

## SIMULACIÓN DEL FLUJO DE GASES PESADOS EN UNA CENTRÍFUGA UTILIZANDO EL MÉTODO “DIRECT SIMULATION MONTECARLO (DSMC)”

### FLOW SIMULATION OF HEAVY GASES IN A CENTRIFUGE USING THE DIRECT SIMULATION MONTECARLO (DSMC) METHOD

Paola Córdoba<sup>a</sup>, Federico Bertalot<sup>b</sup>, Enzo Dari<sup>a</sup>, Ruben Weht<sup>b</sup> y Alfredo Hazarabedian<sup>b</sup>

<sup>a</sup>Centro Atómico Bariloche, Comisión Nacional de Energía Atómica, Bariloche, Río Negro, Argentina, [paolaco@cab.cnea.gov.ar](mailto:paolaco@cab.cnea.gov.ar)

<sup>b</sup>Centro Atómico Constituyentes, Comisión Nacional de Energía Atómica, Buenos Aires, Argentina

**Palabras clave:** Centrífuga de gas, DSMC, Flujo en rotación.

**Resumen.** En este trabajo se muestran los avances del modelado computacional del flujo de gases en una centrífuga. El mismo presenta serias dificultades ya que debido a la gran velocidad de rotación, se generan altos gradientes de densidad y presión en la dirección radial y por lo tanto dos regiones bien diferenciadas: una cercana a la pared exterior, donde la distancia entre moléculas es lo suficientemente chica como para considerar el medio como un continuo. Por el contrario, en la región central, esta distancia se hace tan grande que la hipótesis de medio continuo deja de ser válida. En esta región donde el gas se encuentra rarificado, se hace necesario un modelo estadístico y uno muy utilizado es el Direct Simulation Montecarlo (DSMC). En este trabajo se muestran los avances del modelado computacional del flujo de gas en una centrífuga utilizando este enfoque. Dicho modelo se encuentra implementado en el código Suds Ultracentrifuge Direct Simulation (SUDS), desarrollado originalmente dentro de la Comisión Nacional de Energía Atómica (CNEA). En particular se realizó un proceso de validación del código SUDS, resolviendo un problema con solución analítica conocida, obteniéndose resultados satisfactorios.

**Keywords:** Gas centrifuge, DSMC, rotating flow.

**Abstract.** This work presents the advances concerning the computational modeling of the gas flow in a centrifuge. This modeling presents serious difficulties due to the high velocity rotation, which also generates high density and pressure gradients in the radial direction and therefore well differentiated regions: the one close to the outer wall, where the distance between molecules is small enough to consider the medium as a continuum. Conversely, in the central region, near the inner wall, the gas structure must be considered as a set of discrete molecules and the continuum hypothesis is no longer valid. In this region where the gas is rarified, a statistical model is necessary and one widely used is the Direct Simulation Montecarlo (DSMC). This work presents the advances in computational modeling of gas flow in a centrifuge using this statistical approach. This model is implemented in the Suds Ultracentrifuge Direct Simulation (SUDS) code, originally developed in the Comisión Nacional de Energía Atómica (CNEA). The SUDS code was validated, solving a problem with a known analytical solution, obtaining satisfactory agreement.

## 1. INTRODUCCIÓN

El presente trabajo forma parte de una línea de investigación en el marco de un tema estratégico de CNEA y que corresponde a una de las fases del ciclo de combustible nuclear. La misma consiste en el desarrollo de una herramienta computacional que permita el acople de modelos estadístico-continuo en problemas que presentan regímenes muy distintos, como es el caso del flujo de gases pesados en una centrífuga para separación isotópica.

Dicha modelización presenta serias dificultades ya que debido a la muy alta velocidad de rotación, varios miles de revoluciones por minuto (RPM), la componente más pesada del gas tiende a concentrarse cerca de la pared exterior del recipiente, mientras que la más liviana tiende a acumularse relativamente en la región central. Esto genera altos gradientes de densidad y presión en la dirección radial y por lo tanto regiones bien diferenciadas. En la zona cercana a la pared exterior se acumula la componente de gas más pesada y que se encuentra en mayor proporción dentro de la mezcla de gas que ingresa a la centrífuga. En esta región, la distancia entre moléculas es lo suficientemente chica como para considerar el medio como un continuo y las ecuaciones de Navier Stokes proporcionan un modelo matemático convencional (Nakayama y Usui, 1974; Park y Hyun, 1990). Por el contrario, en la región central del recipiente se concentran las moléculas más livianas que se encuentran en una proporción mucho menor dentro de la mezcla y por lo tanto la estructura del gas debe considerarse como un conjunto de moléculas discretas. En esta región la hipótesis de medio continuo deja de ser válida (Roblin y Doneddu, 2001) y se dice que el gas se encuentra en un régimen rarificado. Existe una amplia gama de aplicaciones en donde el problema fluidodinámico involucra distintos regímenes de flujo y los mismos pueden coexistir en un mismo dispositivo (Gad-el-Hak, 2006). Los flujos de gas rarificados se presentan generalmente en aplicaciones con geometrías de pequeña escala: bombas Knudsen para separación de gases (Nakaye y Sugimoto, 2016), intercambiadores de calor de alta temperatura, cavidades térmicas de pequeña escala como medidores de vacío (Moghadam et al., 2014), ó en sistemas de baja presión como en aplicaciones aeroespaciales (Teschner et al., 2016) y en particular para nuestro interés, en flujos de gases rotantes (Nakayama y Usui, 1974; Roblin y Doneddu, 2001). Entender y poder predecir el comportamiento del flujo de gases rarificados permite la evaluación del desempeño de estos dispositivos y por lo tanto impacta directamente en el análisis de un óptimo diseño y operación (Moghadam et al., 2014).

