

PROYECTO INTEGRADOR DE LA CARRERA DE
GRADO DE INGENIERÍA MECÁNICA

ANÁLISIS DE MODELOS FLUIDODINÁMICOS DE
DIFUSIÓN DE ESPECIES EN MEZCLAS DE GASES

Adonis Constantinidis

Dr. José Héctor González
Director

Ing. Leandro Rafael Perlo
Co-director

Miembros del Jurado

Dr. Enzo Alberto Dari (Instituto Balseiro)
Dr. Federico Eduardo Teruel (Instituto Balseiro)

Julio de 2023

Proyecto LASIE – Centro Atómico Bariloche

Instituto Balseiro
Universidad Nacional de Cuyo
Comisión Nacional de Energía Atómica
Argentina

(Biblioteca Leo Falicov CAB-IB)

Inventario 24793

10/08/2023

Biblioteca Leo Falicov

A mamá y papá, Raquel y Alejandro

A mis hermanos, Ari y Nico

A mis abuelos, Conce y Arnaldo

A Papú y Yayá, que ya no están

Índice de símbolos

- b Coeficiente de ajuste asociado a la temperatura.
- C_{der} Porcentaje de enriquecimiento en la mitad derecha del corte salida.
- C_i Concentración de la especie i -ésima.
- C_p Calor específico a presión constante.
- D_{ij} Coeficiente de difusión entre las especies i y j .
- D_{ij0} Coeficiente de difusión entre las especies i y j a presión y temperatura de referencia.
- J_i^D Corriente difusiva másica de la especie i -ésima.
- k Coeficiente de conductividad térmica.
- m Masa molar de la mezcla.
- m_i Masa molar de la especie i -ésima.
- n Densidad molar total de la mezcla.
- n_i Densidad molar de la especie i -ésima.
- p Presión.
- P_e Presión de entrada.
- p_0 Presión de referencia.
- p_i Presión parcial de la especie i -ésima.
- P_s Presión de salida.
- T Temperatura.
- T_0 Temperatura de referencia.
- \vec{V}_i Velocidad absoluta de la especie i -ésima.

\vec{v}_i Velocidad relativa a la mezcla de la especie i-ésima.

x_i Fracción molar de la especie i-ésima.

ρ Densidad.

ρ_i Densidad de la especie i-ésima.

$\vec{\Psi}$ Función vectorial para la resolución de difusión en el software.

Γ Función escalar para la resolución de difusión en el software.

ϕ Escalar.

μ Viscosidad cinemática.

σ Diámetro de colisión.

Índice de contenidos

Índice de símbolos	v
Índice de contenidos	vii
Índice de figuras	ix
Índice de tablas	xiii
Resumen	xv
Abstract	xvii
1. Introducción	1
1.1. Separación isotópica para enriquecimiento de uranio	1
1.2. Métodos de enriquecimiento	2
1.3. Características principales de los modelos de difusión	3
1.4. Motivación	4
1.5. Objetivo	4
1.6. Diferentes tipos de toberas en estudio en el proyecto LASIE	5
1.6.1. Tobera tipo Becker cortada	5
1.6.2. Tobera axi-simétrica con skimmer	6
1.6.3. Tobera cerrada	7
2. Metodología y caso de estudio	9
2.1. Elección de la tobera, consideraciones y mallado	9
2.1.1. Elección de la geometría: Tobera cerrada.	9
2.1.2. Mallado	12
2.2. Características de las simulaciones	14
2.2.1. Consideraciones de la fluidodinámica	15
2.2.2. Criterios de convergencia	16
2.3. Casos de estudio	18
2.3.1. Extracción de resultados	20

3. Desarrollo de modelos de difusión de especies	23
3.1. Modelo binario	24
3.2. Modelo ternario	25
3.3. Modelo ternario diluido	26
3.3.1. Modelo de Chapman-Enskog y parámetros utilizados	29
4. Resultados y discusión	31
4.1. Fluidodinámica	31
4.1.1. Velocidad	31
4.1.2. Presión	33
4.2. Difusión	34
4.2.1. $He - UF_6$, con uranio natural: Análisis de modelos binario y ternario	34
4.2.2. $He - UF_6$, con uranio natural y enriquecido al 5 %, 10 % y 20 %: Análisis de modelo ternario	36
4.2.3. $He - UF_6$, con uranio enriquecido al 99 %: Análisis de modelo ternario	38
4.2.4. $He - UF_6$ con uranio natural: Análisis de modelo ternario diluido	41
4.2.5. $He - UF_6 - SF_6$ con SF_6 al 1 %: Análisis de modelos ternario y ternario diluido	45
4.2.6. $He - UF_6 - SF_6$ con SF_6 al 0.1 %, 0.5 %, 1 %, 10 %, 15 % y 20 %: Análisis de modelos ternario y ternario diluido	49
5. Conclusiones y pasos futuros recomendados	55
A. Ecuaciones para las propiedades de las mezclas	59
B. Práctica Profesional Supervisada (PPS)	61
Bibliografía	63
Agradecimientos	65

Índice de figuras

1.1. Esquema del método de difusión gaseosa.	2
1.2. Esquema del método de centrifugación.	3
1.3. Tobera tipo Becker cortada.	5
1.4. Tobera axi-simétrica con skimmer.	6
1.5. Esquema del funcionamiento de la tobera axi-simétrica con skimmer.	7
1.6. Esquema de la tobera cerrada.	7
2.1. Geometría de la tobera cerrada con sus medidas.	10
2.2. Posible zona de recirculación de flujo.	11
2.3. Posible zona de recirculación de flujo ampliada.	12
2.4. Ejemplo de zona de recirculación para tobera cerrada.	12
2.5. Mallado de la tobera utilizada.	13
2.6. Empalme entre las partes del mallado con relación 1.5:1.	14
2.7. Ampliación de malla en la garganta.	14
2.8. Ampliación de malla en las paredes.	14
2.9. Residuos de las ecuaciones de continuidad, energía, velocidades en x e y y concentraciones.	16
2.10. Ubicación del corte para la extracción de datos en la tobera cerrada.	20
4.1. Mapa del número de Mach en la tobera.	32
4.2. Mapa del núcleo supersónico de la tobera.	32
4.3. Mapa vectorial de velocidad en la zona de potencial recirculación.	33
4.4. Mapa de presión en la zona de interés de la geometría.	34
4.5. Perfil de concentración de UF_6 para los modelos binario y ternario.	35
4.6. Perfil de concentración para $^{235}UF_6$ para el modelo ternario.	36
4.7. Perfiles de concentraciones normalizados de $^{235}UF_6$, con distintas concentraciones en mezcla, para el modelo ternario.	37
4.8. Perfiles de concentración normalizados de $^{235}UF_6$, con diferentes porcentajes en mezcla e iguales coeficientes D_0 , para el modelo ternario.	38

4.9. Perfil de concentración de $^{235}\text{UF}_6$, para una mezcla con 99 % de composición de esta especie.	39
4.10. Perfil de concentración de $^{238}\text{UF}_6$, para una mezcla con 99 % de composición de $^{235}\text{UF}_6$	39
4.11. Perfiles de concentración de $^{238}\text{UF}_6$ para una mezcla con 99 % de $^{235}\text{UF}_6$ y distintos D_0 entre especies de UF_6	40
4.12. Perfil de concentración para UF_6 para el modelo ternario diluido.	41
4.13. Perfil de concentración para $^{235}\text{UF}_6$ para el modelo ternario diluido.	42
4.14. Coeficientes de difusión entre especies para UF_6 para el modelo ternario diluido.	42
4.15. Concentración de $^{235}\text{UF}_6$, para diferentes valores de D_{3-12} (original y D_{12}).	43
4.16. Concentración de $^{235}\text{UF}_6$, para diferentes D'_{3-12} (D_{23} , $0.01D_{3-12}$ y 0).	43
4.17. Perfil de concentración para $^{235}\text{UF}_6$ con y sin gradiente de concentración de la especie 1.	44
4.18. Perfil de concentración de $\text{UF}_6 - \text{SF}_6$, para la mezcla 8.	45
4.19. Perfil de concentración de SF_6 de modelos ternario y ternario diluido, para la mezcla 8.	45
4.20. Coeficientes de difusión entre especies para HeUF_6SF_6 para el modelo ternario diluido.	46
4.21. Perfiles de concentración de SF_6 , para distintos valores de D_{3-12}	47
4.22. Perfiles de concentración de SF_6 , para algunos valores de D_{3-12}	47
4.23. Perfiles de concentración de SF_6 con y sin gradiente de la concentración de la especie 1.	48
4.24. Comparación de cálculo de gradiente de concentración de la especie 1 por software y manual.	48
4.25. Perfiles de concentración normalizados de SF_6 para porcentajes de 1 %, 0.5 % y 0.1 % de SF_6 en UF_6SF_6	49
4.26. Perfiles de concentración normalizados de SF_6 para porcentajes de 0.1 %, 0.5 %, 1 %, 10 %, 15 % y 20 % de SF_6 en UF_6SF_6	50
4.27. Perfiles de velocidad de mezcla para porcentajes de 0.1 % y 20 % de SF_6 en UF_6SF_6	51
4.28. Coeficiente de difusión D_{13} para modelo ternario diluido con SF_6 al 0.1 % y 20 %.	52
4.29. Coeficiente de difusión D_{23} para modelo ternario diluido con SF_6 al 0.1 % y 20 %.	52
4.30. Perfil de concentración de He para modelo ternario diluido con SF_6 al 0.1 % y 20 %.	53

4.31. Perfil de concentración de SF_6 para modelo ternario diluido con SF_6 al 0.1 % y 20 % y $D'_{3-12} = 0.01D_{3-12}$	53
4.32. Comparación de densidad calculada por el software y realimentada calculada a mano.	53
4.33. Comparación de densidad (en %) calculada por el software y realimentada calculada a mano.	53

Índice de tablas

2.1. Parámetros relevantes de los gases a utilizar.	18
2.2. Mezclas utilizadas para $He - UF_6$	19
2.3. Mezclas utilizadas para $He - UF_6 - SF_6$	19
2.4. Parámetros relevantes de los gases a utilizar.	19
3.1. Parámetros de los procesos difusivos simulados.	29
3.2. Parámetros utilizados para el modelo de Chapman-Enskog.	29
4.1. Concentraciones C_{der} en la parte derecha del corte de salida.	44
4.2. Concentraciones C_{der} en la parte derecha del corte de salida.	46
4.3. Concentraciones C_{der} de SF_6 en la parte derecha del corte de salida. . .	48
4.4. Cocientes de concentraciones C_{der} sobre porcentaje de SF_6 en mezcla, para mezclas 6, 7 y 8.	50
4.5. Cocientes de concentraciones C_{der} sobre porcentaje de SF_6 en mezcla, para mezclas 9, 10 y 11.	51

Resumen

En este trabajo se lleva a cabo un estudio de diferentes modelos de difusión de especies en mezclas de gases, centrándose en mezclas binarias y ternarias. Se desarrolla e implementa un nuevo modelo ternario diluido con el objetivo de representar de manera óptima y con menor costo computacional al modelo ternario original.

El estudio se realiza mediante simulaciones numéricas utilizando el software *ANSYS Fluent*, con un cálculo fluidodinámico acoplado con los modelos difusivos mediante un código en lenguaje *C*. Se elige una geometría adecuada para simular, una tobera cerrada, que permite simular un flujo supersónico y estacionario y crear gradientes de presión conocidos para tener criterio para el comportamiento y comparación entre los modelos.

Los gases utilizados en el trabajo son en todos los casos Helio (He), como gas *carrier*, al 95 % con un 5 % de un gas de proceso. Este último es en un primer momento hexafluoruro de uranio (UF_6) con diferentes concentraciones de la especie $^{235}UF_6$ (0.711 %, 5 %, 10 %, 20 % y 99 %) y luego, UF_6 con hexafluoruro de azufre (SF_6) con diferentes concentraciones de este último (0.1 %, 0.5 %, 1 %, 10 %, 15 % y 20 %).

En el caso de la mezcla de He y UF_6 natural, se encuentra una buena concordancia entre los modelos binario y ternario. Luego, se realiza un análisis del perfil de concentración de la especie con menor concentración en el modelo ternario. Se observa una forma funcional que podría atribuirse a inestabilidades de convergencia dada la baja concentración de entrada, la poca diferencia de masas y la característica no lineal y acoplada del modelo. Este perfil resulta independiente del valor de la especie con menor concentración en la mezcla, pero dependiente del coeficiente de difusión. También, se realiza un análisis del modelo diluido, y se obtienen resultados satisfactorios en cuanto a la representación del modelo ternario. Se decide cambiar la mezcla para aumentar la diferencia de masas y comparar valores cuantitativos, con el objetivo de mejorar la convergencia del modelo ternario.

Se simula el modelo ternario diluido con la mezcla de $He - UF_6 - SF_6$ y se observa un perfil de concentración esperado para la especie con menor concentración, pero más difundido de lo que debería. Nuevamente, los coeficientes de difusión son determinantes.

Este nuevo modelo resulta ser buena aproximación del modelo original, captando la física de la difusión y el orden de los valores de concentración en el dominio simulado.

Palabras clave: DIFUSIÓN, SEPARACIÓN ISOTÓPICA, ENRIQUECIMIENTO

Abstract

Different models of species diffusion in gas mixtures are analysed, focusing on binary and ternary mixtures. A new ternary model with one diluted component (called "diluted ternary model") is developed and implemented to represent the original ternary model in an optimal way and with lower computational cost.

The study is carried out by numerical simulations using the *ANSYS Fluent* software, with a fluid dynamic calculation coupled to the diffusive models, which are programmed in *C* language. A suitable geometry is chosen, a curved nozzle, which allows to simulate a supersonic and stationary flow and to obtain qualitatively pressure gradients to have a performance criteria and to compare results between the models.

The gases that are used in all cases are Helium (*He*), as carrier gas, at 95% molar concentration, mixed with a process gas. First, the process gas is uranium hexafluoride (UF_6) with different concentrations of $^{235}UF_6$ isotope (0.711%, 5%, 10%, 20% and 99%) and then, the process gas is UF_6 mixed with sulphur hexafluoride (SF_6) with different concentrations of the last one (0.1%, 0.5%, 1%, 10%, 15% and 20%).

In $He - UF_6$ mixture with natural uranium, good agreement is observed between the binary and ternary models. Then, a concentration profile analysis of the diluted specie in the ternary model is performed. Some observed profiles are attributed to convergence instabilities given from the low input concentration, the small mass difference and the non-linear, implicit and coupled characteristic of the model. This profile is independent of the lowest concentration specie value in the mixture, but depends on the diffusion coefficient. A diluted model analysis is implemented and satisfactory results are obtained for ternary mixtures representations. Then a change in the mixture composition was evaluated, increasing the mass difference to compare the quantitative values, in order to improve the convergence of the ternary model.

The diluted ternary model is simulated with a $He - UF_6 - SF_6$ mixture and an expected profile is observed for the lowest concentration specie, but more diffused than it was expected. It was found that the diffusion coefficients are decisive in these results.

This new model turns out to be a good ternary model approximation, representing the diffusion physics and the concentration values in the simulated domain.

Keywords: DIFFUSION, ISOTOPIC SEPARATION, ENRICHMENT

Capítulo 1

Introducción

“Yeah buddy, light weight baby.”

— Ronnie Coleman, 1998

1.1. Separación isotópica para enriquecimiento de uranio

El enriquecimiento de uranio es un proceso fundamental en el ámbito de la ingeniería nuclear. Su importancia radica en que el uranio enriquecido es la principal fuente de combustible en los reactores nucleares de hoy en día, tanto para producción de energía como también de investigación para producción de radioisótopos, entre otras aplicaciones.

El uranio en su forma natural está conformado por 3 isótopos, ^{238}U , ^{235}U y ^{234}U presentes con diferentes proporciones, 99.2742 %, 0.711 % y 0.0058 %, respectivamente. Normalmente, este último se desprecia en los cálculos, ya que contiene una proporción muy baja respecto a los otros dos. El isótopo ^{235}U es el único fisible, es decir, el único que puede producir una reacción en cadena, y para poder utilizarlo como combustible en la mayoría de los reactores nucleares, es necesario aumentar su proporción hasta niveles del 3 % o 4 % desde el uranio natural. Este proceso se conoce como enriquecimiento de uranio, y es uno de los procesos más complejos y costosos de la industria nuclear.

En este trabajo, el proceso de enriquecimiento dispone al uranio en forma de hexafluoruro de uranio (UF_6) gaseoso. Se utilizan los gradientes de presión generados por una fuerza centrífuga producida por la curvatura de una tobera convergente-divergente, para separar los isótopos del uranio. Este método se basa en la diferencia de masa entre los isótopos para separarlos. Cabe notar que el UF_6 es un gas pesado ($351.97 \frac{\text{g}}{\text{mol}}$), por lo que, para alcanzar mayores velocidades e impulsarlo, se lo mezcla con un gas inerte de baja masa, como el helio ($4.003 \frac{\text{g}}{\text{mol}}$), conocido como gas *carrier*.

1.2. Métodos de enriquecimiento

El enriquecimiento de uranio posee cierta complejidad, ya que el isótopo de mayor proporción ^{238}U es muy similar al isótopo de interés ^{235}U . Por lo tanto, para poder separarlos es necesario utilizar métodos que aprovechen las pequeñas diferencias entre ellos.

Existen diferentes métodos de enriquecimiento, algunos de ellos son:

- **Difusión gaseosa:** Es uno de los métodos mas antiguos para enriquecer uranio. Se utiliza UF_6 y se aprovecha la diferencia entre las velocidades de difusión de los isótopos $^{235}\text{UF}_6$ y $^{238}\text{UF}_6$, a través de membranas porosas para separarlos. En la Figura 1.1, se muestra un esquema de este método.

