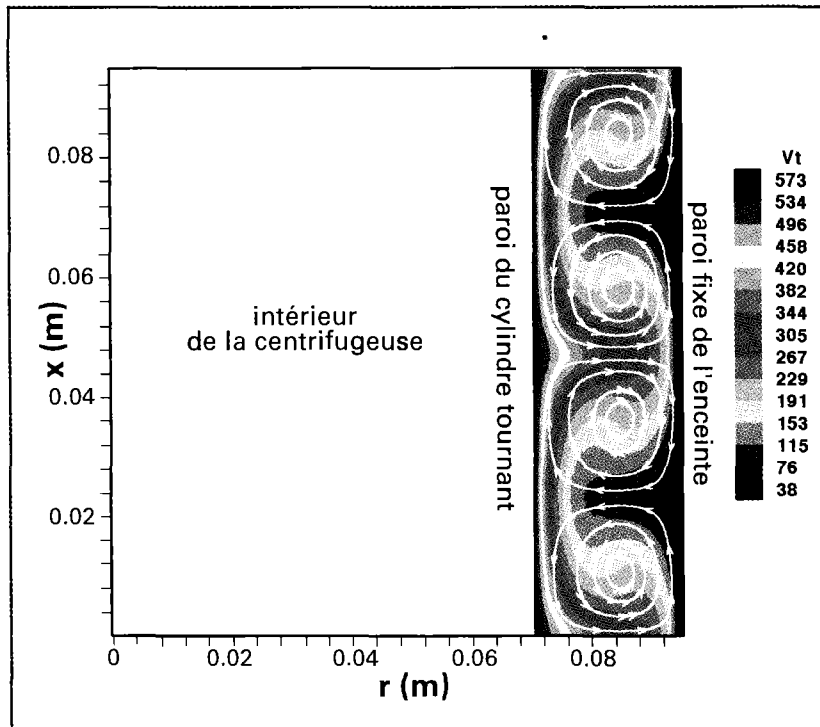


Figure 5
Simulation Monte-Carlo
DSMC de l'écoulement de
Couette dans l'enceinte
d'une centrifugeuse,
 $a = 7 \text{ cm}$, $\Omega a = 650 \text{ m/s}$.
Vitesse de rotation V_t (m/s)
du gaz. Mise en évidence de
rouleaux de convection.

également disponibles. En régime permanent, la puissance mécanique dépensée pour s'opposer au frottement du cylindre est entièrement dissipée en chaleur. Elle est donc égale à la somme des quantités de chaleur calculées sur les deux cylindres. Les lois d'évolution des flux de chaleur dissipée en fonction de la pression résiduelle dans l'enceinte permettent d'estimer les pressions maximales admissibles et conditionnent ainsi le dimensionnement des pompes moléculaires.

Un cas particulier de l'écoulement de Couette est celui de Taylor-Couette, correspondant à une perturbation du premier. Ces écoulements ont été largement étudiés expérimentalement et analytiquement. En écoulement incompressible, l'analyse mathématique linéaire met en évidence une première bifurcation vers le régime de Taylor-Couette. Cette analyse fait apparaître un nombre caractéristique, le nombre de Taylor, dépendant de la viscosité dynamique, de la géométrie et de la vitesse de rotation de la paroi externe. Lorsque ce nombre dépasse une valeur critique, on passe donc de l'écoulement de Couette à un écoulement perturbé avec présence de vortex. Une analyse non linéaire aboutit à une deuxième bifurcation – lorsque le nombre de Taylor croît – avec apparition de rouleaux de Taylor oscillants. En écoulement compressible, l'analyse mathématique est plus complexe mais des études numériques de la stabilité de l'écoulement montrent également l'existence d'un régime de Taylor-Couette, avec rouleaux de convections stationnaires. En revanche, l'étude du domaine des gaz raréfiés est plus récente [7]. Il est intéressant d'observer que les calculs DSMC effectués dans l'enceinte d'une centrifugeuse montrent également l'existence de rouleaux de convection, à des pressions toutefois suffisamment élevées, en l'occurrence pour un nombre de Knudsen de 0.015. Le nombre de Knudsen est ici défini comme le rapport du libre parcours moyen – ou distance moyenne parcourue par une molécule entre deux collisions – sur la distance séparant les deux cylindres (cf. Fig. 5).

Pour les régimes moléculaires dans l'enceinte, qui sont ceux des centrifugeuses à grande vitesse, ces rouleaux ne se forment pas.

Simulations Monte-Carlo dans une centrifugeuse à gaz

CONCLUSIONS

L'écoulement interne dans une centrifugeuse est décrit par des codes dérivant des équations de Navier-Stokes, valides dans la quasi-totalité du fluide tournant. Une description microscopique est néanmoins nécessaire pour étudier les zones raréfiées de la centrifugeuse. C'est le cas dans la détente du gaz d'alimentation en interaction avec le gaz tournant. Les simulations Monte-Carlo développées à cet effet, permettent cette description et peuvent ainsi donner des conditions limites réalistes au codes d'écoulement comme TRYPHON dont le rôle est d'estimer les performances séparatrices de la centrifugeuse. Les simulations Monte-Carlo sont également utiles pour traiter le problème du frottement et de l'échauffement du cylindre tournant avec le gaz résiduel dans l'enceinte. En déterminant la puissance mécanique et les flux de chaleur dissipées sur la paroi tournante et sur l'enceinte, elles renseignent ainsi sur la pression résiduelle acceptable compte tenu des contraintes thermiques imposées.