El modelado de flujos en este régimen de tan baja densidad requiere de un abordaje microscópico. El mismo reconoce la estructura del gas como una infinidad de moléculas discretas e idealmente proporciona información de la posición, velocidad y estado de cada molécula en todos los tiempos (Bird, 1994). Dentro de los modelos computacionales microscópicos podemos distinguir dos enfoques: el determinístico, mediante Dinámica Molecular (MD), y los estadísticos, mediante la resolución de la ecuación de Boltzmann y DSMC (Bird, 1994; Alexander y García, 1997). Las simulaciones de MD son altamente ineficientes en la transición entre el régimen rarificado y el régimen continuo, denominado de transición, sin embargo es muy adecuado para gases densos y fluidos líquidos. La ecuación de Boltzmann bajo ciertas restricciones es válida para todos los regímenes, sin embargo, a menos que no se hagan ciertas simplificaciones esta ecuación es difícil de resolver en el régimen de transición. El método DSMC es válido también en todos los regímenes, sin embargo se hace muy costoso para el régimen continuo (Gad-el-Hak, 2006). Debido a que no existe un único método que pueda ser aplicable, de forma eficiente computacionalmente, en aplicaciones donde coexisten distintos regímenes, se hace necesario el uso de modelos híbridos que acoplen los modelos continuo y molecular. Actual-

mente el modelo híbrido DSMC-Navier Stokes es uno muy utilizado y sigue siendo objeto de estudio para diversas aplicaciones (Ghazanfari et al., 2021). En el presente trabajo se muestran los avances obtenidos en el modelado computacional de una centrífuga usando el código SUDS, desarrollado originalmente en el Departamento de Física de la Materia Condensada y la División de Materiales Avanzados de la CNEA. Esta herramienta de cálculo permite modelar el flujo de gas en una centrífuga que rota a altas velocidades con el enfoque estadístico DSMC. Con este enfoque el gas es modelado como un conjunto de partículas discretas cuyo estado va actualizándose de acuerdo a ciertas reglas (Alexander y García, 1997). Esta herramienta permite obtener como resultado los campos de densidad numérica, temperatura y velocidades de cada celda que conforma el dominio de la simulación. En este trabajo se muestra el desempeño de dicha herramienta en la resolución de un problema de flujo en rotación con solución analítica conocida.

## 2. DESCRIPCIÓN DEL PROBLEMA

Para la validación del código SUDS se eligió un caso simple con solución analítica conocida. Este caso consiste en un gas confinado en un cilindro anular, con radio interno  $r_{int}$  y radio externo  $r_{ext}$ , que rota a gran velocidad angular constante  $\Omega$  sobre su eje, tal como se ilustra en la Fig. 1.

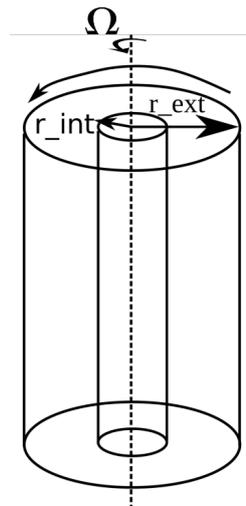


Figura 1: Cilindro anular que rota sobre su eje con velocidad angular constante.

La deducción de la solución analítica para este problema se obtiene a partir de la ecuación de momento. La misma, para un sistema de referencia rotante está dada por:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = \frac{\nabla p}{\rho} - \Omega \times (\Omega \times \mathbf{r}) - 2\Omega \times \mathbf{u} + \nu \nabla^2 \mathbf{u} + \frac{\nu}{3} \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}) + \mathbf{f} \quad (1)$$

donde el segundo y tercer término del lado derecho de la Ec. (1) son respectivamente las fuerzas centrífuga y de Coriolis que aparecen como consecuencia de usar un sistema de referencia no inercial. Donde  $\mathbf{u}$  es el vector velocidad referida a este sistema.  $p$  es la presión,  $\rho$  la densidad del fluido,  $\nu$  la viscosidad cinemática,  $\Omega$  el vector velocidad angular con magnitud  $\Omega$ ,  $\mathbf{r}$  el vector posición respecto al origen y  $\mathbf{f}$  representa las fuerzas externas por unidad de volumen. La fuerza centrífuga además se puede expresar como el gradiente de una cantidad escalar como:

$$\boldsymbol{\Omega} \times (\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r}) = -\nabla\left(\frac{1}{2}\Omega^2 r^2\right) \quad (2)$$

donde  $r$  es la distancia desde el eje de rotación o coordenada radial del cilindro. Así, reemplazando la presión por  $p^* = p - \frac{1}{2}\rho\Omega^2 r^2$ , se reduce el problema a uno idéntico en donde el término de la fuerza centrífuga no está presente (Tritton, 1968):