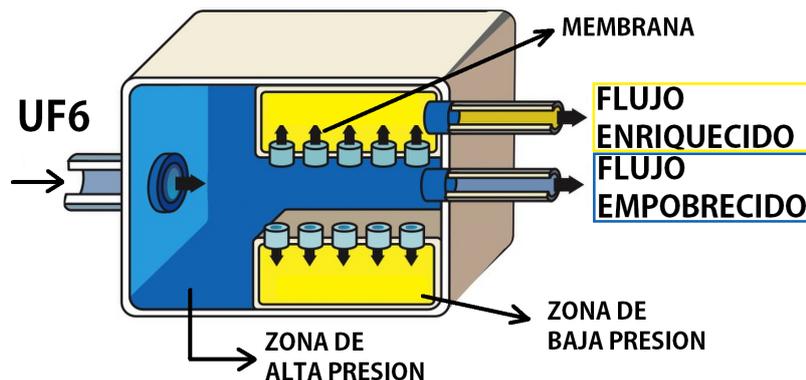


Figura 1.1: Esquema del método de difusión gaseosa.

- **Separación electromagnética:** En este método, se hace pasar al UF_6 por un campo magnético para que los isótopos sigan diferentes trayectorias debido a sus diferencias de masas.
- **Centrifugación:** En este método también se utiliza UF_6 . Se aprovecha la diferencia de masa entre los isótopos para separarlos al someterlos a una fuerza centrífuga en cilindros o centrifugadoras. El $^{235}\text{UF}_6$ es mas liviano que el $^{238}\text{UF}_6$, por lo tanto, este último se va a concentrar en mayor proporción en el exterior del cilindro, mientras que el $^{235}\text{UF}_6$ en el interior. Normalmente, se utiliza una configuración en cascada de centrifugadoras para lograr el enriquecimiento requerido. En la Figura 1.2, se muestra un esquema de este método.

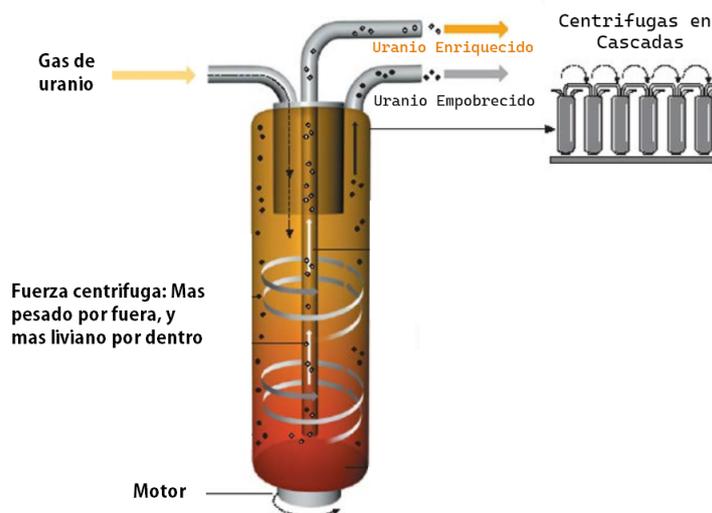


Figura 1.2: Esquema del método de centrifugación.

- Separación isotópica asistida por láser: Se hace pasar UF_6 por una tobera a régimen supersónico para alcanzar ciertas condiciones de presión y temperatura que logren una clusterización de moléculas de cada isótopo por separado. Luego, mediante un láser, se separan selectivamente los clusters de uno de los isótopos para aumentar la diferencia de masa entre ambas especies y poder separarlos con mayor eficiencia.

Este trabajo busca contribuir hacia el desarrollo de este último método.

1.3. Características principales de los modelos de difusión

Los modelos de difusión de especies, basados en la ecuación general de difusión de especies [1], son utilizados para describir el comportamiento de mezclas de gases. Plantean que la diferencia de velocidades entre las especies depende de un conjunto de términos que incluyen el gradiente de concentración (según la ley de Fick [1]), el gradiente de presión, el gradiente de temperatura y la fuerza boyante.

En este trabajo, se desarrollan y analizan modelos binarios y ternarios. Un modelo binario, es aquel que describe el comportamiento de una mezcla de dos especies. Este modelo proporciona información de la difusión entre ellas, en este trabajo UF_6 con He . Un modelo ternario, es aquel que describe el comportamiento de una mezcla de tres especies. Este modelo brinda información de las especies del gas de proceso con el gas *carrier*, por ejemplo, $^{235}UF_6$ y $^{238}UF_6$ con He . El gas *carrier* es un gas liviano que se utiliza en mezclas ternarias para impulsar al gas de proceso, en este caso UF_6 , y así poder alcanzar mayores velocidades. Ambos modelos serán útiles para el análisis.

1.4. Motivación

Este trabajo se realiza bajo el marco del proyecto LASIE (Laboratorio Argentino de Separación Isotópica para Enriquecimiento), el cual busca desarrollar y llevar a nivel industrial un método de enriquecimiento de uranio basado en la separación isotópica asistida por láser. Este método es uno de los más prometedores para el enriquecimiento de uranio, ya que permite alcanzar mayores factores de enriquecimiento que los métodos convencionales, como la centrifugación.

Resulta de sumo interés para el proyecto calcular y analizar la difusión de especies en mezclas de gases, con el fin de evaluar la separación isotópica en mezclas ternarias.

Una componente fundamental para el desarrollo de esta nueva técnica de enriquecimiento es la utilización de simulaciones computacionales fluidodinámicas (CFD), por el método de volúmenes finitos, de los procesos involucrados. Este método discretiza el dominio y las ecuaciones de conservación en volúmenes de control. Luego, se resuelven las ecuaciones para cada volumen de control, y se obtienen los valores de las variables en cada punto del dominio. La importancia de estas simulaciones radican en que permiten poder predecir y analizar el comportamiento de los flujos de gases en las toberas, y así poder optimizarlas para lograr las condiciones de flujo deseadas.

Los modelos de difusión ternarios son de fundamental importancia para el análisis de enriquecimiento de uranio dentro del proyecto LASIE. Estos modelos tienen una fuerte característica no lineal de ecuaciones diferenciales acopladas para calcular las velocidades de las especies. En algunos casos de geometrías complejas, la convergencia combinada de un cálculo CFD acoplado con difusión ternaria, puede ser altamente compleja. Si el modelo es susceptible a ser simplificado por una alta dilución de uno de los componentes, esa convergencia del cálculo se podría acelerar y mejorar.

1.5. Objetivo

El objetivo del trabajo es proponer un modelo simplificado para el análisis de difusión de mezclas ternarias. Se analizan las simplificaciones pertinentes al modelo de difusión ternaria en el caso de un componente dominante y uno altamente diluido en los otros dos. Se estudian esas simplificaciones y la manera de introducirlas en la cadena de cálculo. Finalmente, se comparan los resultados entre el modelo simplificado y el de difusión ternaria, para analizar los rangos de validez de la simplificación.

1.6. Diferentes tipos de toberas en estudio en el proyecto LASIE

Como se nombra anteriormente, para el proceso de separación isotópica aerodinámica se utilizan toberas con el fin de convertir el flujo en supersónico. Además, se busca producir gradientes de presión que ayuden a separar las distintas especies, como por ejemplo, con una curva en la tobera.

Dentro del proyecto LASIE, se trabaja con diferentes geometrías las cuales poseen distintas cualidades. A continuación, se describen las características principales y representaciones gráficas de algunas toberas utilizadas en el proyecto LASIE para simulaciones y/o experimentos.

1.6.1. Tobera tipo Becker cortada

Una de las geometrías utilizadas en el proyecto LASIE es la de tipo Becker cortada [2]. Este proceso de separación isotópica consiste en una tobera convergente-divergente con una entrada y dos salidas. Esta tobera posee una geometría plana, teniendo lugar en un plano bidimensional. Se ilustra en la Figura 1.3.

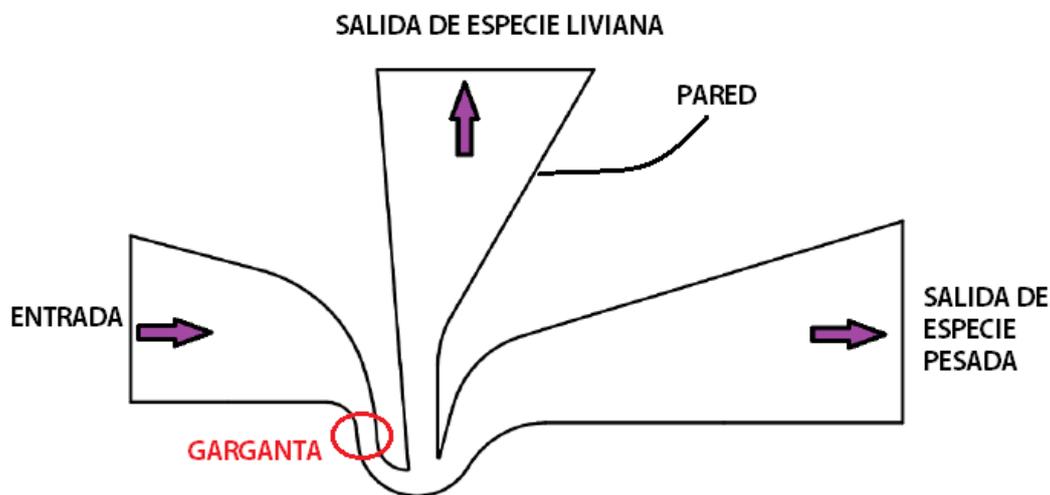


Figura 1.3: Tobera tipo Becker cortada. El flujo entra por la parte izquierda y se vuelve supersónico en el estrechamiento para luego expandirse súbitamente y separarse en dos flujos de salida [3].

La salida se separa en dos flujos mediante una cuchilla, en los que se espera una mayor concentración de la especie más liviana en el flujo de salida superior, mientras que en el flujo de salida derecho se espera una mayor concentración de la especie más pesada debido a los gradientes de presión. La cuchilla se encuentra ubicada en la zona de expansión supersónica, donde se espera que la separación sea mayor.

Esta geometría, además de ser una de las utilizadas para realizar simulaciones, se encuentra físicamente en el proyecto LASIE y se utiliza para realizar experimentos. La tobera es del orden de los milímetros. La idea es que, una vez que se logre entender el comportamiento en ella y el funcionamiento del método de enriquecimiento, poder escalarla a una de mayores dimensiones para poder realizar el proceso de separación isotópica a nivel industrial.

1.6.2. Tobera axi-simétrica con skimmer

Otra de las geometrías con las que se trabaja en simulaciones y en el laboratorio con resultados experimentales en el proyecto LASIE, es la tobera axi-simétrica. Una representación de esta tobera se muestra en la Figura 1.4.

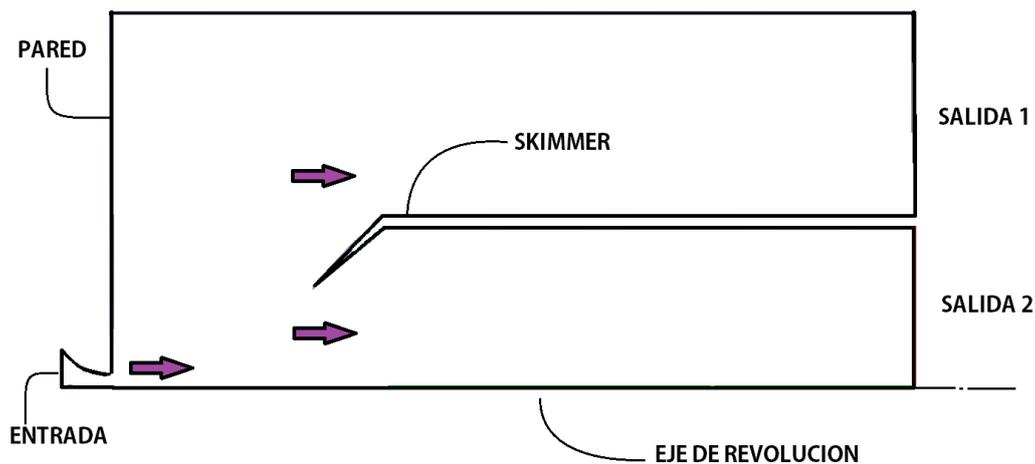


Figura 1.4: Esquema de la tobera axi-simétrica con skimmer. El flujo entra por la tobera, se expande y se separa mediante un skimmer en dos flujos. La línea inferior es el eje axial.

Por la parte izquierda, se ingresa un flujo con la mezcla de gases a enriquecer, el cual alcanza $Mach=1$ en el estrechamiento de la tobera convergente, debido a una diferencia de presiones determinada entre las condiciones de estancamiento y la cámara de descarga. Se produce una celda de Mach, limitada con ondas de choque en su periferia y caracterizada por una expansión supersónica en el núcleo. El flujo experimenta una expansión libre y se separa en dos mediante un *skimmer*. El funcionamiento se ilustra en la Figura 1.5. En esta geometría, resulta de interés el análisis de gradientes de temperatura, velocidad y densidad, además del gradiente de presión, ya que tendrán una importancia considerable en la separación de caudales molares por medio del skimmer [4].

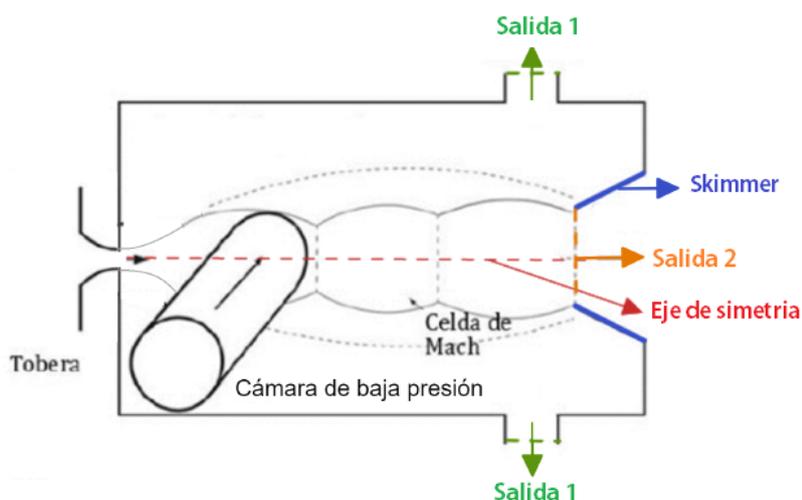


Figura 1.5: Esquema detallado de la tobera axi-simétrica con skimmer.

1.6.3. Tobera cerrada

Una geometría que se utiliza exclusivamente para simulaciones computacionales en el proyecto LASIE, ya que no se encuentra en forma física, es la tobera cerrada que se ilustra en la Figura 1.6. En esta tobera el flujo no se expande libremente, sino que se encuentra confinado por las paredes de la tobera, lo que se denomina flujo interno. Además, se simula en geometría 2D, por lo que se encuentra limitada a un plano.

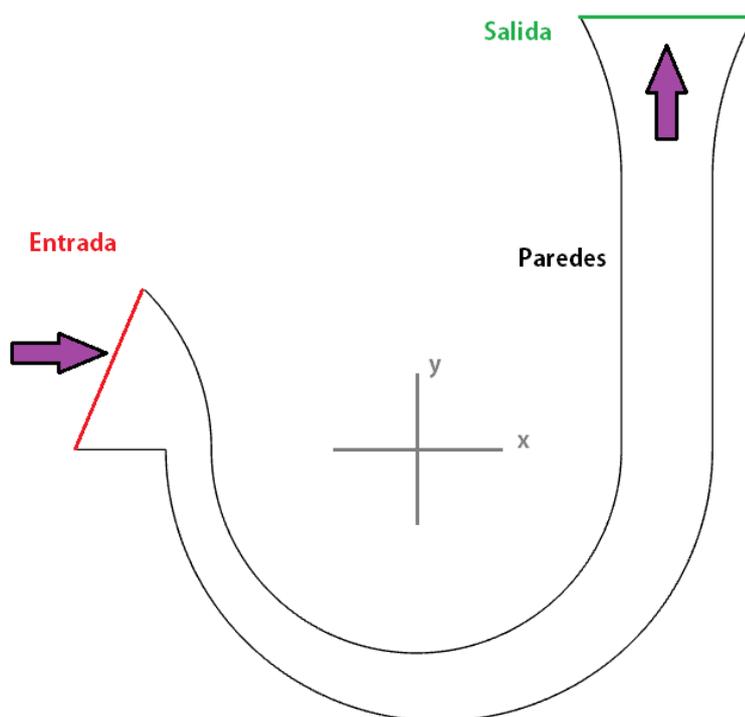


Figura 1.6: Representación de la tobera cerrada. El flujo ingresa por la entrada (rojo), fluye a través de la tobera limitada por las paredes (negro) y egresa por la salida (verde).

Esta tobera es del tipo convergente-divergente con una expansión gradual a medida que la mezcla a enriquecer fluye a través de ella. Es necesario, como con el resto de las geometrías, que la diferencia de presiones sea tal que el flujo se vuelva supersónico a partir del angostamiento.

Una característica que diferencia a la tobera cerrada de los tipos Becker y axi-simétrica es la falta de una cuchilla o skimmer para separar el flujo de salida. Puede surgir la pregunta de por qué no incorporar un divisor de flujo de salida para acumularlo en cámaras independientes (en flujo enriquecido y empobrecido). La respuesta radica en una de las ventajas de esta tobera, que es utilizarla para desarrollar y ajustar nuevos modelos difusivos, porque se conoce cualitativamente la forma del perfil de concentraciones resultante. Para estimar el comportamiento de la separación, se pueden hacer cortes hasta una posición de una cuchilla virtual en una sección transversal a la salida de la curva, y de esta manera evitar tener que realizar una simulación para cada posición de la cuchilla, lo cual consume un alto costo computacional.

Capítulo 2

Metodología y caso de estudio

“Qué desgracia es para un hombre crecer sin ver la belleza y fuerza de lo que su cuerpo es capaz.”

— Sócrates, 419 a. C.

Para llevar a cabo las simulaciones fluidodinámicas se emplea el software *ANSYS Fluent 16.0*, ya que es el que se utiliza en el proyecto LASIE. Con este programa se representa el caso de estudio, se crea la geometría y se procede a realizar una discretización o mallado sobre ella, asignándole un determinado tamaño de elemento. Posteriormente, se introducen todos los parámetros necesarios y las condiciones de contorno correspondientes para realizar las simulaciones. En este capítulo se detallan también las mezclas utilizadas para los diferentes casos de estudio, los criterios de convergencia y la forma en que se extraen los resultados.