RÉFÉRENCES

- [1] F. DONEDDU, P. ROBLIN, C. VAN WAMBEKE
"Modélisation des performances séparatrices en ultracentrifugation gazeuse : le code TRYPHON",
Rapport scientifique DCC 1998, pp. 14-19.
- [2] F. DONEDDU, P. ROBLIN, H.G. WOOD
"Optimization Studies for a Gas Centrifuge",
Separation Science and Technology, 1999, à paraître.
- [3] G. A. BIRD
"Molecular Gas Dynamics and
the Direct Simulation of Gas Flows",
Oxford Science Publication, 1994
- [4] P. ROBLIN, T. NGUYEN
Test-Particle Monte-Carlo Method :
Improvement and comparison with the Direct Simulation,
Proceeding of the 18th International Symposium on
Rarefied Gas Dynamics : Theory and Simulation,
édité par B.D. Shizgal et D.P. Weaver,
Vol. 159, Vancouver, 1992, pp. 443-449.
- [5] F. DONEDDU, P. ROBLIN, H. G. WOOD
"Application of the Pancake Model to the Iguazu Machine"
in Separation Phenomena in Liquids and Gases-1998,
Proceeding of the 6th Workshop of Separation Phenomena
in Liquids and Gases,
Nagoya University, Japan, 1998, pp. 36-47.
- [6] M. COUETTE
"Etude sur le frottement des liquides",
Ann. Chim. Phys. 21, 433, 1890
- [7] K. AOKI, Y. SONE, M. YOSHIMOTO
"Numerical Analysis of the Taylor-Couette Problem
for a Rarefied Gas by the Direct Simulation Monte-Carlo Method",
Proceeding of the 21th International Symposium
on Rarefied Gas Dynamics édité par R. Brun et al,
Marseille, 1998, pp. 109-116.

Extended Abstract

Monte-Carlo simulations in a gas centrifuge

PHILIPPE ROBLIN
FRÉDÉRIC DONEDDU

This paper is associated with the centrifugation process for isotope separation, using the principle of a cylinder rotating at high speed in a vacuum casing. As in the most widely used configuration, the gas containing the isotope mixture is introduced by a fixed axial feed pipe and expands in the cylinder. It is subjected to high centrifugal acceleration, undergoes rigid body rotation and stratifies radially according to a barometric-type pressure law. By pressure diffusion, the heavier isotopes migrate to the cylinder wall and the lighter to the center. A temperature gradient on the wall and the presence of a scoop in the fluid, produce a vertical countercurrent which transforms the radial separation effect into an axial effect. The scoop extracts the gas depleted in light isotopes, called W, and another is used to recover the gas enriched in light isotopes, called P (cf. Fig. 1). Practically all the gas is governed by the Navier-Stokes equations in 2D axial symmetry. Due to the strong pressure stratification, continuous fluid equations are not valid in the whole cylinder, with or without linearization of the model. Consequently, an internal boundary separates the continuum domain from a rarefied domain in which the feed gas expands. The radial position of this cut-off then approaches the cylinder wall with increasing rotation speeds. In the rarefied domain, the Boltzmann equation is solved and a well suited numerical method is the Monte-Carlo method. A complete simulation of feed gas expansion and interaction with rotating gas, presented here with the DSMC (Direct Simulation Monte-Carlo) code [3], provides realistic boundary conditions for fluid flow calculations. The reference centrifuge is a hypothetical machine enabling the scientific community to compare results obtained for the optimization of separation performance [5]. Its radius a is 6 cm, and its peripheral speed a is 600 m/s. The selected gas, containing the isotopes, is UF_6 . The gas pressure $p(a)$ at the cylinder wall is set at 100 Torr and the gas temperature is 310 K at the feed pipe outlet. The domain studied with DSMC extends radially up to $r_{max} = 5$ cm, i.e., outside the estimated fluid limit of around 4,5 cm, and the domain is limited axially to $x_{max} = 5$ cm. At the center, the radius of the feed pipe is taken at $r^0 = 0,5$ cm. The axial extension h of the outlet orifice is 1 cm and there is a symmetry plane at $x = 0$ (cf. Fig. 2). The outlet condition is assumed to be sonic. The rotating gas is simulated by an emission from the internal boundary, at $r = r_{max}$. Because of the rigid-body rotation in the fluid region, the speed of the gas emitted over a half-maxwellian is r_{max} . The domain, which is initially empty, is divided into uniform, 100×100 cells. The time step is $5 \cdot 10^{-7}$ secondes. At zero feed, the emitted gas from the rotating internal boundary has a barometric-type pressure profile even up to the axis. In the feed expansion, rotation of the feed gas is induced by collisions with the revolving gas (Fig. 3) and its radial speed drops drastically (cf. Fig. 4). The influence of HF, present in the rotating UF_6 , on the rotation of the feed gas is also studied.

From the technological standpoint, it is essential to know the mechanical power of the rotating cylinder and the heat flux dissipated on the two cylinders, as a function of the residual pressure in the casing. The Couette flow of the rarefied gas in the casing, between the rotating cylinder and the fixed outside cylinder, is so studied with DSMC. For small Knudsen numbers ($Kn \ll 0,01$), defined as the ratio of the mean free path – mean distance of a molecular collision – to the distance between the cylinders, steady Taylor-Couette vortices are identified by this kinetic description (cf. Fig. 5).