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = \frac{\nabla p^*}{\rho} - 2\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{u} + \nu \nabla^2 \mathbf{u} + \frac{\nu}{3} \nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}) + \mathbf{f} \quad (3)$$

donde  $p^*$  se denomina presión reducida.

En flujos en alta rotación, las fuerzas volumétricas, p. ej. la gravitacional, son extremadamente pequeñas en relación a las rotacionales por lo que podemos despreciarlas. Si además, sólo nos interesa el comportamiento estacionario del flujo de gas en la centrífuga, la Ec. (3) se reduce a:

$$\rho(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + 2\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{u} = -\nabla p^* + \mu \left( \nabla^2 \mathbf{u} + \frac{1}{3} \nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}) \right) \quad (4)$$

En equilibrio estático (esto es:  $\mathbf{u} = 0$ ), el fluido rota con el sistema como si fuera un cuerpo rígido. La Ec. (4) queda ahora reducida a:

$$-\nabla p^* = 0 \quad (5)$$

$$\frac{\partial p}{\partial r} = \rho\Omega^2 r \quad (6)$$

Parámetro	Notación	valor
Radio interno	$r_{int}$	0.0125 m
Radio externo	$r_{ext}$	0.075 m
Altura	$h$	0.5 m
Masa molecular	$M$	$352^{-3}$ kg/mol
Velocidad angular	$\Omega$	4712.4 rad/s
Temperatura	$T$	300 K
Presión pared externa	$p_{ext}$	130 torr

Tabla 1: Propiedades físicas del gas estudiado y dimensiones del recipiente.

El gas considerado en nuestro caso es el Hexafluoruro de Uranio (UF<sub>6</sub>), que puede ser modelado como un gas ideal con casi todas las propiedades constantes en un rango amplio de temperaturas (20-60°C) (DeWitt, 1960). Algunas propiedades físicas de este gas, así como las dimensiones del recipiente y datos del problema estudiado se encuentran detallados en la Tabla 1. Usando la ecuación de estado para un gas ideal:  $p = \rho RT/M$ , siendo  $R$  la constante universal de los gases,  $T$  la temperatura y  $M$  el peso molecular del gas y reemplazando en Ec. (6), se puede plantear la siguiente integral considerando los límites de integración de acuerdo a la geometría dada por la Fig. 1.

$$\int_{\rho(r)}^{\rho(r_{ext})} \frac{d\rho}{\rho} = \int_r^{r_{ext}} \frac{\Omega^2 M r}{RT} dr \quad (7)$$

la cual resulta en:

$$\rho(r) = \rho(r_{ext}) e^{\frac{\Omega^2 M}{2RT} (r^2 - r_{ext}^2)} \quad (8)$$

Si usamos la misma ecuación de estado para escribir el perfil (8) en términos de la presión, nos queda:

$$p(r) = p(r_{ext}) e^{\frac{\Omega^2 M}{2RT} (r^2 - r_{ext}^2)} \quad (9)$$

y del mismo modo, teniendo en cuenta que  $\rho = nM/V$ , siendo  $n$  el número de moles y llamando  $\tilde{n} = n/V$ , se puede obtener el perfil de densidad numérica, en unidades de  $[moles/m^3]$ , así:

$$\tilde{n}(r) = \tilde{n}(r_{ext}) e^{\frac{\Omega^2 M}{2RT} (r^2 - r_{ext}^2)} \quad (10)$$

Cabe resaltar que el perfil (10) coincide con el perfil de concentración molecular de un gas de una única especie bajo las mismas condiciones del problema descrito en esta sección, el cual se encuentra en equilibrio termodinámico, abordando el problema desde la perspectiva de la teoría cinética molecular. La deducción de este perfil con dicho abordaje puede consultarse en (Olander, 1972).