2.1. Elección de la tobera, consideraciones y mallado

2.1.1. Elección de la geometría: Tobera cerrada.

Considerando las características de las distintas toberas que se utilizan en el proyecto LASIE, se puede observar que cada una posee diferentes cualidades que las hacen aptas para ciertos casos de estudio. Mas allá de sus diferencias, cada una contribuye a la comprensión del fenómeno de separación de especies aerodinámica, por lo que se considera que es necesario estudiarlas a todas para el interés del proyecto.

En el marco de este trabajo, se propone el desarrollo de un modelo simplificado para el análisis de difusión de mezclas ternarias, y evaluar su viabilidad, aplicabilidad y limitaciones. No se van a analizar en profundidad parámetros separativos, ya que no es el objetivo del trabajo aunque sean de sumo interés dentro del proyecto.

Explicado esto, se opta por utilizar la tobera cerrada que se muestra esquematizada en la Figura 1.6 para todas las simulaciones realizadas en el trabajo. El fin de utilizar la misma tobera para todo el trabajo es poder analizar los distintos modelos para diferentes casos de estudio con una tobera de referencia. Las dimensiones reales de la geometría se muestran en la Figura 2.1.

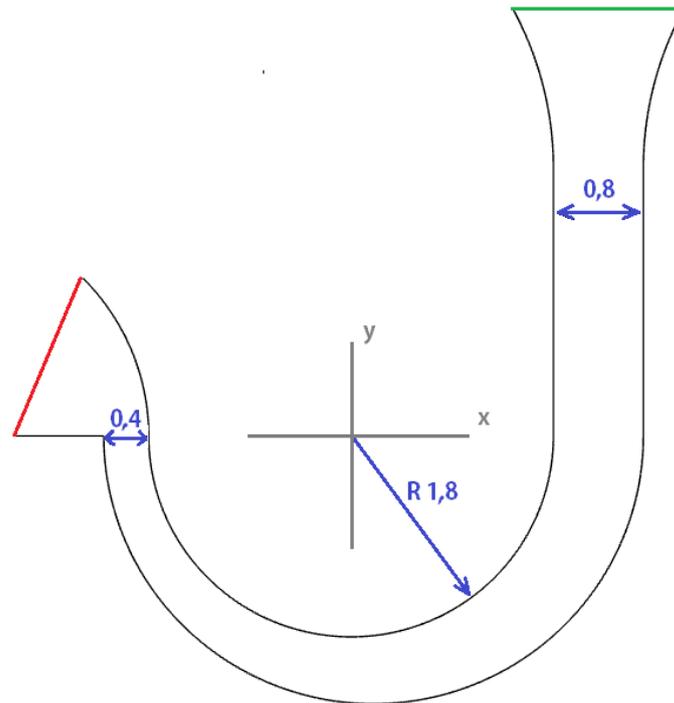


Figura 2.1: Representación de la tobera cerrada con sus medidas relevantes (azul). Los valores se encuentran en milímetros.

Son varias las características que hay que mencionar de esta tobera y el por qué de su elección.

Una de las razones principales de la elección es que es necesaria una geometría en la cual se conozca el sentido del gradiente de presión para tener una idea de antemano de la forma de los resultados que se van a obtener (por ejemplo, la forma funcional del perfil de concentración de las especies), por esto se busca esta geometría curva. Así se puede tener criterio si el modelo funciona correctamente. La elección de una tobera más compleja nos hace perder este criterio, ya que no se conoce el sentido del gradiente de presión y no se podría saber si los resultados obtenidos son correctos o no.

Sumado a esto, se necesita una geometría no tan compleja. Esto nos ayuda en poder reducir el tamaño de los elementos de mallado sin tener que lidiar con grandes tiempos de cálculo. Además, el hecho de no tener cuchilla o *skimmer* y que tenga una forma relativamente sencilla con una curva, nos permite alcanzar la convergencia en un tiempo considerablemente menor respecto a otras toberas más complejas. Por otro lado, como se busca desarrollar un nuevo modelo, no sería adecuado elegir una

tobera sumamente compleja. Se podrían analizar los nuevos códigos con geometrías más complejas, pero allí no se podría saber si los resultados obtenidos son producto de un mal funcionamiento del código o de alguna inestabilidad por la complejidad de la geometría. La idea es probar el nuevo modelo con esta geometría, por más que no exista físicamente en el proyecto, para luego poder aplicarlos a otras mas complejas, con mayores velocidades, separadores de flujo, distintos gases y condiciones de presiones.

Otra razón por la cual se justifica la elección de esta geometría, es su amplio radio en relación de la entrada y salida, ya que si esto no fuese así, podríamos tener problemas de recirculación de flujo en la parte interna al final de la curva de la tobera. Esta parte se puede observar en las Figura 2.2 y Figura 2.3. En la Figura 2.4, se puede observar un ejemplo de recirculación de flujo en una tobera cerrada [3].

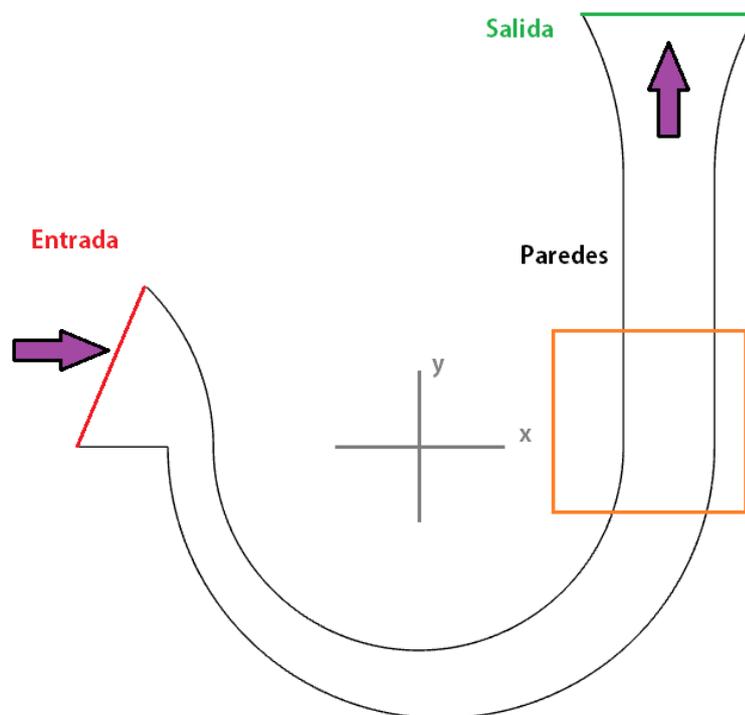


Figura 2.2: Demarcación de la posible zona de recirculación de flujo (naranja).

Esta recirculación, como se menciona en el párrafo anterior, tiene relación con el radio de la curva. Existen dos procesos superpuestos que producen este fenómeno. El primero ocurre por la inercia del flujo si el radio es muy chico, tenderá a copiar la curvatura y así crear una recirculación. El segundo consiste en que, al estar trabajando con flujos viscosos, en la pared se tendrá velocidad nula, por lo que se tiene una parte del flujo que será subsónica cercana a ella. Esto ocasionará que esta parte experimente un gradiente de presión adverso, el cual cambiará la derivada de la velocidad en la dirección normal a la pared con peligro de una potencial recirculación.

Si se observa la salida de la tobera cerrada en la Figura 1.6 y se compara con las otras dos toberas mencionadas anteriormente en las Figuras 1.3 y 1.4, se puede ver

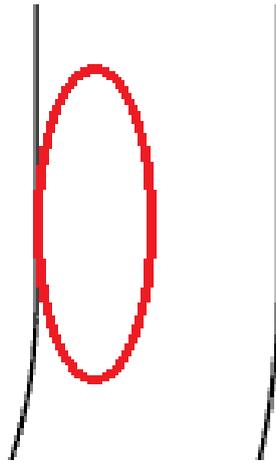


Figura 2.3: Detalle de la posible zona de recirculación de flujo ampliada (rojo).

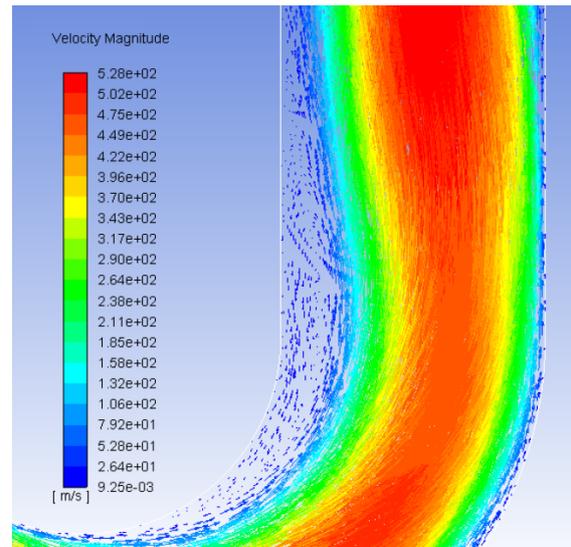


Figura 2.4: Ejemplo de zona de recirculación para tobera cerrada [3].

que se encuentra mucho más confinada en la tobera cerrada. Esto es otra ventaja de la elección de esta geometría porque por conservación de masa y momento lineal, se podría tener flujo que entre por la salida de la tobera, proveniente de una cámara inexistente no modelada y así decantar en resultados erróneos en la simulación difusiva [5].

Por último, este tipo de toberas se utilizan desde hace tiempo en el proyecto LASIE, con el fin de probar, analizar y desarrollar nuevos modelos. Mas allá de que nunca se construya en forma física, nos será de suma utilidad para determinar la validez de los modelos.

2.1.2. Mallado

Una vez elegida la geometría de trabajo, se procede a la etapa de mallado. Un buen mallado para realizar simulaciones numéricas es fundamental, ya que nos aporta a una mayor precisión en los resultados, convergencia y estabilidad numérica. Además, una buena representación del sistema físico y una mejor eficiencia computacional.

Previo a construir la malla, se definen las fronteras de la tobera. Tomando de referencia a la Figura 1.6, se definen: la entrada, por donde ingresa el flujo; salida, por donde egresa; y paredes, las cuales determinan la cavidad de la tobera por donde se propaga la mezcla de gases.

Para la construcción de la malla, se decide dividir la geometría en dos grandes sectores: el primero inicia en la entrada, pasando por el estrechamiento, hasta el final de la curva; mientras que el segundo comprende desde el final de la curva hasta la salida. Se determina de esta manera ya que nos interesa tener un mallado mas fino en

la zona de la curva, al ser donde se producen los fenómenos de difusión, separación y se extraen datos (ver Sección 2.3.1). Además, tener una malla mas gruesa en la parte final de la tobera nos acelera los tiempos de mallado de la geometría y de cálculo. En la Figura 2.5 se puede observar la malla generada.

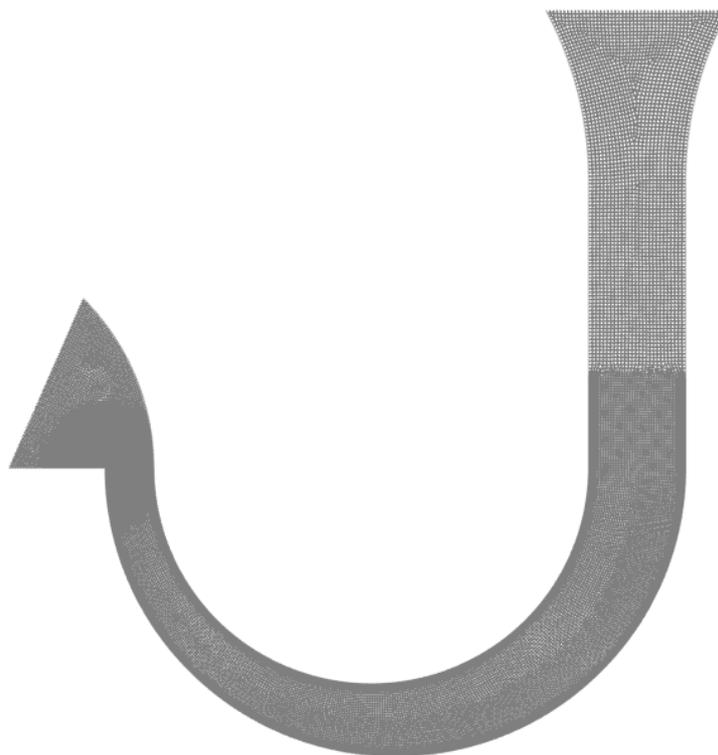


Figura 2.5: Mallado de la tobera utilizada

A simple vista, pueden observarse en la Figura 2.5 las dos zonas grandes de mallado. La zona mas fina tiene un tamaño de elemento de $2 \cdot 10^{-5}m$, mientras que la zona mas gruesa $3 \cdot 10^{-5}m$.

El empalme entre las mallas puede tener problemas si se realiza de manera brusca, con mucha diferencia de tamaño de elemento. Esta región es clave para que se transmita la información de manera correcta y para llevar a cabo la simulación, por ello se recomienda que la relación entre ellas no sea mayor a 2:1. En este caso la relación fue de 1.5:1. Esta unión de mallas puede observarse en la Figura 2.6.

Por otro lado, en las zonas mas vulnerables o críticas del mallado debido a las simulaciones que se realizan, se produce un refinamiento de malla. La primera zona es el estrechamiento de la tobera convergente-divergente, donde el flujo se transforma de subsónico a supersónico, se impone un tamaño de elemento $1 \cdot 10^{-5}m$. La segunda zona de refinamiento se realiza en las paredes, interna y externa, de la zona de la curva para tener mas detalle en la zona subsónica (de mayor gradiente transversal de la velocidad), realizándose un refinamiento gradual tomando separaciones de celda de 1.2 veces, respecto de la celda anterior desde la pared hasta el primer octavo del ancho

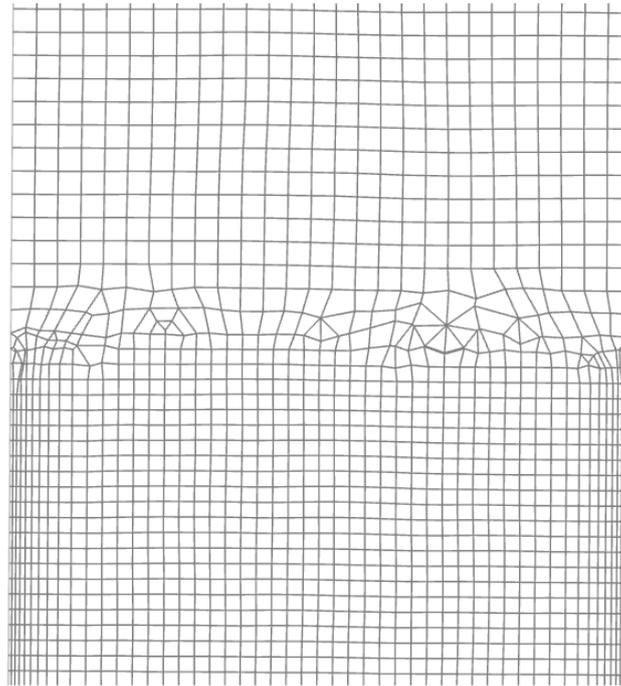


Figura 2.6: Empalme entre las partes del mallado con relación 1.5:1.

de la tobera convergiendo en el tamaño de elemento impuesto en un primer momento. Estas zonas pueden observarse en las Figuras 2.7 y 2.8.

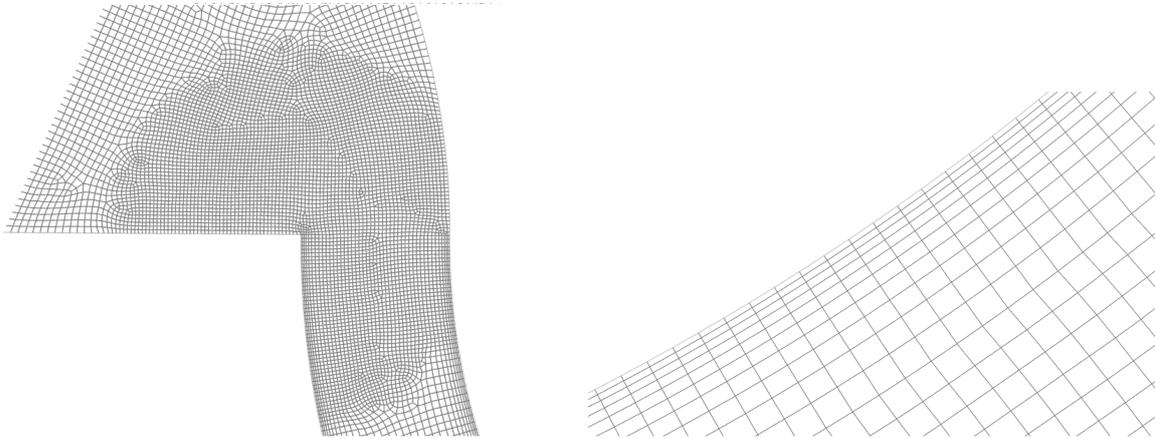


Figura 2.7: Ampliación de malla en la garganta. **Figura 2.8:** Ampliación de malla en las paredes.

2.2. Características de las simulaciones

Las simulaciones numéricas de este trabajo se dividen en dos partes. La primer parte es la fluidodinámica, en la cual se carga la mezcla con sus propiedades (véase Sección 2.2.1), se calcula mediante el software *ANSYS Fluent 16.0*, y a partir de ella se obtienen las variables de presión, densidad, velocidad, entre otras. Una vez convergida la parte fluidodinámica (véase Sección 2.2.2), se procede con la parte difusiva. Se acoplan los

resultados fluidodinámicos con la difusión de especies en el sistema. La difusión se calcula mediante un código en lenguaje *C*, que contiene el modelo de difusión utilizado y se empalma a la parte fluidodinámica. El código se implementa al programa de manera externa, dado que el software no cuenta con funciones para calcular difusión de especies.

Es importante destacar que la difusión está relacionada con la densidad ρ , por lo tanto, debe estar acoplada a la solución de la parte fluidodinámica. En situaciones donde los efectos de difusión no son tan grandes y las variaciones en la concentración pequeñas, se puede simplificar el análisis considerando que la densidad no se ve afectada. Esta simplificación implica omitir el proceso de realimentar y ajustar la densidad en función de los efectos de difusión, lo cual puede resultar laborioso y necesitaría un análisis más profundo. En este trabajo, no se considera que la densidad es modificada por la difusión, ya que es un trabajo complejo que se tiene pensado implementar en futuros trabajos en el proyecto.

En esta sección se detallan las características de las simulaciones numéricas. Se analizan los criterios de convergencia, los cuales son fundamentales para obtener resultados confiables. Además, se presentan las diferentes configuraciones de mezclas utilizadas para los casos de estudio, así como también las propiedades de las mismas. Por último, se explica la forma en que se extraen los resultados de las simulaciones.

2.2.1. Consideraciones de la fluidodinámica

En este trabajo, se simulan las mezclas de $He - UF_6$ y $He - UF_6 - SF_6$, ya que son gases con los que se trabaja en laboratorio, se realizan experimentos y se puede plantear realizar futuras mediciones en distintas geometrías. En la parte fluidodinámica, se utilizan fluidos con propiedades medias de los gases que lo componen para simularlo. Se las considera como gas ideal [6], y las propiedades que se cargan son: el calor específico a presión constante C_p , la conductividad térmica k , la viscosidad cinemática μ y la masa molar de la mezcla M . Estas propiedades se calculan de acuerdo a las proporciones de las especies de la mezcla, mediante ecuaciones que ponderan las propiedades individuales de cada especie [7]. Todas las simulaciones se realizan en régimen estacionario ya que se busca trabajar con toberas continuas, al ser el objetivo a futuro poder industrializar el enriquecimiento.

En el software *ANSYS Fluent* se utiliza el *solver* basado en la densidad, el cual acopla las ecuaciones de continuidad y las ecuaciones de Navier-Stokes, con la ecuación de la energía [7]. En cuanto a condiciones de borde, se configuran las paredes hechas de aluminio a 300K y las presiones de entrada y salida permanecen constantes para todas las simulaciones realizadas con valores de $P_e = 100\text{mbar}$ y $P_s = 20\text{mbar}$, respectivamente. Estos valores de presión se eligen para que el flujo sea subsónico en la entrada

y supersónico en la salida [8], además de ser valores utilizados y fácilmente alcanzables en el laboratorio.

2.2.2. Criterios de convergencia

Cuando se realizan simulaciones numéricas, es importante establecer criterios de convergencia ya que nos sabrán indicar cuándo se alcanza un resultado aceptable.

En este trabajo, el principal criterio de convergencia es el valor de los residuos. Los residuos para cada iteración n se definen para el caso del *solver* basado en densidad como el valor cuadrático medio de las tasas de cambio de cada variable, como se muestra en la Ecuación 2.1 [7]. Siendo R_n el valor del residuo en la iteración n y $\frac{\partial W}{\partial n}$ la variación entre iteraciones de la variable W .

$$R_n(W) = \sqrt{\sum \left(\frac{\partial W}{\partial n} \right)^2} \quad (2.1)$$

El software calcula los residuos de las primeras 5 iteraciones de esta manera, y toma el mayor valor $R_5(W)$. Luego, para el resto de las N iteraciones los escala con ese número. La forma final de los residuos expresados se muestra en la Ecuación 2.2.

$$R(W) = \frac{R_n(W)}{R_5(W)} \quad (2.2)$$

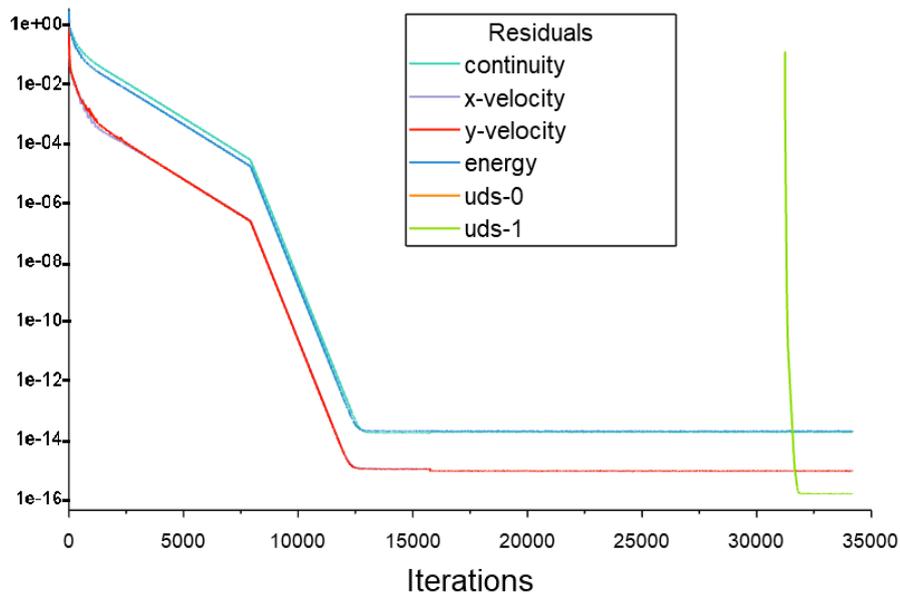


Figura 2.9: Residuos de las ecuaciones de continuidad, energía, velocidades en x e y y concentraciones.

El criterio tomado es llevar a los residuos de las ecuaciones de continuidad, energía,

velocidades en x e y al orden de 10^{-14} , aproximadamente. Además, se comprueba la convergencia de los cierres de caudales másicos y que los mapas de distintas variables no varían al pasar las iteraciones. Luego de alcanzar este estado, se implementa la función de difusión programada externamente, acoplándola como un escalar a la fluidodinámica ya simulada, para llegar a este orden con los residuos de las concentraciones. Bajo esta definición de los residuos, significa que las variables pertinentes permanecerán casi constantes iteración tras iteración [7].

En la Figura 2.9, se muestra un ejemplo de convergencia para el caso de una mezcla ternaria de $He - UF_6$ sin enriquecer (natural) con la difusión acoplada y las concentraciones calculadas convergidas. Se puede observar el momento en que se acopla la difusión, ya cuando los residuos fluidodinámicos (*continuity*, *x-velocity*, *y-velocity* y *energy*) alcanzan un valor residual bajo y se observa que los residuos de las concentraciones (*uds-0* y *uds-1*) se reducen hasta alcanzar un valor residual ínfimo.

La convergencia se complementa con un análisis de cierre de caudales másico para la fluidodinámica y molar para la difusión.

En la Ecuación 2.3 se observa el cálculo de caudal másico para la especie i .

$$\dot{m}_i = \int_A \rho_i \vec{V} \cdot d\vec{A} \quad (2.3)$$

Siendo A el área, ρ_i la densidad de la especie i -ésima y \vec{V} el vector velocidad del fluido.

En la Ecuación 2.4 se observa el cálculo de caudal molar en un área y para la especie i -ésima.

$$q_i = \int_A c_i \frac{\rho}{M} \vec{V} \cdot d\vec{A} \quad (2.4)$$

Siendo c_i la concentración de la especie i -ésima, ρ la densidad del fluido y M la masa molar de la mezcla.

Se aclara que estrictamente se debe calcular tanto el caudal másico como molar con la velocidad de la especie i -ésima, pero en este caso se usa la velocidad de la mezcla. Esta aproximación se utiliza porque ya \vec{V} es proporcionada por el programa, mientras que si se utilizara \vec{V}_i se debería calcular con una función *OnDemand*, definida por el usuario. La comparación entre estas velocidades ya fue objeto de estudio en otros trabajos del proyecto LASIE, y se concluyó que la diferencia entre ellas en estos casos de estudio es despreciable [9].

Particularmente, se analizan cortes paralelos al eje x , por lo que se puede simplificar la Ecuación 2.3 a la Ecuación 2.5 y la Ecuación 2.4 a la Ecuación 2.6.

$$\dot{m}_i = \int_A \rho_i V_y dx \quad (2.5)$$

$$q_i = \int_A c_i \frac{\rho}{M} V_y dx \quad (2.6)$$

V_y se refiere a la velocidad de la mezcla en la dirección y .

Mediante la implementación de una función definida por el usuario, el propio software permite calcular estos caudales. Se corrobora el buen funcionamiento de ellos calculando mediante el método de trapecios con una herramienta de planilla de cálculo y comparándolos.

2.3. Casos de estudio

Aquí se presentan las diversas configuraciones utilizadas para los diferentes casos de estudio. En todas las simulaciones se emplea un 95 % de He. En un principio se utiliza un 5 % inicial de UF_6 de forma natural y enriquecido, con el propósito de analizar la difusión de las especies $^{238}UF_6$ y $^{235}UF_6$. Posteriormente, se reemplaza ese 5 % por una mezcla de $UF_6 - SF_6$ con diferentes concentraciones. En esta segunda mezcla, los componentes se analizan como una única entidad y no se examina la concentración individual de cada isótopo de UF_6 ni de SF_6 .

En la Tabla 2.1 se muestran los parámetros de los diferentes componentes, los cuales se emplean para calcular cada configuración de mezcla.

Parámetro	He	UF_6	SF_6
$C_p [\frac{J}{kgK}]$	5193	405	661
$k [\frac{W}{mK}]$	0.152	0.0068	0.0136
$\mu [\frac{kg}{ms}]$	$1.99 \cdot 10^{-5}$	$1.76 \cdot 10^{-5}$	$1.52 \cdot 10^{-5}$
$m [\frac{kg}{kmol}]$	4.003	351.97	146.06

Tabla 2.1: Parámetros relevantes de los gases a utilizar [10].

Se recuerda nuevamente que en todas las mezclas se utiliza un 95 % de He, por lo que el porcentaje de UF_6 y SF_6 se refieren dentro del 5 % restante.

Como se nombra anteriormente, primero se analizan mezclas de He – UF_6 cambiando las proporciones isotópicas del gas de proceso. En la Tabla 2.2 se muestran las diferentes mezclas utilizadas. Cabe aclarar que son mezclas virtuales utilizadas para el ajuste de los modelos.

# Mezcla	$^{238}UF_6$ %	$^{235}UF_6$ %
1 (natural)	99.289	0.711
2	95	5
3	90	10
4	80	20
5	1	99

Tabla 2.2: Mezclas utilizadas para $He - UF_6$. Se aclara que los porcentajes de las especies de UF_6 son para el 5% de la mezcla.

Luego, en la Tabla 2.3 se muestran las diferentes mezclas utilizadas para el caso de $He - UF_6 - SF_6$, con sus porcentajes.

# Mezcla	UF_6 %	SF_6 %
6	99.9	0.1
7	99.5	0.5
8	99	1
9	90	10
10	85	15
11	80	20

Tabla 2.3: Mezclas utilizadas para $He - UF_6 - SF_6$. Se aclara que los porcentajes de las especies de UF_6 y SF_6 son para el 5% de la mezcla.

Por último, en la Tabla 2.4 se muestran las propiedades de las mezclas para todas las configuraciones de $He - UF_6$ y $He - UF_6 - SF_6$, las cuales se cargan a *Fluent* para simular la parte fluidodinámica. Cabe destacar que en la tabla se denota solo un valor para cada una de las propiedades para la mezcla $He - UF_6$, esto se debe a que las propiedades de las especies del UF_6 son muy similares, por lo que se considera que las propiedades de la mezcla son las mismas, independientemente de la composición. Esto conlleva a sólo calcular una parte fluidodinámica para todos los casos de esta mezcla. En el caso del SF_6 , las propiedades son notablemente diferentes, por lo que se debe tener en cuenta que las propiedades de la mezcla varían de acuerdo a la composición. En este caso, se deben calcular 6 corridas fluidodinámicas, una para cada mezcla.

Parámetro	Mezcla 1 a 5	Mezcla 6	Mezcla 7	Mezcla 8	Mezcla 9	Mezcla 10	Mezcla 11
$C_p [\frac{J}{kgK}]$	1255	1255	1257	1260	1307	1335	1365
$k [\frac{W}{mK}]$	0.1169	0.1169	0.1169	0.1170	0.1176	0.1180	0.1184
$\mu [\frac{kg}{ms}]$	$2.284 \cdot 10^{-5}$	$2.284 \cdot 10^{-5}$	$2.284 \cdot 10^{-5}$	$2.283 \cdot 10^{-5}$	$2.272 \cdot 10^{-5}$	$2.266 \cdot 10^{-5}$	$2.259 \cdot 10^{-5}$
$m [\frac{kg}{kmol}]$	21.40	21.39	21.35	21.30	20.37	19.85	19.34

Tabla 2.4: Parámetros relevantes de los gases a utilizar [7]. Las expresiones para calcular los parámetros pueden encontrarse en el Apéndice A [7].

2.3.1. Extracción de resultados

Una vez que se alcanza la convergencia en la parte fluidodinámica y en la difusión, se procede a extraer los resultados de interés. Para ello, se utilizan las herramientas que brinda el software *ANSYS Fluent* para realizar cortes en la geometría.

Cuando se desea comparar los resultados entre diferentes mezclas, es fundamental emplear el mismo corte de extracción de resultados en todas las simulaciones. La razón de esto es que al variar los términos de gradiente de presión y concentración a lo largo de la tobera, afectan de manera diferente a distintos lugares de la misma. Por lo tanto, sería incorrecto realizar comparaciones si no se mantiene el corte de extracción de resultados.

En este trabajo se realiza un corte paralelo al eje x, en el cual se extraen los valores de las variables de interés. En la Figura 2.10 se muestra el corte realizado en la tobera cerrada. Se puede observar que el corte se realiza luego en la curva, en la parte recta de la tobera.

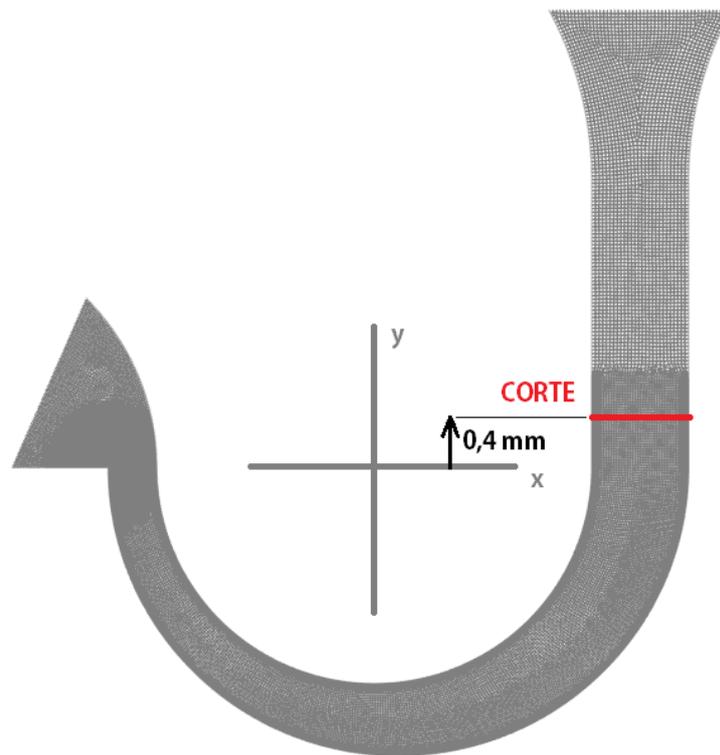


Figura 2.10: Ubicación del corte para la extracción de datos en la tobera cerrada. La coordenada y del corte es de $y_{corte} = 0,4mm$.

Hay varias razones por las cuales podemos considerar que esa zona es la más adecuada para extraer datos. En primer lugar, se encuentra al final de la curva donde ocurre la separación isotópica mediante el gradiente de presión, pero no demasiado lejos de la curva para evitar que la ley de Fick tenga una influencia significativa en la homogeneización del perfil de concentración. Además, no es conveniente que esté cerca

del extremo de la tobera, ya que podría verse afectado por la recirculación del flujo que se produce allí. Por último, la zona de corte se encuentra en una región con una malla fina, lo que garantiza una mayor precisión en los resultados.

En un momento, se considera imponer una cuchilla ficticia en la mitad del corte, para poder analizar el enriquecimiento de la mezcla en la zona derecha. Se analiza el enriquecimiento de la mezcla implementando el cociente de la Ecuación 2.7.

$$C_{der} = \frac{q_i^{der}}{q^{der}} \quad (2.7)$$

Siendo q_i^{der} el caudal molar de la especie de interés i -ésima en el corte de la derecha y q^{der} el caudal molar del gas de proceso en el mismo corte.

Por otro lado, se le calcula el error de manera simplificada al enriquecimiento de la mezcla C_{der} , mediante la Ecuación 2.8. El error porcentual en C_i^{der} es la suma de los errores porcentuales estimados de los caudales molares correspondientes, por ser un cociente.

$$\epsilon_{\%}(C_i^{der}) \simeq \epsilon_{\%}(q_i) + \epsilon_{\%}(q) \simeq \frac{\Delta q_i}{q_i^{inlet}} + \frac{\Delta q}{q^{inlet}} \quad (2.8)$$

Siendo Δq_i y Δq los errores absolutos en el cierre de caudales molares de las especies i -ésima y del gas de proceso, respectivamente, y q_i^{inlet} y q^{inlet} los caudales molares de entrada de las especies i -ésima y gas de proceso, respectivamente.

Los datos de salida son exportados en archivos tipo *ASCII*, y procesados mediante una herramienta de graficación para insertarlos en este trabajo.

Capítulo 3

Desarrollo de modelos de difusión de especies

“The only thing we have to fear is fear itself.”

— Franklin D. Roosevelt, 1933

En este capítulo se desarrollan los modelos de difusión de especies empleados en este trabajo. Los modelos binario y ternario ya han sido caso de estudio en el proyecto LASIE, y fueron desarrollados en trabajos anteriores [3] [11], por lo que no se tiene mayor detalle en su demostración. El modelo ternario diluido es desarrollado en este proyecto integrador, por lo que se demuestra en detalle.