## 2.1. Número de Knudsen

El número de Knudsen ( $Kn$ ) es una cantidad adimensional que permite caracterizar el régimen del flujo debido a que relaciona dos escalas de longitud a nivel microscópico y macroscópico. La escala microscópica está dada por el camino libre medio de los átomos o moléculas ( $\lambda$ ) que conforman el gas y a nivel macroscópico la escala de longitud  $l$  está asociada al gradiente de una cantidad macroscópica. En particular para el problema que se estudia en este trabajo, los mayores gradientes ocurren en la dirección radial para cantidades como densidad y presión. Por lo que se calcula  $l$  como  $\rho/|\partial\rho/\partial r|$ . Mientras que el camino libre medio para un gas ideal cuyas moléculas y/o átomos se modelan como esferas rígidas, se calcula como  $1/(\sqrt{2}\pi\tilde{n}d^2)$ . Siendo  $\tilde{n}$  la densidad numérica y  $d$  el diámetro molecular. El número de Knudsen es el cociente entre ambas escalas ( $\lambda/l$ ) y dado que la densidad numérica depende del radio, se puede obtener el número de Knudsen como función de la dirección radial.

$$Kn(r) = \frac{1}{\sqrt{2}\pi d^2 \tilde{n}(r)} \quad (11)$$

## 2.2. Número de moles totales en el recipiente

El perfil dado por la Ec. (10) nos da la distribución de moles por unidad de volumen en el recipiente. Se puede calcular el número de moles totales en su interior, integrando el perfil de densidades en todo el volumen del cilindro, lo que da como resultado:

$$(\#moles)_{centrifuga} = \int_V \tilde{n}(r) dV = \int_V \tilde{n}(r_{ext}) e^{-\frac{M}{2RT}((\Omega r_{ext})^2 - (\Omega r)^2)} dV \quad (12)$$

$$= \int_0^h \int_0^{2\pi} \int_{r_{int}}^{r_{ext}} \tilde{n}(r_{ext}) e^{-M(\Omega r_{ext})^2/2RT} e^{M(\Omega r)^2/2RT} r dr d\theta dz \quad (13)$$

$$= \frac{2\pi h RT}{M\Omega^2} \tilde{n}(r_{ext}) \left[ 1 - e^{M\Omega^2/2RT}(r_{int}^2 - r_{ext}^2) \right] \quad (14)$$

Dado que a una temperatura de 300 K el gas UF<sub>6</sub> se desublima a presiones mayores a  $\sim 130$  torr ( $\sim 17332$  Pa), podemos fijar la presión en la pared externa del recipiente en este valor y a partir de la ecuación de estado para gases ideales, deducir  $\tilde{n}(r_2)$ .

Usando  $h$ ,  $\Omega$ ,  $M$ ,  $T$  de la Tabla 1 y siendo  $R = 8.314 \text{ m}^3\text{Pa/K mol}$  y  $n(r_{ext}) = 6.9 \text{ moles/m}^3$ , el número de moles totales en la centrífuga ( $(\#moles)_{centrifuga}$ ) resulta en  $6.96 \times 10^{-3}$  moles. Este valor teórico es empleado para realizar la validación.

## 2.3. Adimensionalización del perfil de densidad teórico

Podemos escribir el perfil de densidad teórico (10) de forma adimensional, usando  $r^* = r/r_2$ , de la siguiente manera:

$$\tilde{n}(r^*) = \tilde{n}(1) e^{\frac{\Omega^2 M r_{ext}^2}{2RT} (r^{*2} - 1)} \quad (15)$$

definiendo la velocidad angular adimensional como:  $\Omega^* = \frac{\Omega r_{ext}}{v_{car}}$ , donde  $v_{car} = \sqrt{\frac{3RT}{M}}$ . Reemplazando estas cantidades adimensionales en (15), obtenemos el perfil de densidades adimensional:

$$\tilde{n}(r^*) = \tilde{n}(1) e^{-\frac{3}{2}\Omega^{*2}(1-r^{*2})} \quad (16)$$

### 2.3.1. Modelado Computacional

La centrífuga fue modelada de acuerdo a la centrífuga modelo *Iguassu* (Doneddu y Roblin, 2000), como un cilindro anular con las dimensiones dadas en la Tabla 1. En SUDS se emplea el método DSMC para calcular el estado de las partículas de simulación. El método numérico DSMC ha sido desarrollado para el estudio de flujos de gas rarificados y proporciona una solución numérica exacta para la ecuación de Boltzmann aunque no la resuelve directamente, sino que se basa en el modelado computacional de moléculas de simulación dentro del espacio físico, la interacción entre ellas y con los bordes del mismo (Bird, 1970). En DSMC cada partícula o molécula de simulación representa un conjunto de átomos o moléculas reales. Estas partículas

se distribuyen inicialmente de forma aleatoria en todo el recipiente y se hace avanzar la simulación actualizando el estado de cada una de ellas. En SUDS el dominio de simulación es dividido en celdas que se construyen dividiendo las coordenadas radial, angular y axial en segmentos. La Fig. 2 muestra el dominio de simulación con una división de celdas típica. El producto de las divisiones realizadas en cada coordenada cilíndrica constituye el número total de celdas en el que se encuentra dividido el dominio.

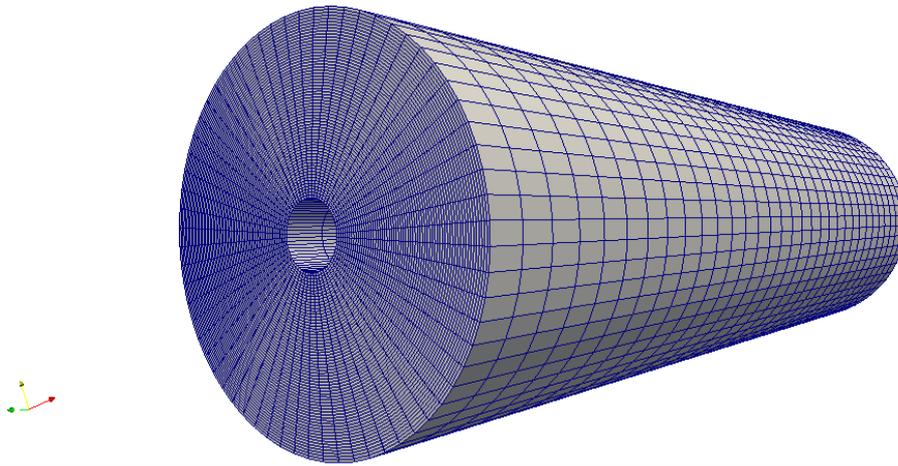


Figura 2: Visualización del dominio de simulación y su discretización en celdas.

La Fig. 3 muestra el diagrama de flujo del código SUDS. Al inicio del programa se leen todos los parámetros de la simulación tales como el número de iteraciones, el paso de tiempo, el número de partículas, cantidad de divisiones del dominio en cada dirección y parámetros físicos del gas estudiado, entre otros. La simulación inicia colocando a las partículas en el dominio y dicha tarea puede hacerse o bien asignando la posición y velocidad de las partículas de forma aleatoria o a partir de un estado inicial dado como parámetro a la simulación. Esto permite hacer reenganche de corridas. Luego el código realiza un loop sobre el número de iteraciones que se fijaron al inicio y en cada paso actualiza la posición de cada partícula con el paso de tiempo dado y la velocidad de cada una de ellas. Luego se aplican las condiciones de borde, que se describen en la siguiente sección, para luego calcular las colisiones entre partículas. En esta etapa, por cada celda se calcula el número de colisiones esperado para el volumen de la celda con un número de partículas dentro de ella. En SUDS se usa el modelo molecular Hard Sphere (HS), en donde únicamente colisionan aquellas partículas que se encuentren dentro de la sección transversal efectiva de colisión (Teschner et al., 2016). Para aplicar este mecanismo de interacción, una vez que se calcula el número de colisiones, se define el número de pares de partículas que se sortean para efectuar la colisión. Si la velocidad relativa entre ese par de partículas es mayor a la velocidad máxima relativa de cada celda, se efectúa un choque elástico y se actualizan las posiciones y velocidades de las mismas. Más detalles de la implementación del método pueden verse en (Bird, 1970; Teschner et al., 2016).

#### 2.4. Paredes térmicas

En SUDS se considera un tipo de condición de borde denominado paredes térmicas (*thermal walls*), que considera que las superficies del recipiente son altamente irregulares de baja densidad granular. Cada molécula que colisiona con este tipo de pared experimenta una serie de colisiones con las moléculas de la superficie y como resultado la velocidad de escape de la

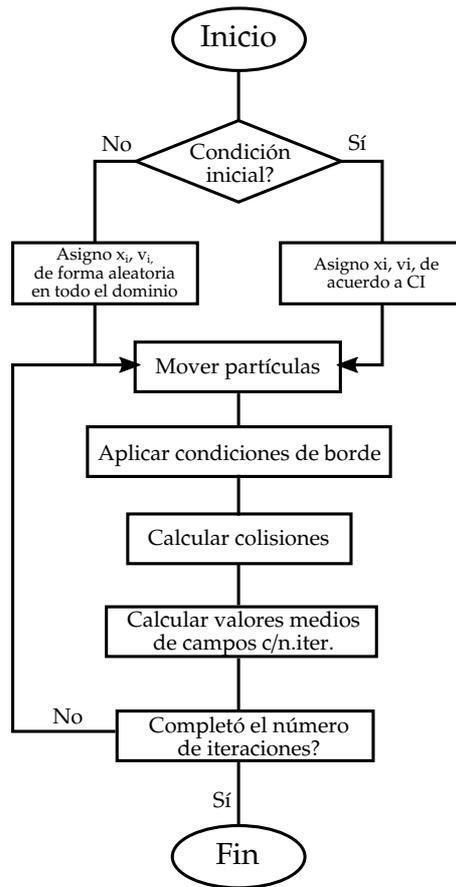


Figura 3: Diagrama de flujo del código SUDS.