El desarrollo de los modelos se basa en la expresión de difusión general para una mezcla de gases de una cantidad de n especies en régimen estacionario [1]. Se muestra en la Ecuación 3.1.

$$\sum_{j=1}^n p_i p_j \frac{\vec{V}_i - \vec{V}_j}{D_{ij}} = p \left[-\vec{\nabla} p_i - \frac{\rho_i}{\rho} \sum_{j=1}^n (-\vec{\nabla} p_j) \right] \quad (3.1)$$

Siendo p_i la presión parcial de la especie i -ésima, p_j la presión parcial de la especie j -ésima, p la presión de la mezcla, ρ_i la densidad de la especie i -ésima, ρ la densidad de la mezcla, \vec{V}_i la velocidad absoluta de la especie i -ésima, \vec{V}_j la velocidad absoluta de la especie j -ésima y D_{ij} el coeficiente de difusión entre las especies i y j .

Se desprecian los términos de fuerza boyante y termofóricos para el análisis de los modelos en este trabajo. Se corrobora en trabajos previos que no existe un aporte significativo de estos términos en la difusión de especies para este tipo de toberas curvas [5].

Es necesario aclarar que el valor de D_{ij} no es constante. Como se producen variaciones de presión y temperatura relevantes en la tobera, el coeficiente de difusión varía en el dominio de simulación de la misma. Se utiliza un modelo propuesto por

Chapman [1], el cual ya fue utilizado en trabajos previos en el proyecto LASIE [5] [12]. Este modelo se basa en la Ecuación 3.2.

$$D_{ij} = D_{0ij} \left(\frac{T}{T_0} \right)^b \frac{p_0}{p} \quad (3.2)$$

Siendo D_{0ij} el coeficiente de difusión a una temperatura de referencia T_0 y presión de referencia p_0 , T la temperatura, p la presión y b un coeficiente de ajuste asociado a la temperatura.

La resolución de los modelos planteados se realiza mediante la implementación de una función externa en el software *Fluent*. Para dicha implementación se debe obtener una expresión como la de la Ecuación 3.3, donde las funciones $\vec{\Psi}$ y Γ son programadas en lenguaje *C*.

$$\nabla \cdot (\vec{\Psi}\phi - \Gamma\vec{\nabla}\phi) = 0 \quad (3.3)$$

El software es capaz de resolver ecuaciones de transporte sobre un escalar ϕ [7]. Es necesario, en el desarrollo de los modelos, llegar a una expresión de este tipo para el escalar de interés (el cual será la concentración de alguna especie), por lo que se busca encontrar algebraicamente a $\vec{\Psi}$ y Γ a partir de las ecuaciones de difusión de especies.

3.1. Modelo binario

Basada en la Ecuación general 3.1, la Ecuación 3.4 describe la difusión de especies en una mezcla binaria. Se llega a ella mediante álgebra sencilla, con la aplicación de la ley de gas ideal y la ley de Dalton. Se requiere que el escalar incógnita (ϕ) sea C_1 , la concentración de la especie 1.

$$\vec{V}_1 - \vec{V}_2 = \vec{v}_1 - \vec{v}_2 = -\frac{D_{12}n^2}{n_1n_2} \left[\vec{\nabla}C_1 + \frac{n_1n_2(m_2 - m_1)}{n\rho} \frac{\vec{\nabla}p}{p} \right] \quad (3.4)$$

Siendo \vec{v}_i la velocidad relativa a la mezcla de la especie i -ésima, n_i la densidad molar de la especie i -ésima, m_i la masa molar de la especie i -ésima y n la densidad molar total de la mezcla.

Mediante la conservación de masa utilizando corrientes difusivas másicas, la ecuación de continuidad en régimen estacionario, sumado a que nuestro escalar de interés es C_1 y se debe llegar a una Ecuación 3.3, se obtiene la Ecuación 3.5.

$$\nabla \cdot \left\{ \frac{m_2nD_{12}}{C_1m_1 + C_2m_2} \left[\vec{\nabla}C_1 + \frac{C_1C_2(m_2 - m_1)}{C_1m_1 + C_2m_2} \frac{\vec{\nabla}p}{p} \right] - C_1 \frac{\rho}{m} \vec{V} \right\} = 0 \quad (3.5)$$

Se tiene en cuenta que la suma de las fracciones molares es igual a 1, por lo que se

puede expresar la Ecuación 3.5 discriminado en $\vec{\Psi}$ y Γ , como las Ecuaciones 3.6.

$$\vec{\Psi} = \frac{1}{C_1(m_1 - m_2) + m_2} \left\{ m_2 n D_{12} \left[\frac{(1 - C_1)(m_1 - m_2) \vec{\nabla} p}{C_1(m_1 - m_2) + m_2} \frac{1}{p} \right] \right\} \quad (3.6)$$

$$\Gamma = \frac{m_2 n D_{12}}{C_1(m_1 - m_2) + m_2}$$

3.2. Modelo ternario

Para el desarrollo del modelo ternario se tienen tres incógnitas de concentraciones por tratarse de una mezcla de 3 especies. Se considera que las especies 1 y 2 son las especies de interés, por lo que tendremos dos escalares ϕ , los cuales serán C_1 y C_2 . Al final del desarrollo, se le debe proporcionar al programa dos ecuaciones de la forma de la Ecuación 3.3.

Se parte de la Ecuación general 3.1 con $n = 3$, se aplican la ley de Dalton para presiones parciales y la ley conservación de flujo másico, para despejar una de las velocidades de las especies. Con esto se obtiene un sistema de dos ecuaciones, en función de dos velocidades, como se muestra en las Ecuaciones 3.7.

$$\begin{cases} \underbrace{\left(\frac{C_1 C_2}{D_{12}} + \frac{C_1 C_3}{D_{13}} + \frac{C_1^2 m_1}{D_{13} m_3} \right)}_{=a} \vec{V}_1 + \underbrace{\left(-\frac{C_1 C_2}{D_{12}} + \frac{C_1 C_2 m_2}{D_{13} m_3} \right)}_{=b} \vec{V}_2 = \underbrace{-\vec{\nabla} C_1 + C_1 \left(\frac{m_1}{m} - 1 \right) \frac{\vec{\nabla} p}{p} + \frac{m C_1}{D_{13} m_3} \vec{V}}_{=\vec{e}} \\ \underbrace{\left(-\frac{C_1 C_2}{D_{12}} + \frac{C_1 C_2 m_1}{D_{23} m_3} \right)}_{=c} \vec{V}_1 + \underbrace{\left(\frac{C_1 C_2}{D_{12}} + \frac{C_2 C_3}{D_{23}} + \frac{C_2^2 m_2}{D_{23} m_3} \right)}_{=d} \vec{V}_2 = \underbrace{-\vec{\nabla} C_2 + C_2 \left(\frac{m_2}{m} - 1 \right) \frac{\vec{\nabla} p}{p} + \frac{m C_2}{D_{23} m_3} \vec{V}}_{=\vec{f}} \end{cases} \quad (3.7)$$

Utilizando la regla de Cramer se despejan las Ecuaciones 3.8 para hallar las velocidades \vec{V}_1 y \vec{V}_2 .

$$\vec{V}_1 = \frac{\begin{vmatrix} \vec{e} & b \\ \vec{f} & d \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix}} = \frac{\vec{e} \cdot d - \vec{f} \cdot b}{a \cdot d - c \cdot b}$$

$$\vec{V}_2 = \frac{\begin{vmatrix} a & \vec{e} \\ c & \vec{f} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix}} = \frac{\vec{f} \cdot a - \vec{e} \cdot c}{a \cdot d - c \cdot b} \quad (3.8)$$

Para calcular las concentraciones se plantea un proceso iterativo donde, dado un campo inicial, se calculan las velocidades de cada especie.

La resolución de las ecuaciones acopladas de velocidad, sumado a la fuerte característica no lineal de concentraciones que posee el sistema, hace al modelo 'caro' computacionalmente e inestable para alcanzar una convergencia adecuada. En algunos casos de geometrías complejas, la convergencia combinada de un cálculo CFD acoplado con difusión ternaria puede no ser sencilla. Esto puede ser un gran problema para calcular la difusión de especies, ya que se requiere una convergencia adecuada para obtener resultados confiables a un tiempo razonable.

Para alcanzar las ecuaciones de la forma en que deben ser proporcionadas al software se aplica conservación de masa y suma de fracciones molares igual a 1, para finalmente calcular los campos de concentración de C_1 y C_2 mediante el proceso iterativo [3].

3.3. Modelo ternario diluido

Se mencionaron los posibles problemas que pueden surgir del modelo ternario, consecuencias de ecuaciones acopladas de velocidad y concentración altamente no lineales. Si se logra que el modelo sea susceptible a ser simplificado por una alta dilución de uno de sus componentes, la convergencia de cálculo se podría acelerar y estabilizar.

Se desarrolla un modelo ternario diluido con el propósito de reducir el costo computacional del modelo ternario y las potenciales inestabilidades que pueden surgir en el cálculo del mismo. Para la obtención de dicho modelo, se aplica una simplificación al modelo de difusión ternaria para el caso de un componente dominante y uno altamente diluido en los otros dos. En el desarrollo de este modelo, se considera que la especie 3 es la altamente diluida $C_1 > C_2 > C_3$.

Se comienza con la ecuación general de difusión de especies, que se representa como la Ecuación 3.1, considerando un sistema con tres especies ($n = 3$). Luego, aplicamos la ley de Dalton para presiones parciales y la suma de las fracciones molares de las especies igual a 1. Con un pequeño desarrollo algebraico se tiene la Ecuación 3.9.

$$\sum_{j=1}^3 C_i C_j \frac{\vec{V}_i - \vec{V}_j}{D_{ij}} = -\vec{\nabla} C_i + C_i \frac{\vec{\nabla} p}{p} \left(\frac{m_i}{m} - 1 \right) \quad (3.9)$$

Para la especie 3 ($i = 3$), en nuestro desarrollo la más diluida, se tiene la Ecuación 3.10.

$$C_3 C_1 \frac{(\vec{V}_3 - \vec{V}_1)}{D_{31}} + C_3 C_2 \frac{(\vec{V}_3 - \vec{V}_2)}{D_{32}} = -\vec{\nabla} C_3 + C_3 \frac{\vec{\nabla} p}{p} \left(\frac{m_3}{m} - 1 \right) \quad (3.10)$$

Se plantea la conservación de momento lineal en la Ecuación 3.11.

$$\rho \vec{V} = \rho_1 \vec{V}_1 + \rho_2 \vec{V}_2 + \rho_3 \vec{V}_3 \quad (3.11)$$

Se prosigue operando con velocidades relativas a la mezcla, aplicando $\vec{v}_i = \vec{V}_i - \vec{V}$ y se obtiene la relación entre velocidades relativas dictada por la Ecuación 3.12.

$$\vec{v}_2 = -\frac{\rho_1}{\rho_2}\vec{v}_1 - \frac{\rho_3}{\rho_2}\vec{v}_3 \quad (3.12)$$

Se aplica la Ecuación 3.12 a la Ecuación 3.10 para reemplazar la velocidad relativa de la especie 2, y se obtiene la Ecuación 3.13.

$$C_3 \left[\frac{C_1}{D_{31}} + \frac{C_2}{D_{32}} \left(1 + \frac{\rho_3}{\rho_2} \right) \right] \vec{v}_3 - \left(\frac{C_3 C_1}{D_{31}} - \frac{C_3 C_2 \rho_1}{D_{32} \rho_2} \right) \vec{v}_1 = -\vec{\nabla} C_3 + C_3 \frac{\vec{\nabla} p}{p} \left(\frac{m_3}{m} - 1 \right) \quad (3.13)$$

A continuación se busca despejar la velocidad relativa de la especie 3 para poder plantear conservación de masa estacionaria. Para ello, primero se debe encontrar una expresión de la velocidad relativa de la especie 1.

Aquí se plantea la simplificación del modelo ternario diluido. Se aproxima que las corrientes difusivas másicas de las especies 1 y 2 se compensan entre sí. Es decir, que no son afectadas por la especie 3 debido a su alta dilución en la mezcla. Esto se expresa en la Ecuación 3.14.

$$\vec{J}_1^D + \vec{J}_2^D \simeq 0 \quad (3.14)$$

Siendo \vec{J}_i^D la corriente difusiva másica de la especie i-ésima, la cual se define como:

$$\vec{J}_i^D = \vec{v}_i \cdot \rho_i$$

Se desarrolla la Ecuación 3.14 y se obtiene:

$$\vec{v}_1 - \vec{v}_2 = \frac{\rho_1 + \rho_2}{\rho_2} \vec{v}_1 \quad (3.15)$$

Luego, se plantea la ecuación general de difusión de especies para una mezcla binaria 3.4 entre las especies 1 y 2. Operando algebraicamente y reemplazando en ella a la Ecuación 3.15, se obtiene una expresión para \vec{v}_1 en la Ecuación 3.16.

$$\vec{v}_1 = \frac{D_{12}}{C_1 C_2 (\rho_1 + \rho_2)} \left[-\vec{\nabla} C_1 + C_1 C_2 \frac{\vec{\nabla} p}{p} \frac{(m_1 - m_2)}{m} \right] \quad (3.16)$$

Con esta ecuación de la velocidad relativa de la especie 1, se reescribe la ecuación de difusión de especies para el componente diluido 3.17.

$$C_3 \left[\frac{C_1}{D_{31}} + \frac{C_2}{D_{32}} \left(1 + \frac{\rho_3}{\rho_2} \right) \right] \vec{v}_3 = \left(\frac{C_3 C_1}{D_{31}} - \frac{C_3 C_2 \rho_1}{D_{32} \rho_2} \right) \frac{D_{12}}{C_1 C_2} \frac{1}{\frac{\rho_1}{\rho_2} + 1} \left[-\vec{\nabla} C_1 + C_1 C_2 \frac{\vec{\nabla} p (m_1 - m_2)}{p m} \right] - \vec{\nabla} C_3 + C_3 \frac{\vec{\nabla} p}{p} \left(\frac{m_3}{m} - 1 \right) \quad (3.17)$$

Se prosigue planteando conservación de masa para la especie 3 en regimen estacionario:

$$\stackrel{=0, \text{estacionario}}{\overbrace{\frac{\partial \rho_3}{\partial t}}} + \nabla \cdot (\rho_3 \cdot \vec{v}_3) = 0 \quad (3.18)$$

Por último, con las Ecuaciones 3.17 y 3.18 se llega a la Ecuación 3.19.

$$\nabla \cdot \left[\left\{ \frac{m_3}{m} \rho D_{3-12} \left\{ \left(\frac{1}{D_{31}} - \frac{1}{D_{32}} \frac{m_1}{m_2} \right) \frac{D_{12}}{C_2} \frac{1}{(C_1 m_1)/(C_2 m_2) + 1} \left[-\vec{\nabla} C_1 + C_1 C_2 \frac{\vec{\nabla} p (m_1 - m_2)}{p m} \right] + \frac{\vec{\nabla} p}{p} \left(\frac{m_3}{m} - 1 \right) \right\} + \frac{m_3}{m} \rho \vec{V} \right\} C_3 - \frac{m_3}{m} \rho D_{3-12} \vec{\nabla} C_3 \right] = 0 \quad (3.19)$$

Se agrupan términos, y se llama a D_{3-12} como el coeficiente de difusión efectivo entre la especie 3 y las especies 1 y 2, el cual se define se muestra en la Ecuación 3.20.

$$D_{3-12} = \left[\frac{C_1}{D_{31}} + \frac{C_2}{D_{32}} \left(1 + \frac{\rho_3}{\rho_2} \right) \right]^{-1} \quad (3.20)$$

Este coeficiente estrictamente no existe como tal, pero se asemeja a este grupo de términos, por lo que su estudio se considera caso de interés.

De la Ecuación 3.19 se expresan $\vec{\Psi}$ y Γ .

$$\vec{\Psi} = \left\{ \frac{m_3}{m} \rho D_{3-12} \left\{ \left(\frac{1}{D_{31}} - \frac{1}{D_{32}} \frac{m_1}{m_2} \right) \frac{D_{12}}{C_2} \frac{1}{(C_1 m_1)/(C_2 m_2) + 1} \right. \right. \\ \left. \left. \times \left[-\vec{\nabla} C_1 + C_1 C_2 \frac{\vec{\nabla} p (m_1 - m_2)}{p m} \right] + \frac{\vec{\nabla} p}{p} \left(\frac{m_3}{m} - 1 \right) \right\} + \frac{m_3}{m} \rho \vec{V} \right\}$$

$$\Gamma = \frac{m_3}{m} \rho D_{3-12}$$

3.3.1. Modelo de Chapman-Enskog y parámetros utilizados

Si bien previamente se menciona que en todos los modelos se utiliza el modelo de Chapman, se usa también otro modelo para calcular el coeficiente de difusión de referencia entre UF_6 y SF_6 , debido a que no se tenía información sobre este valor en el proyecto.

La teoría de Chapman-Enskog se comporta de una manera similar al modelo de Chapman, pero con la ventaja de que no es necesario saber el valor del coeficiente de difusión entre las especies a una temperatura y presión de referencia. La ecuación del modelo es la que se muestra en la Ecuación 3.21 [13].

$$D_{ij} = \frac{18,84 \cdot 10^{-3} \left[\frac{m^2 Pa \text{Å}^2 \sqrt{\frac{g}{mol}}}{s K^{\frac{3}{2}}} \right] T^{3/2} \sqrt{1/m_i + 1/m_j}}{p(0,5(\sigma_i + \sigma_j))^2 \Omega} \quad (3.21)$$

Siendo σ_i el diámetro de colisión de la especie i -ésima y Ω una variable correctiva obtenida a partir de integrar las interacciones entre especies, que normalmente toma el valor de 1.

A continuación se presentan las Tablas 3.1 y 3.2 con los valores con los cuales se calcularon los coeficientes de difusión.