molécula incidente se hace aleatoria y no se correlaciona con la velocidad de incidencia. La distribución de velocidades de las moléculas que dejan esta superficie está determinada por la temperatura de la pared (Alexander y García, 1997; Tehver et al., 1998). Las componentes de la velocidad de escape de una molécula que choca con este tipo de pared, tienen una distribución de probabilidad que está dada por la Ec. (17), para la componente perpendicular ( $v_{\perp}$ ) a la superficie y la Ec. (18), para las componentes paralelas ( $v_{\parallel}$ ).

$$P_{\perp}(v_{\perp}) = \frac{m}{kT_w} v_{\perp} e^{-mv_{\perp}/2kT_w}, \quad (17)$$

$$P_{\parallel}(v_{\parallel}) = \sqrt{\frac{m}{2\pi kT_w}} e^{-mv_{\parallel}/2kT_w}, \quad (18)$$

donde  $k$  es la constante de Boltzmann,  $m$  es la masa de la molécula y  $T_w$  es la temperatura en la pared. Usando estas distribuciones, las componentes de la velocidad de rebote están dadas por:

$$v_{\parallel i} = \sqrt{\frac{kT_w}{m}} r_{G_i}, \quad (19)$$

$$v_{\perp} = \sqrt{\frac{-2kT_w}{m} \ln(rnd)}, \quad (20)$$

donde  $v_{\parallel i}$  es la componente  $i$ -ésima, paralela al plano de la superficie (pared térmica), de la velocidad,  $v_{\perp}$  es la componente perpendicular a la misma,  $r_{G_i}$  es un número aleatorio con distribución Gaussiana de media nula y varianza 1, y  $rnd$  es un número aleatorio de distribución uniforme entre  $(0, 1)$  (Alexander y García, 1997).

### 3. RESULTADOS

Para la validación del código SUDS, se fijó y se realizó un análisis de convergencia de parámetros numéricos relevantes al método DSMC tales como el número de iteraciones necesarias para la convergencia, número de celdas del dominio de simulación y además se hizo un análisis de costo computacional en función del tamaño del problema. Se realizaron simulaciones preliminares para determinar la sensibilidad de la solución al número de iteraciones para alcanzar la convergencia. Para ello se fijó el número de partículas y el número de celdas en  $16 \times 64 \times 32$  y se varió el número de iteraciones, luego se cambió el número de partículas y se repitió este proceso. En ambos casos se compararon los perfiles de densidad obtenidos con SUDS respecto al perfil teórico dado por (16). De este primer análisis se observó que es equivalente usar una cantidad de partículas moderada de 10.000, realizando 1.000.000 de iteraciones que usar un orden de magnitud mayor de partículas, aún cuando se requieran menos iteraciones para la convergencia de la solución numérica.

Caso	No. iter.	No. part.	Grilla
C5	50.000	100.000	(16 x 64 x 32)
C11	1.000.000	10.000	(16 x 64 x 32)
C19			(32 x 64 x 32)
C20			(64 x 64 x 32)
C21			(64 x 64 x 64)
C22			50.000

Tabla 2: Casos de estudio y sus parámetros numéricos

Con este análisis preliminar se prosiguió a realizar un análisis de sensibilidad de la solución al tamaño de la grilla fijando el número de iteraciones y de partículas. En la Tabla 2 se muestran los casos estudiados y el tamaño de grilla correspondiente. La Fig. 4 (a) muestra los perfiles de densidad numérica para cada uno de los casos detallados en la Tabla 2 y en (b) la visualización del campo de densidad promediado y distribución de partículas, en un corte transversal del dominio de simulación para el caso C22.

En esta figura se puede observar que la solución numérica es muy sensible a la discretización espacial en dirección radial. Vemos en los casos C19 a C21 que a medida que se incrementa el número de celdas, la solución numérica tiende a la predicha por la teoría, mientras que cerca de la pared interna (esto es, en el rango de entre 0.2 -0.5), la solución numérica presenta variaciones considerables. Esto se debe a que en esta región hay una menor concentración de partículas y al disminuir el tamaño de la celda, se reduce el número de partículas por celda, lo cual hace que la estadística empeore. En el caso C22, se incrementó el número de partículas a 50000 para un tamaño de grilla de  $64 \times 64 \times 32$ , presentando resultados satisfactorios. Estos resultados sugieren la necesidad de hacer una discretización no uniforme en la dirección radial, de tal manera de mejorar la precisión de la solución numérica en las distintas regiones del dominio.

Adicionalmente, y para estimar la precisión de los resultados obtenidos con SUDS, se calculó en cada caso de simulación, el número de moles totales en el recipiente y se comparó con el

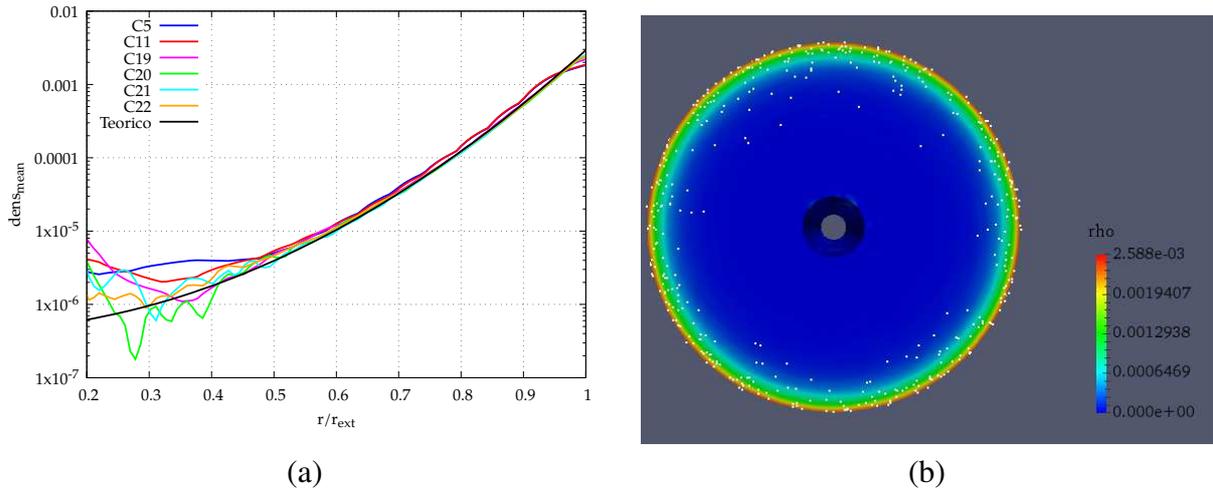


Figura 4: (a) Perfiles de densidad del UF6 para los distintos casos estudiados que se detallan en la Tabla 2 y (b) visualización de campos de densidad y distribución de partículas para el caso C22.

valor teórico esperado. Dicha comparación se muestra en la Tabla 3. La misma muestra que la menor diferencia se obtiene bajo los parámetros numéricos del caso C22 obteniéndose una discrepancia de aproximadamente el 5 % respecto del valor teórico esperado.

Caso	Moles totales	% Diff.
C11	6.5691E-03	5.6624
C5	6.57106E-03	5.6343
C19	6.58955E-03	5.3687
C20	6.59613E-03	5.2742
C21	6.59573E-03	5.2800
C22	6.59692E-03	5.2629
Teórico	6.96340E-03	

Tabla 3: Comparación de los moles totales calculados en los casos simulados y el valor teórico esperado.

Por otro lado, la Figura 5 muestra la distribución del número de Knudsen a lo largo de la dirección radial para el problema modelo elegido y calculado a partir de la expresión (11). Cabe resaltar que para  $Kn < 0,1$  las ecuaciones de Navier-Stokes son válidas aunque en el rango  $0,01 < Kn < 0,1$  el gas se encuentra ligeramente rarificado. Mientras que para el rango  $0,1 < Kn < 10$ , el flujo de gas se encuentra en régimen de transición. Y para  $Kn \geq 10$  se dice que el flujo está altamente rarificado (Gad-el-Hak, 2006). La Fig. 5 muestra que el problema estudiado exhibe la existencia de distintos regímenes a lo largo de la dirección radial.

### 3.1. Evaluación del costo computacional

Con el objetivo de seleccionar el equipo de cómputo que minimice los tiempos de cálculo, se realizó un estudio comparativo, de tiempo en función del tamaño del problema, en distintas máquinas. Se realizaron las corridas en tres unidades con las siguientes especificaciones técnicas: Intel(R) Xeon(R) CPU E5-2650 0 2.0 GHz, perteneciente al cluster *Neurus* (del Departamento de Computación de Alto Desempeño de la CNEA), Intel(R) Xeon(R) CPU E5-2660 v3 2.6 GHz (Mecclust), perteneciente al cluster Mecclust y 2xXeon E5-2670 v3 2.3 GHz 2x12 + HT

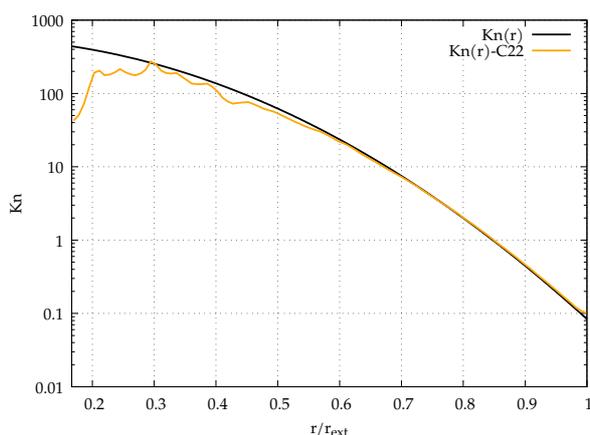


Figura 5: Distribución radial del número de Knudsen.