Dúo de especies	$D_0[m^2/s]$	b
$He - UF_6$	$3.393 \cdot 10^{-5}$	1.823
$^{238}UF_6 - ^{235}UF_6$	$1.596 \cdot 10^{-6}$	1.823
$He - SF_6$	$3.896 \cdot 10^{-5}$	1.5
$UF_6 - SF_6$	$2.58 \cdot 10^{-6}$	1.5

Tabla 3.1: Parámetros de los procesos difusivos simulados. Los valores de $He - UF_6$ son utilizados para ambas especies de UF_6 . Las presiones y temperatura de referencia a las cuales se refiere D_0 son $p_0 = 101325 Pa$ y $T_0 = 293 K$, respectivamente.

Especie	$\sigma[\text{Å}]$	$m[\frac{g}{mol}]$
He	2.551	4
UF_6	5.967	352
SF_6	5.967*	146

Tabla 3.2: Parámetros utilizados para el modelo de Chapman-Enskog [13]. El caracter * indica que es un valor aproximado.

El valor del diámetro de colisión del SF_6 es aproximado, ya que no se encontró información sobre el valor del mismo. Se considera que este parámetro para el SF_6 es similar al de UF_6 , ya que su disposición molecular es muy parecida.

Capítulo 4

Resultados y discusión

“Kites rise highest against the wind - not with it.”

— Winston Churchill

Es este capítulo se muestran los resultados que se obtienen de los modelos planteados en el capítulo anterior. Se presentan los resultados de los modelos binario, ternario y ternario diluido. También, se introduce una sección de características de la parte fluidodinámica para entender mejor la primera parte de las simulaciones numéricas.

4.1. Fluidodinámica

Como se explica en capítulos anteriores, la primera parte de la simulación numérica para analizar la difusión de especies en mezclas de gases es la fluidodinámica. Esta sección busca mostrar características de diferentes variables, previo a acoplar la parte difusiva, para entender mejor el comportamiento de la difusión de especies. Se extraen resultados de la simulación de una mezcla de $He - UF_6$ con el uranio en su estado natural. Los aspectos vistos en esta sección aplican a todas las mezclas desarrolladas en el trabajo.

4.1.1. Velocidad

A lo largo del desarrollo hasta el momento, se menciona que se busca un flujo en régimen supersónico, ya que allí se pueden obtener mayores gradientes de presión que serán el factor clave para la separación de especies, y además, para a futuro clusterizar a bajas temperaturas. Sin embargo, no todo el ancho de la tobera en el corte de salida está en régimen supersónico. En la Figura 4.1 se muestra un mapa del número de Mach en la tobera. Se puede observar que la velocidad en el centro de la tobera es supersónica, pero a medida que se aleja del centro, la velocidad disminuye y se vuelve subsónica.

Esto es así porque el fluido tiene viscosidad y hay fricción en las paredes, por lo que en la pared debe haber velocidad nula.

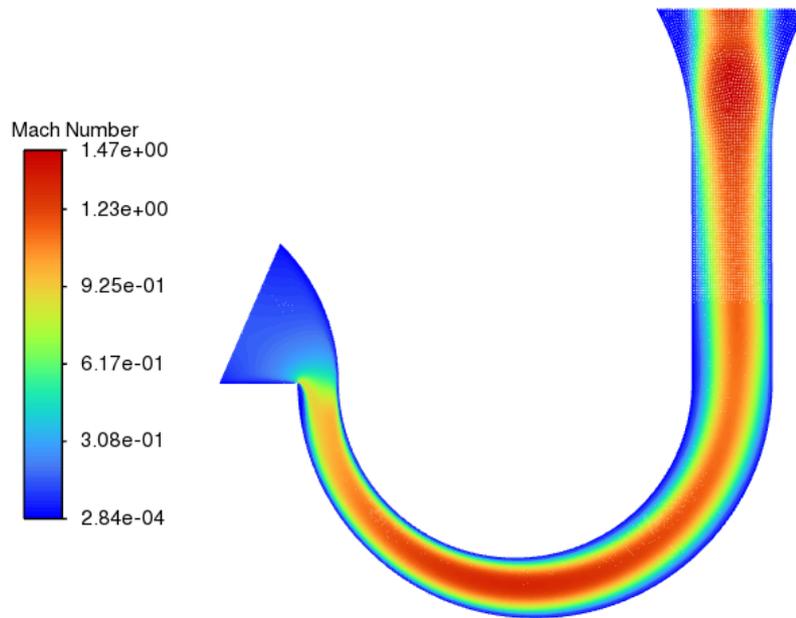


Figura 4.1: Mapa del número de Mach en la tobera.

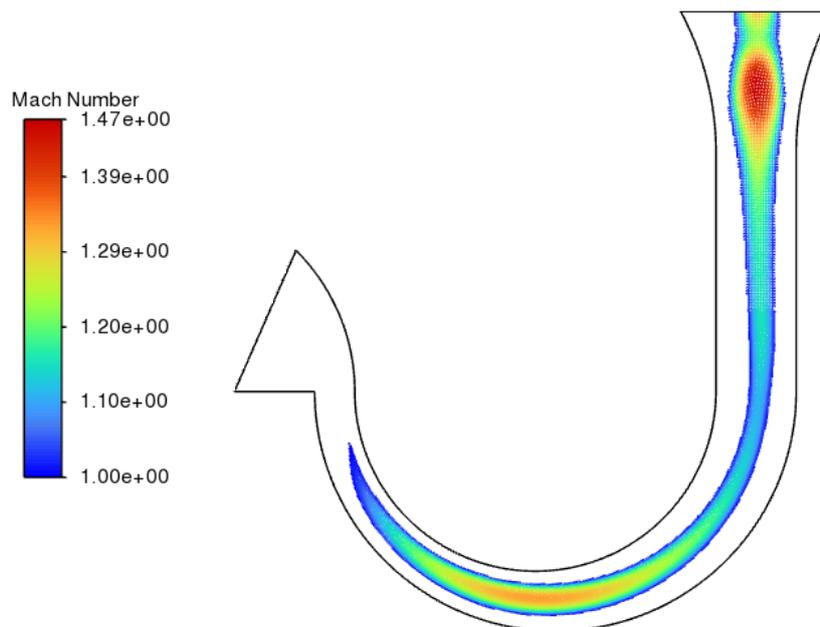


Figura 4.2: Mapa del núcleo supersónico de la tobera.

En la Figura 4.2 se observa con mayor detalle el núcleo supersónico y se puede

corroborar que no cubre todo el ancho de la tobera. Existe una considerable zona subsónica cerca de las paredes, su gran dimensión relativa a la supersónica es producto de las pequeñas dimensiones de la geometría y de la longitud que el flujo está en contacto con las paredes. Recordemos en la Figura 2.1, se muestran las medidas de la tobera y estas son del orden de milímetros.

En el capítulo 2 se menciona que una de las justificaciones por las que se elige la tobera cerrada con estas dimensiones es porque no presenta recirculación. En la Figura 4.3, se muestra la velocidad V en tres cortes de la tobera, en la potencial zona de recirculación mostrada en 2.3.

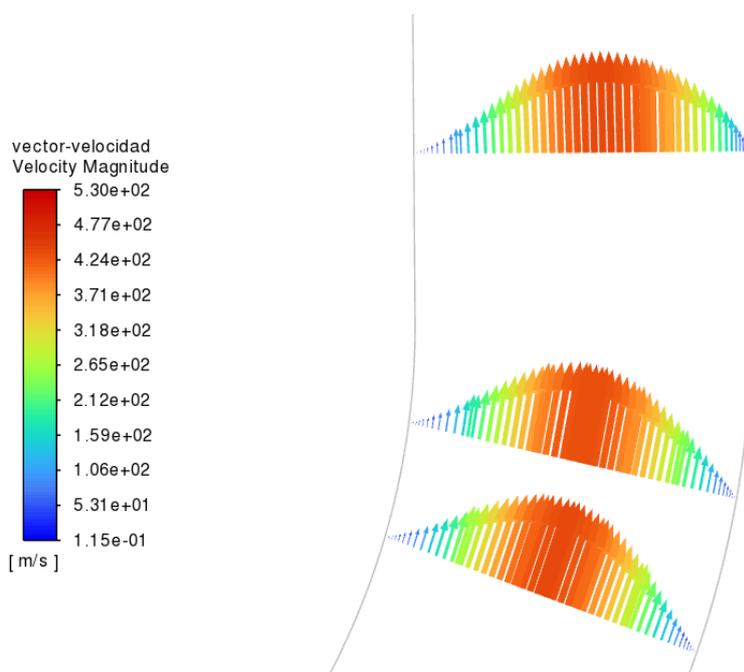


Figura 4.3: Mapa vectorial de velocidad en la zona de potencial recirculación. Se realizan diferentes cortes transversales para visualizar la velocidad en la zona.

Se observa en la figura que la recirculación no existe en la potencial zona en la que podría producirse, lo que justifica una de las razones de la elección de la geometría.

4.1.2. Presión

Por otro lado, también resulta de interés analizar la presión en la geometría. Recordemos que en el capítulo 2, se mencionaron los valores de las presiones de entrada $P_e = 100\text{mbar}$ y salida $P_s = 20\text{mbar}$.

En la Figura 4.4 se muestra un mapa de la presión en la tobera. Resulta de interés centrar el análisis en la parte curva y el final de ella (donde se extraen resultados), ya que allí es donde actúan los gradientes de presión debido a la fuerza centrífuga proporcionada por la geometría.

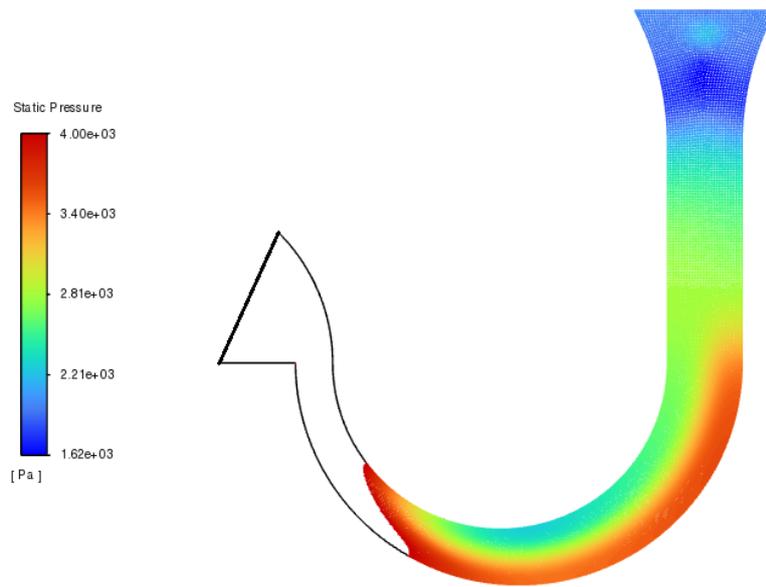


Figura 4.4: Mapa de presión en la zona de interés de la geometría.

Se puede observar en la figura que la presión aumenta a mayor radio, lo que es esperable por la dirección del gradiente de presión en la curva de la tobera. Por lo que se corrobora que, cualitativamente, el comportamiento de la presión es el esperado.

4.2. Difusión

En esta sección se presentan los resultados de los modelos de difusión binario, ternario y ternario diluida. Se comienza analizando los resultados de los dos primeros modelos con los que se trabaja en el proyecto LASIE. Se simulan casos de estudio con variación de diferentes parámetros para analizar el comportamiento de la difusión de especies. Luego, se explica la justificación del desarrollo del modelo propuesto en este trabajo, el ternario diluido, y se presentan gráficas con los resultados de las simulaciones numéricas del modelo.

Se recuerda que todas las gráficas que se presentan en esta sección son extraídas del corte de 'salida', descrita en la sección 2.3.1, del capítulo 2.

4.2.1. $He - UF_6$, con uranio natural: Análisis de modelos binario y ternario

En esta sección se presentan resultados de los modelos de difusión de especies binario y ternario. En todas las simulaciones se utiliza la mezcla $He - UF_6$, con 95 % de He y 5 % de UF_6 con uranio natural. En el modelo binario se simula la difusión entre He y UF_6 , mientras que en el modelo ternario la difusión entre He , $^{235}UF_6$ y $^{238}UF_6$.

El primer resultado está ligado a dar comienzo al análisis de difusión de especies para estos modelos. Se simula el caso para ambos modelos, y se extraen los resultados de la concentración de UF_6 como muestra la Figura 4.5.

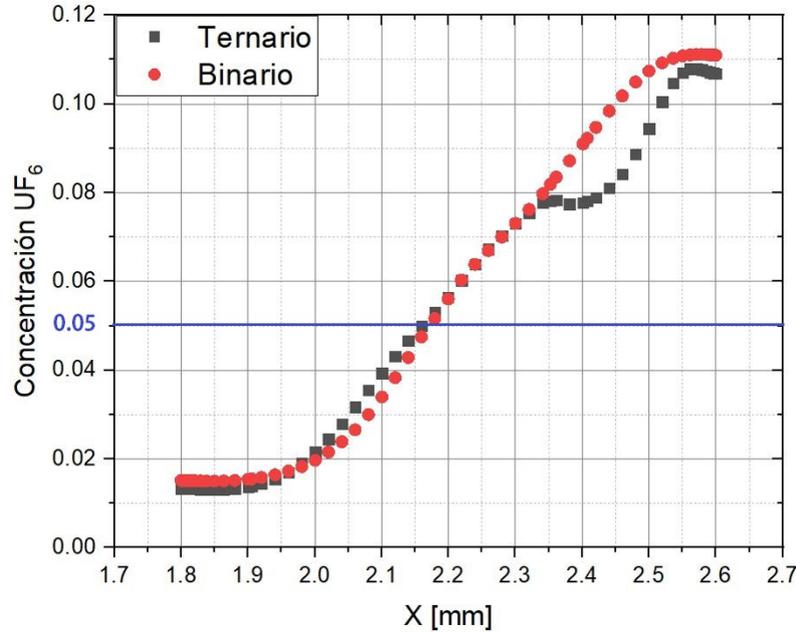


Figura 4.5: Perfil de concentración de UF_6 para los modelos binario y ternario. En azul, puede observarse la concentración inicial de UF_6 , la cual es del 5%.

Se aclara que la concentración de UF_6 en el modelo ternario se obtiene como la suma de las concentraciones de sus especies $^{235}UF_6$ y $^{238}UF_6$, ya que es como lo calcula el modelo.

Se observa que existe una gran concordancia entre los modelos, con una pequeña diferencia la cual está siendo caso de estudio. La mayor concentración del gas de proceso (UF_6), que se encuentra en el lado derecho del corte, coincide con lo que uno esperaría, ya que al tratarse del gas más pesado de la mezcla el gradiente de presión lo difunde en mayor proporción hacia ese lugar.

Ya con la verificación de que los modelos binario y ternario se comportan de manera similar para esta mezcla, además de validaciones de otros trabajos [3], se desea analizar la concentración de la especie de interés en el modelo ternario, el $^{235}UF_6$, y examinar las facilidades que nos brinda. Se muestra en la Figura 4.6, el perfil de concentración de esta especie para la misma mezcla de $He - UF_6$ en su estado natural.

A priori, se espera observar una forma funcional como la mostrada en la gráfica anterior, debido a la gran similitud que poseen ambas especies del UF_6 (solo difieren de $3 \frac{g}{mol}$). Sin embargo, esto no es representado en la figura.

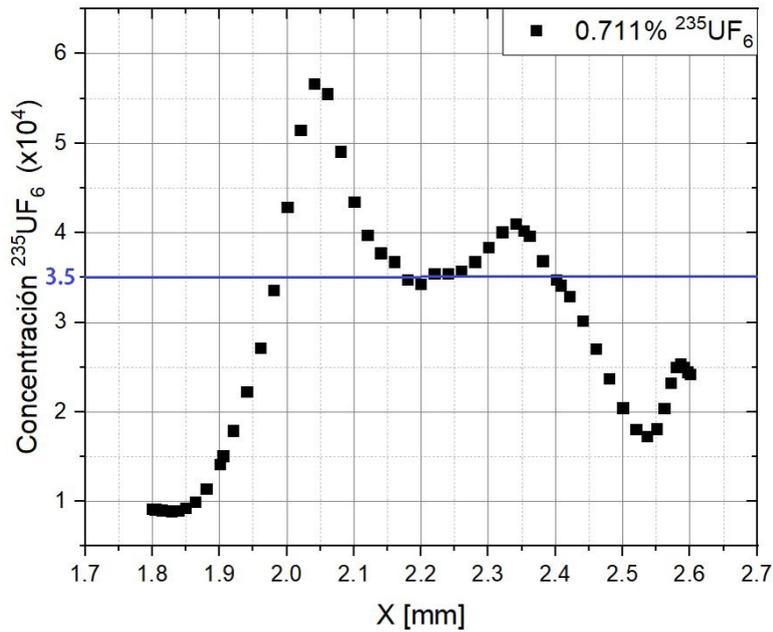


Figura 4.6: Perfil de concentración para $^{235}\text{UF}_6$ en el modelo ternario. En azul, puede observarse la concentración inicial de $^{235}\text{UF}_6$, la cual es del 0.711 % en el 5 % de UF_6 de la mezcla.

El modelo ternario ha sido caso de estudio en otros trabajos del proyecto LASIE, con otras mezclas de gases, siendo su buen funcionamiento validado y corroborado mediante la comparación con resultados experimentales de laboratorio [3] [11]. Por lo que se concluye, que no es problema del desarrollo del modelo.

Se menciona en el capítulo 3 que el modelo ternario es altamente no lineal, lo que puede generar problemas de convergencia en el cálculo o inestabilidades. En un primer momento, se piensa que este fenómeno ilustrado en la Figura 4.6 es producto de la complejidad del modelo.

Se busca variar diferentes factores del modelo, para encontrarle una dependencia a esta forma funcional de la concentración de $^{235}\text{UF}_6$ en el modelo ternario. Se llevan a cabo simulaciones en las que se realizan modificaciones en dos parámetros de forma independiente, con el fin de comprender mejor su efecto en el comportamiento observado. Esto permite un análisis más detallado de los efectos individuales de cada parámetro y su contribución relativa en el sistema en estudio. Estas variables son: el porcentaje de concentración inicial de la especie $^{235}\text{UF}_6$ y el coeficiente de difusión de referencia D_0 entre $^{235}\text{UF}_6$ y $^{238}\text{UF}_6$.