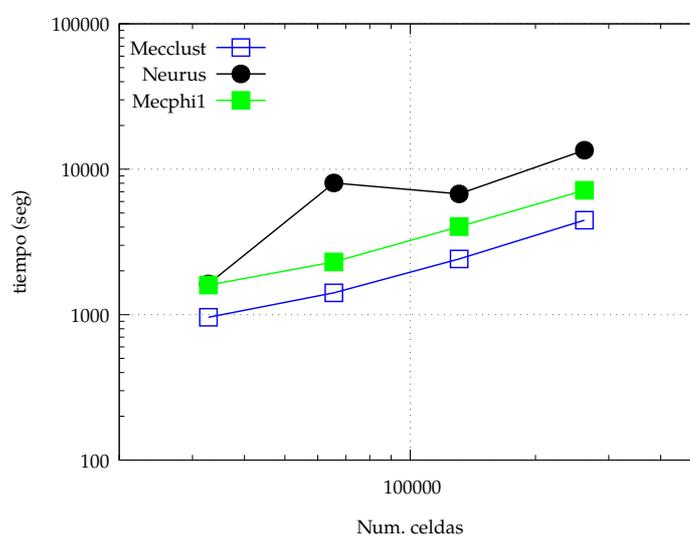


Figura 6: Comparación de tiempos de cálculo en función del tamaño del problema (medido en número de celdas del dominio) para las distintas facilidades.

(Mecphi1), éstas dos últimas ubicadas en el Departamento de Mecánica Computacional de la CNEA.

Se realizaron simulaciones, del problema estudiado en el presente documento, variando el número de celdas del dominio y se registró el tiempo de cálculo de cada una de ellas en las tres máquinas disponibles. Los resultados se muestran en la Fig. 6. Como se puede apreciar en esta figura, los tiempos de cálculo más bajos fueron obtenidos en Mecclust.

#### 4. CONCLUSIONES

Se presentó una validación del código SUDS para el caso de gas en rotación a altas velocidades en estado isotérmico y sin perturbaciones externas, usando el método estadístico DSMC. Se variaron parámetros numéricos para determinar la sensibilidad de la solución al número de partículas, iteraciones y celdas en las cuales está dividido el dominio. Los resultados presentan un acuerdo satisfactorio cuando se compara con el perfil de densidad numérica teórico, lo que muestra que la herramienta numérica con la que se cuenta es capaz de reproducir el modelo teórico para el problema modelo de flujo en alta rotación y se espera que a futuro esta herramienta

sea utilizada en un modelo híbrido para la simulación de flujos en distintos regímenes.

## REFERENCIAS

- Alexander F.J. y García A.L. The Direct Simulation Monte Carlo Method. *Computers in Physics*, 11, 1997.
- Bird G.A. Direct Simulation and the Boltzmann equation. *The Physics of Fluids*, 13, 1970.
- Bird G.A. *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of gas flows*. Oxford University Press, 1994.
- DeWitt R. Uranium hexafluoride: A survey of the physicochemical properties. 1960. doi: 10.2172/4025868.
- Doneddu F. y Roblin P. Optimization studies for gas centrifuges. *Separation Science and Technology*, 35:1207–1221, 2000.
- Gad-el-Hak M. *MEMS: Introduction and Fundamentals*. Taylor & Francis, 2006.
- Ghazanfari V., Salehi A.A., Keshtkar A.R., Shadman M.M., y Askari M.H. Investigation of the continuum–rarefied flow and isotope separation using a hybrid CFD-DSMC simulation for UF<sub>6</sub> in gas centrifuge. *Annals of Nuclear Energy*, 152, 2021.
- Moghadam E.Y., Roohi E., y Esfahani J.A. Heat transfer and fluid characteristics of rarefied flow in thermal cavities. *Vacuum*, páginas 333–340, 2014.
- Nakayama W. y Usui S. Flow in Rotating Cylinder of a Gas Centrifuge. *Journal of Nuclear Science and Technology*, 11, 1974.
- Nakaye S. y Sugimoto H. Demonstration of a gas separator composed of Knudsen pumps. *Vacuum*, páginas 154–164, 2016.
- Olander D.R. Technical basis of the gas centrifuge. En *Advances in Nuclear Science and Technology*, páginas 105–174. Academic Press, 1972.
- Park J.K. y Hyun J.M. Numerical solutions for thermally driven compressible flows in a rapidly rotating cylinder. *Fluid Dynamics Research*, páginas 139–153, 1990.
- Roblin P. y Doneddu F. Direct Monte-Carlo Simulations in a Gas Centrifuge. *Rarefied Gas Dynamics: 22nd International Symposium*, 2001.
- Tehver R., Toigo F., Koplil J., y Banavar J.R. Thermal walls in computer simulations. *Physical Review E*, 57, 1998.
- Teschner T.R., Könözy L., y Jenkins K.W. Progress in particle based multiscale and hybrid methods for flow applications. *Microfluid Nanofluid*, 20, 2016.
- Tritton D.J. *Physical Fluid Dynamics*. Oxford University Press, 1968.