4.2.2. $\text{He} - \text{UF}_6$, con uranio natural y enriquecido al 5 %, 10 % y 20 %: Análisis de modelo ternario

En esta sección se analiza el modelo ternario con distintas mezclas de $\text{He} - \text{UF}_6$. Se realizan modificaciones en la composición de la especie más liviana del UF_6 , dejando a

los valores de coeficientes de difusión de referencia entre las especies del UF_6 en su valor original. Se la analiza desde su estado natural (0.711 %) hasta un 20 % de concentración (mezcla 1, 2, 3 y 4, Tabla 2.2).

Se muestra en la Figura 4.7 la concentración normalizada (con la concentración de entrada) de $^{235}UF_6$ para distintos valores de composición en la mezcla.

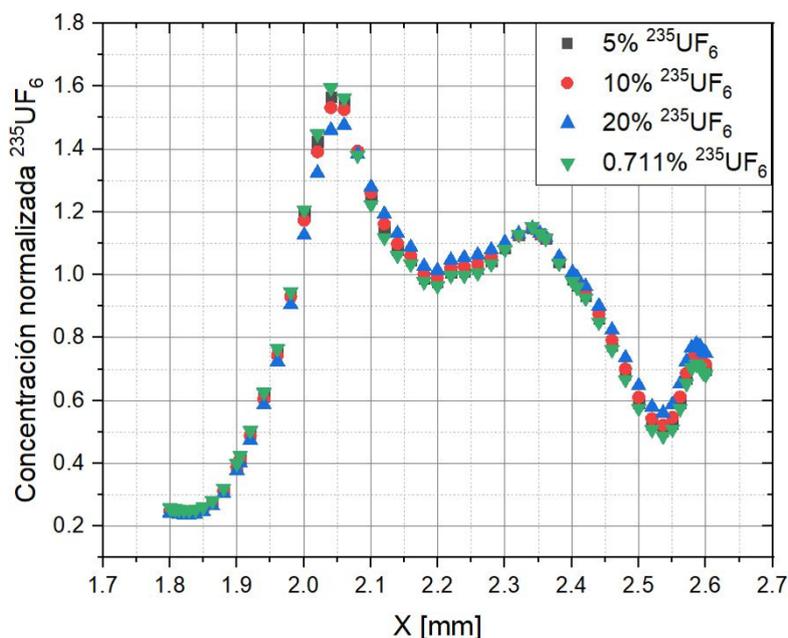


Figura 4.7: Perfiles de concentraciones normalizados de $^{235}UF_6$, con distintas concentraciones en mezcla, para el modelo ternario. Los coeficientes de difusión de referencia D_0 son los originales.

Se observa en la gráfica el fenómeno descrito anteriormente de la forma funcional del perfil de concentración de $^{235}UF_6$, a pesar de aumentar su porcentaje de composición en la mezcla. A priori, se concluye que el cambio de concentración de esta especie de la mezcla no es el factor que genera este comportamiento.

Ya visto que el perfil de concentración de la especie de menor concentración no cambia con el enriquecimiento de la mezcla, se observa que el coeficiente de difusión de referencia entre los UF_6 es un orden menor al de $He - UF_6$ (véase Tabla 3.1). Esto podría ser un factor que influya en el comportamiento de la concentración de $^{235}UF_6$.

En la Figura 4.8, se muestra la concentración normalizada de $^{235}UF_6$ para distintos valores de composición de esta especie en la mezcla, e iguales valores de coeficientes de difusión de referencia $D_0 = 3.393 \cdot 10^{-5} \frac{m^2}{s}$ entre las tres combinaciones de los tres componentes. Se realiza este análisis porque los valores exactos a todas las temperaturas alcanzadas no son conocidos.

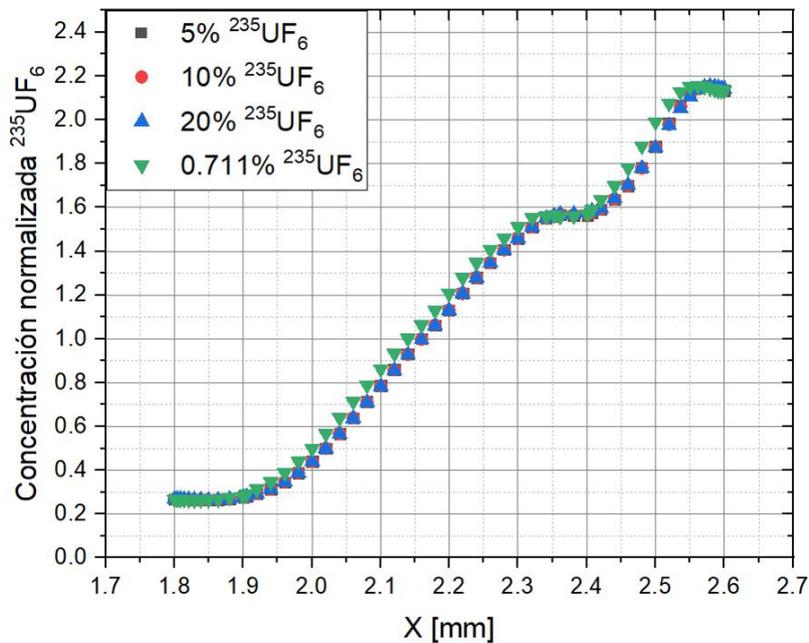


Figura 4.8: Perfiles de concentración normalizados de $^{235}\text{UF}_6$, con diferentes composiciones en mezcla, para el modelo ternario. Los coeficientes de difusión de referencia son los 3 iguales, con un valor de $D_0 = 3.393 \cdot 10^{-5} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$.

Se observan dos características importantes en la figura previamente mencionada. La primera, es que se valida que la composición de $^{235}\text{UF}_6$ en la mezcla no es el factor que genera el comportamiento de su perfil de concentración, ya que no se observa una dependencia con este factor. La segunda, es que se puede apreciar que el coeficiente de difusión de referencia D_0 entre las especies de UF_6 , es un factor que influye en el comportamiento del perfil de concentración de $^{235}\text{UF}_6$. Su cambio provoca un cambio en la forma funcional del perfil. En esta nueva gráfica, sí se observa un perfil de concentración que uno puede esperar, que es el de una forma funcional similar a la mostrada en la Figura 4.5.

4.2.3. $\text{He} - \text{UF}_6$, con uranio enriquecido al 99%: Análisis de modelo ternario

Se plantea una mezcla con un porcentaje de $^{235}\text{UF}_6$ del 99%, en el 5% de UF_6 (mezcla 5, Tabla 2.2). En las Figuras 4.9 y 4.10, se muestra el perfil de concentración de ambos isótopos de UF_6 para este caso. Se aclara que en estas gráficas, los coeficientes de difusión de referencia D_0 , son los originales (véase Tabla 3.1).

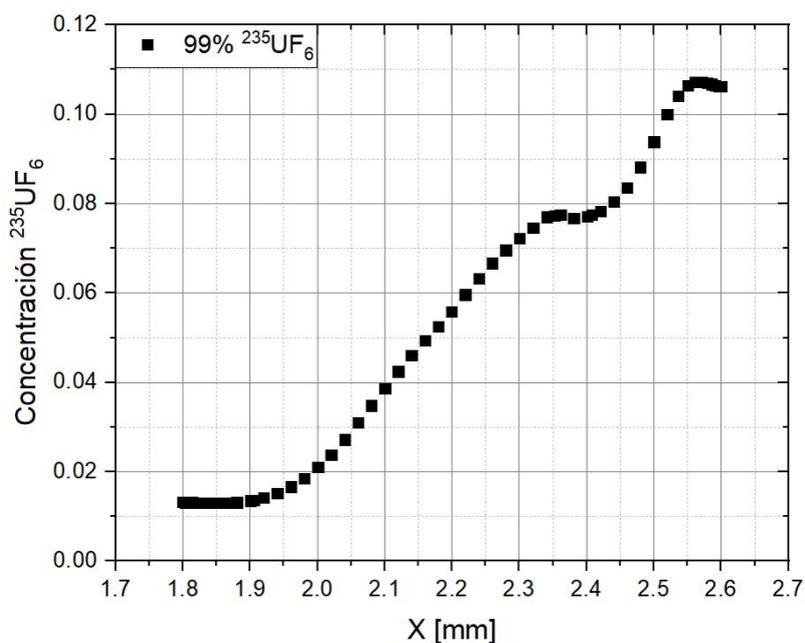


Figura 4.9: Perfil de concentración de $^{235}\text{UF}_6$, para una mezcla con 99% de composición de esta especie.

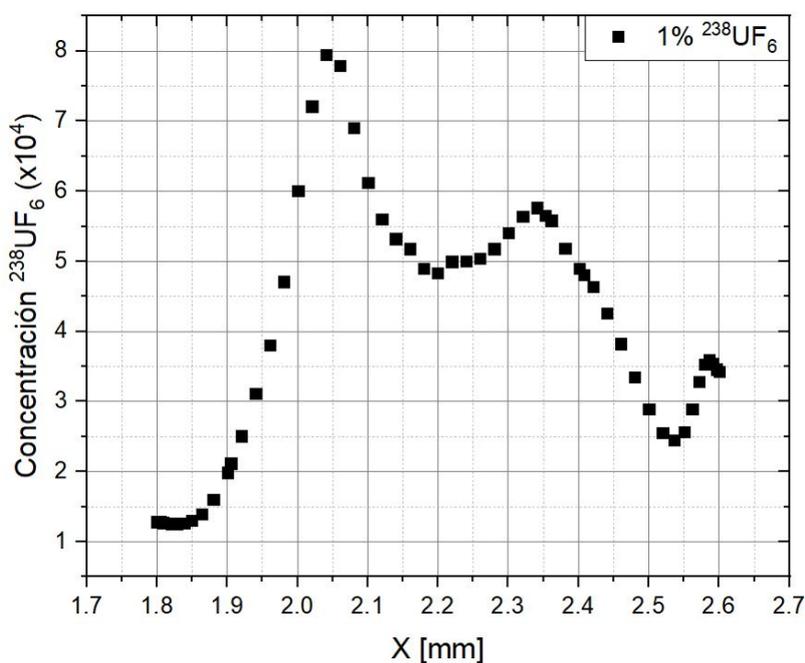


Figura 4.10: Perfil de concentración de $^{238}\text{UF}_6$, para una mezcla con 99% de composición de $^{235}\text{UF}_6$.

Se puede apreciar en las figuras que el perfil de la especie $^{235}\text{UF}_6$ es el que se puede esperar, dando un resultado consistente con el primer análisis del modelo ternario. Sin embargo, el perfil del $^{238}\text{UF}_6$ (ahora el de menor concentración) presenta una forma funcional parecida a la mostrada en la Figura 4.7 para la especie $^{235}\text{UF}_6$.

Se deduce de estos análisis que esta forma funcional se presenta en la especie con menor concentración de la mezcla. Se intuye que puede llegar a ser un problema de convergencia del código o inestabilidad que no logra calcular correctamente la especie de menor concentración. Esto puede deberse a las complejidades del modelo ternario, el cual es altamente no lineal y acoplado.

Se aborda el problema desde otra perspectiva. Se modifican los coeficientes de difusión de referencia entre $^{235}UF_6$ y $^{238}UF_6$, que se encuentran en una proporción de 99 % y 1 % (en el 5 % de UF_6 de la mezcla total), respectivamente. El objetivo es observar el efecto de estos cambios en el perfil de concentraciones de la especie con menor concentración (en este caso, el $^{238}UF_6$). En la Figura 4.11, se muestran perfiles de concentración de $^{238}UF_6$ para distintos valores de coeficientes de difusión de referencia D_0 .

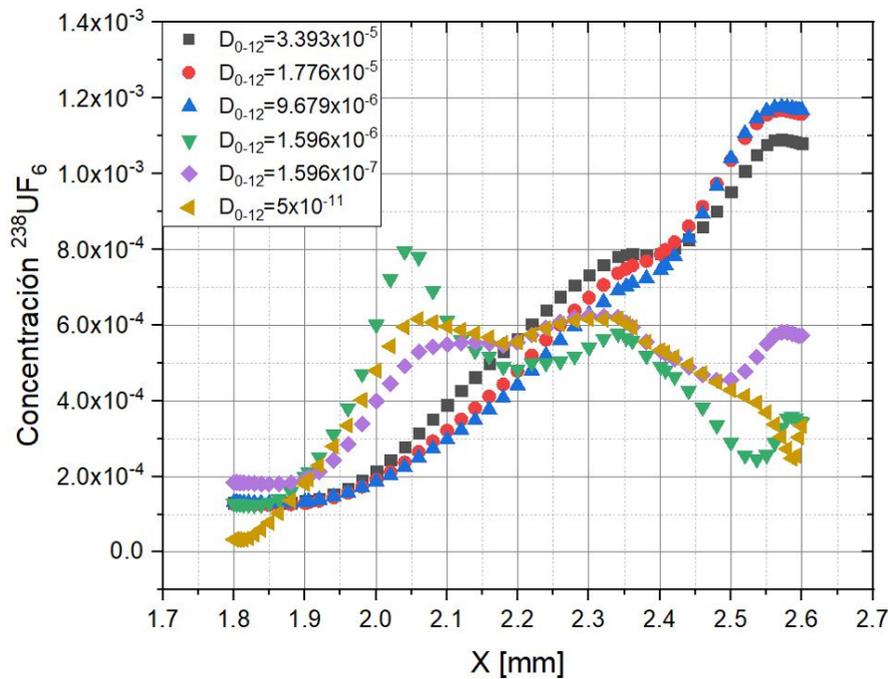


Figura 4.11: Perfiles de concentración de $^{238}UF_6$ para una mezcla con 99 % de $^{235}UF_6$ y distintos D_0 entre especies de UF_6 . En esta gráfica 1 y 2 se refieren a $^{235}UF_6$ y $^{238}UF_6$, respectivamente. Las unidades de D_0 son m^2/s .

Recordemos que el valor original $D_{0-12} = 1.596 \cdot 10^{-6} \frac{m^2}{s}$. Se cambia este parámetro para que tome valores desde órdenes de 10^{-5} hasta 10^{-11} .

Como se muestra en la figura, para valores mayores el perfil de concentración tiene una forma razonable (negro, rojo y azul). Luego, cuando D_0 llega a su valor original (verde), vemos la representación del perfil de concentraciones con esta forma previamente mencionada. Por último, para valores de D_0 menores (rosado y amarillo) se observa una forma funcional como la anterior más atenuada.

Este análisis, da pie a reafirmar que el coeficiente de difusión sí influye en el perfil de

concentración de forma determinante. La variación del perfil puede deberse a múltiples razones. Una de ellas, podría ser que la transición entre el flujo subsónico y supersónico (límites del núcleo supersónico) esté afectando a la formación del perfil. Otra podría ser el mallado, quizás se deba refinar mas la malla pero esto trae aparejado mayores tiempos de cálculo. Se deja este análisis para trabajos posteriores en el proyecto.

Por los motivos previamente mencionados, existe la motivación de querer desarrollar un nuevo modelo con un código más sencillo y simple, para evitar posibles inestabilidades y problemas de convergencia.

4.2.4. $He-UF_6$ con uranio natural: Análisis de modelo ternario diluido

Se comienza a analizar el nuevo modelo ternario, llamado ternario diluido. Ya se observó el desarrollo de este nuevo código, ahora se analizan los resultados y cómo es su comportamiento de acuerdo a las diferentes mezclas que se utilizan.

Se simula una mezcla de $He-UF_6$ y 0.711 % de $^{235}UF_6$ (en el 5 % de UF_6). Resulta de interés graficar el perfil de UF_6 en su totalidad. En la Figura 4.12 se muestra esta concentración.

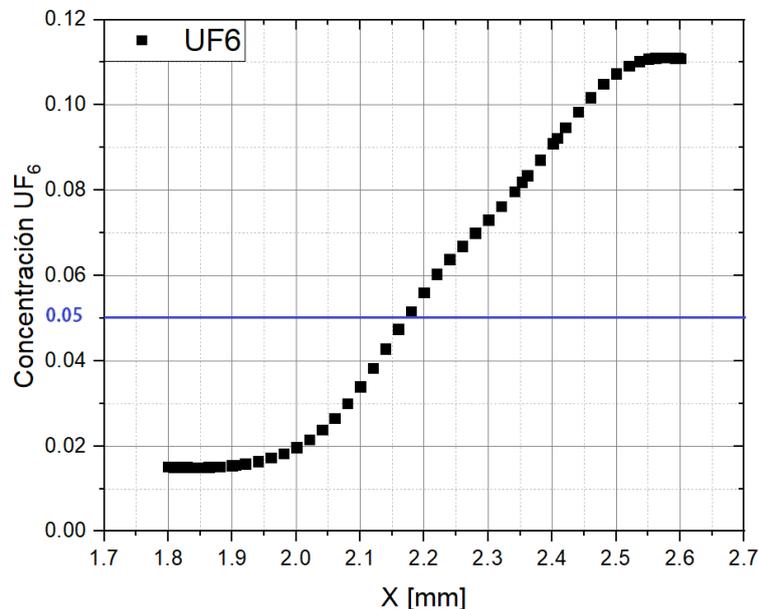


Figura 4.12: Perfil de concentración para UF_6 en el modelo ternario diluido. En azul, puede observarse la concentración inicial de UF_6 , la cual es del 5%.

Se observa que el perfil presenta una forma razonable representando a la física del problema. Contiene una mayor proporción de UF_6 en el lado derecho del corte, lo que es esperable por el gradiente de presión que se genera en la tobera.

Ahora se simula el componente diluido ($^{235}UF_6$) para compararlo con la Figura 4.6. Se observa en la Figura 4.13.

Se observa como el perfil es mucho más parecido a lo que uno podría esperar, en comparación con su correspondiente en el modelo ternario, debido a los gradientes de presión que se producen en la tobera. A priori esto es un buen resultado, ya que la especie difunde hacia el lado que se espera, teniendo mayor concentración sobre el lado derecho. Sin embargo, existe una mayor difusión de la especie $^{235}\text{UF}_6$ que la esperada observando la gráfica de concentración de UF_6 . Hay que analizar si cambiando algún parámetro se puede llegar a ajustar mejor el modelo.

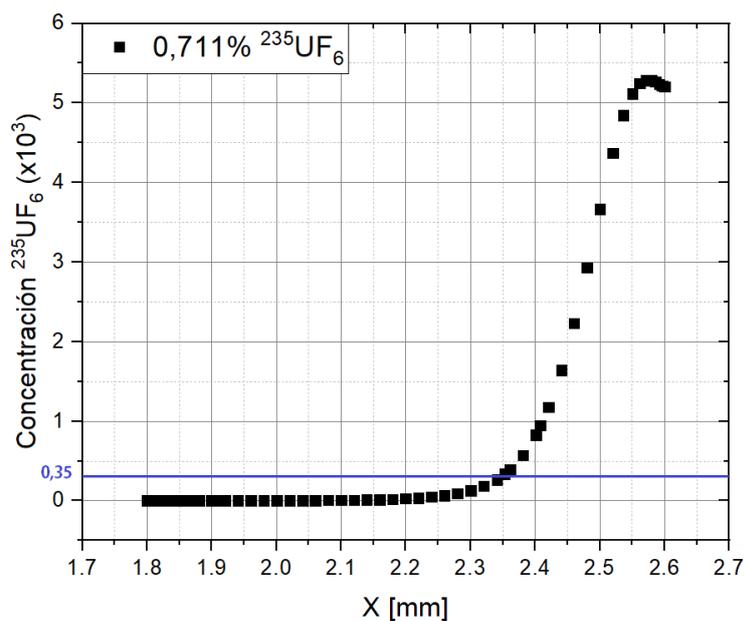


Figura 4.13: Perfil de concentración para $^{235}\text{UF}_6$ en el modelo ternario diluido. En azul, puede observarse la concentración inicial de $^{235}\text{UF}_6$, la cual es del 0.711 % en el 5 % de UF_6 de la mezcla.

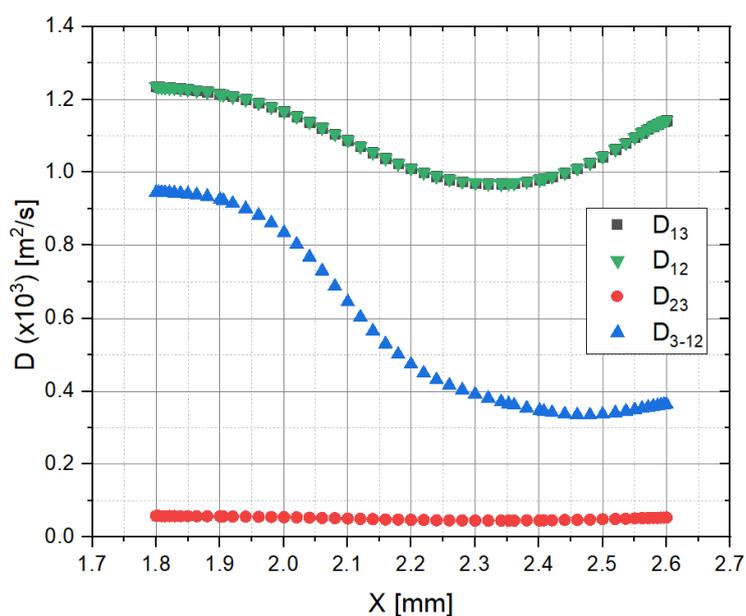


Figura 4.14: Coeficientes de difusión entre especies para UF_6 para el modelo ternario diluido. Notar que $D_{12} = D_{13}$, porque $D_{0-12} = D_{0-13}$ (véase Tabla 3.1).

En la sección anterior, se ve como el coeficiente de difusión afecta de forma notable al perfil de concentración. Debido a esto, resulta de interés graficar al coeficiente D_{3-12} (coeficiente de difusión efectivo de la especie 3 con la 1 y 2). Se lo compara con los otros coeficientes de difusión D_{12} , D_{13} y D_{23} en la Figura 4.14.

Tal como era de esperar, dado que D_{3-12} se calcula en función de una ponderación de D_{13} y D_{23} , D_{3-12} se encuentra entre los valores de estos dos últimos.

Para poder observar su influencia en este nuevo modelo, se lo hace tomar diferentes valores paramétricos para observar la concentración de la especie de interés. Se observa este análisis en las Figuras 4.15 y 4.16.

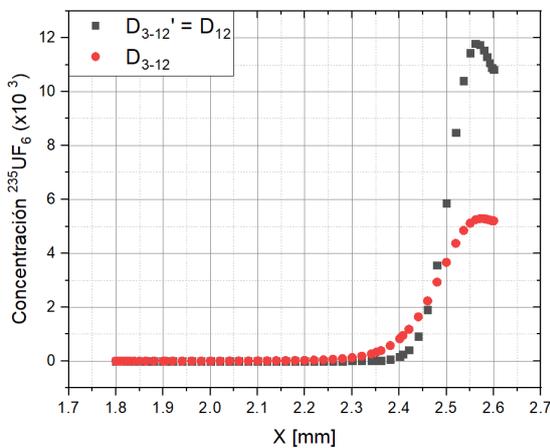


Figura 4.15: Concentración de $^{235}\text{UF}_6$, para diferentes D'_{3-12} (original y D_{12}).

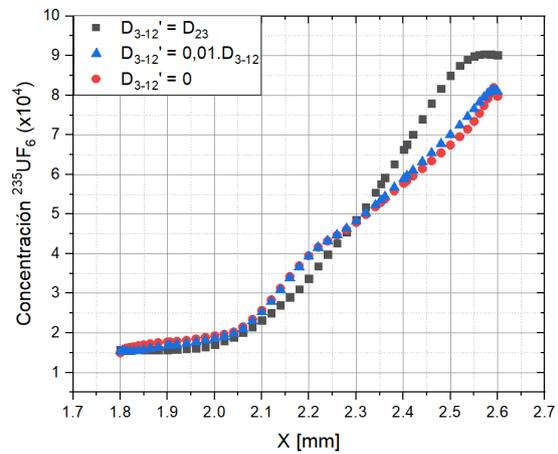


Figura 4.16: Concentración de $^{235}\text{UF}_6$, para diferentes D'_{3-12} (D_{23} , $0,01D_{3-12}$ y 0).

Se separan los resultados en dos gráficas ya que cambian los órdenes de magnitud. Lo que se observa de ellas es que a mayor valor de D_{3-12} existe una mayor difusión de la especie 3. La influencia de este factor es notable en el perfil de concentración de la especie de interés. Este resultado es esperable ya que existe mayor difusión de ella respecto de las otras dos.

Otro análisis interesante es la influencia del gradiente de concentración de la especie 1 ($\vec{\nabla}C_1$). Se recuerda que en el desarrollo, este factor se implementa mediante un modelo binario planteado para despejar la velocidad relativa de la especie 1. En la Figura 4.17, se observa una comparación con el perfil de concentraciones del caso original con otro caso en que se anula el término del gradiente de concentraciones de C_1 .

En la gráfica no se observa un cambio considerable cuando se anula el gradiente de concentración de la especie 1 en el modelo. Es más, el perfil es bastante similar difiriendo levemente en la parte derecha del corte. Se concluye que su influencia en el perfil de concentración es baja.

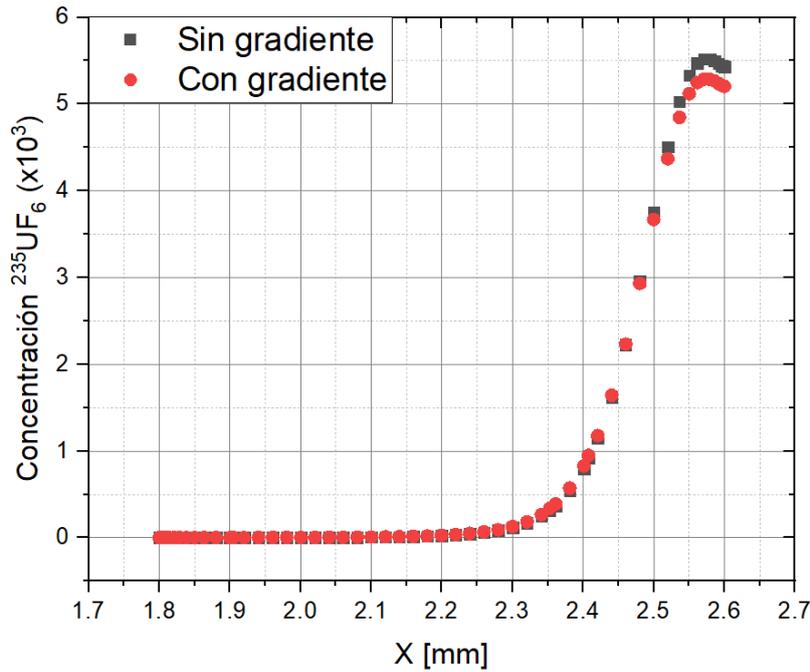


Figura 4.17: Perfil de concentración para $^{235}\text{UF}_6$ con y sin gradiente de concentración de la especie 1.

Los análisis anteriores fueron realizados de manera cualitativa, con enfoque en observar la forma del perfil. Sin embargo, este tipo de análisis resulta insuficiente para evaluar con precisión el grado de influencia de la difusión en cada caso. Se precisa un análisis cuantitativo para poder validar coherencia en los resultados de las Figuras 4.15, 4.16 y 4.17. Con coherencia se hace referencia a que, por ejemplo, si se coloca una cuchilla imaginaria en la mitad del corte de 'salida' y se analiza la razón de flujo entre $^{235}\text{UF}_6$ y el UF_6 total en el lado derecho (C_{der} , véase Ecuación 2.7), se obtenga una concentración inferior al 0.711 %, por ser $^{235}\text{UF}_6$ la especie liviana. Además, es importante considerar el error asociado (véase Ecuación 2.8), ya que si éste no deja distinguir si hay un enriquecimiento o empobrecimiento, entonces este método de análisis no sería adecuado y se debe buscar otro enfoque para evaluar la viabilidad del modelo.

Se realiza este análisis previamente mencionado y se vuelcan los resultados en la Tabla 4.1.

Casos de estudio	% C_{der}
$D'_{3-12} = D_{3-12}$	1.14 ± 0.05
$D'_{3-12} = D_{12}$	1.32 ± 0.04
$D'_{3-12} = D_{23}$	0.75 ± 0.02
$D'_{3-12} = 0.01 \cdot D_{3-12}$	0.66 ± 0.02
$\vec{\nabla} C_1 = 0$	1.14 ± 0.05

Tabla 4.1: Concentraciones C_{der} de $^{235}\text{UF}_6$ en la parte derecha del corte de salida para los distintos casos analizados. La concentración de $^{235}\text{UF}_6$ en la mezcla es 0.711 % (estado natural).

Se observa en la figura que el coeficiente de difusión efectivo D_{3-12} es clave en la determinación de perfiles de concentración en este nuevo modelo. Se hace mención al caso en que se baja este coeficiente dos órdenes de magnitud, ya que es el único caso que representa de forma correcta la física del problema por tener una C_{der} menor al 0.711 %.

Por los errores, se puede distinguir si hay un enriquecimiento o empobrecimiento de la especie $^{235}\text{UF}_6$ en la parte derecha del corte de salida. Sin embargo, se dificulta comparar valores cuantitativos con el modelo ternario por las inestabilidades que presenta para este caso de estudio. Además, en este caso tenemos isótopos muy parecidos con poca difusión, si tuvieran una mayor diferencia de masa facilitarían el análisis.

Por estos motivos se decide cambiar la mezcla de gases por una en la cual haya más diferencia de masa entre especies, debido a que la especie SF_6 ($\simeq 146 \frac{\text{g}}{\text{mol}}$) es mucho más liviana que UF_6 ($\simeq 352 \frac{\text{g}}{\text{mol}}$).

4.2.5. $\text{He} - \text{UF}_6 - \text{SF}_6$ con SF_6 al 1 %: Análisis de modelos ternario y ternario diluido

En todas las configuraciones de composición de esta nueva mezcla, se trabaja con 95 % He y 5 % de $\text{UF}_6 - \text{SF}_6$. Dentro de este 5 %, varía la composición como se muestra en la Tabla 2.3. En esta sección se analiza la mezcla 8, que corresponde con un 99 % de UF_6 y 1 % de SF_6 en el 5 % de $\text{UF}_6 - \text{SF}_6$. Recordemos que la especie 3 es la diluida, en este caso SF_6 .

El primer paso de análisis es graficar el perfil de concentraciones de las especies UF_6 y SF_6 , para observar su comportamiento. Esto se representa en las Figura 4.18 y 4.19. En la Figura 4.19 se muestra una comparación del perfil de concentración de SF_6 para el modelo ternario y el ternario diluido, mientras que la Figura 4.18 muestra a la mezcla $\text{UF}_6 - \text{SF}_6$ en el modelo ternario diluido.

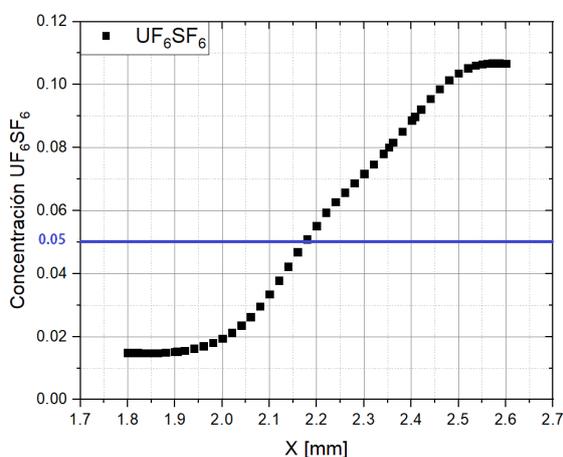


Figura 4.18: Perfil de concentración de $\text{UF}_6 - \text{SF}_6$, para la mezcla 8.

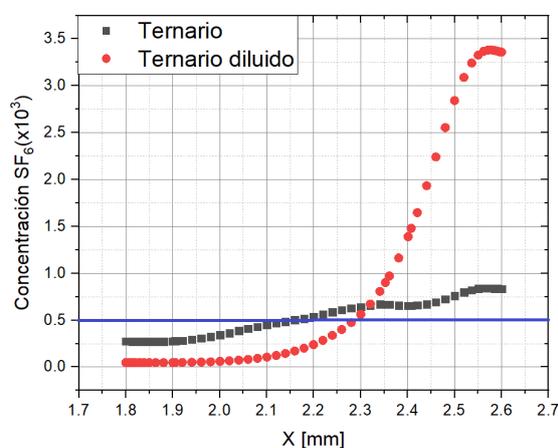


Figura 4.19: Perfil de concentración de SF_6 , para la mezcla 8.

El perfil del modelo ternario presenta una forma acorde a lo que uno espera, por lo que probablemente lo observado para la mezcla anterior haya sido una inestabilidad o una cuestión particular de convergencia del caso de estudio anterior. Si se compara el modelo ternario con el ternario diluido para esta mezcla, se observa que el segundo difunde más de lo que debería. Esto se concluye ya que, si observamos la Figura 4.18, el perfil de concentración de $UF_6 - SF_6$ no está tan difundido como el de SF_6 solo, lo que no es una representación correcta por el gradiente de presión que existe en la tobera. Mas allá de estas conclusiones, el modelo diluido para esta mezcla se comporta de manera similar al ternario, lo que es un buen resultado.

Nuevamente, se toman ambos modelos y se calcula el cociente C_{der} en la parte derecha del corte de salida, para observar si hay un enriquecimiento o empobrecimiento de la especie 3. Se muestra en la Tabla 4.2.

Modelos	% C_{der}
Ternario	0.86 ± 0.02
Ternario diluido	1.39 ± 0.03

Tabla 4.2: Concentraciones C_{der} de SF_6 en la parte derecha del corte de salida para los modelos ternario y ternario diluido. La concentración de SF_6 en la mezcla $UF_6 - SF_6$ es 1%.

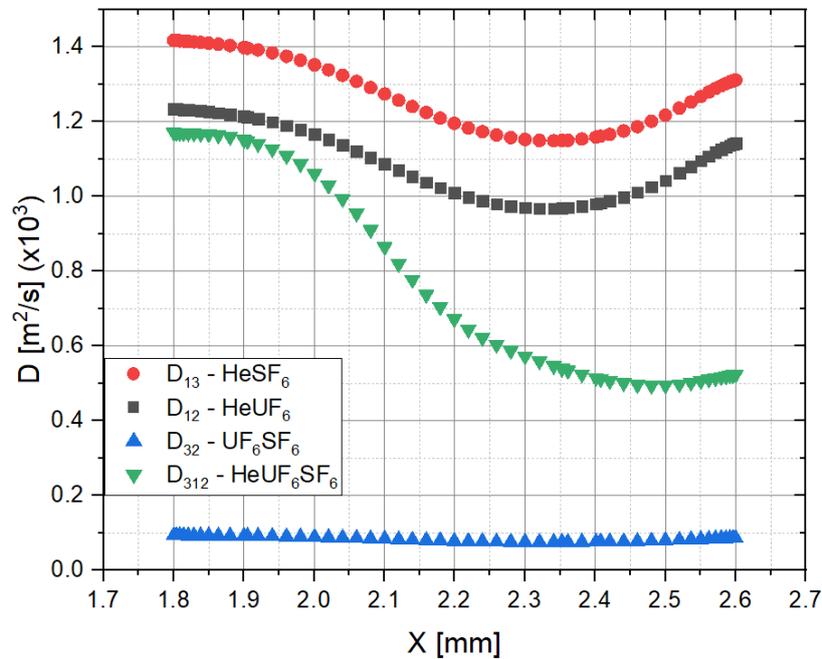


Figura 4.20: Coeficientes de difusión entre especies para $He - UF_6 - SF_6$ en el modelo ternario diluido.

Como se podía esperar por las formas de los perfiles, el modelo ternario diluido presenta una concentración enriquecida (mayor a la concentración inicial: 1%), lo que resulta incorrecto por las masas de las especies y porque el sentido del gradiente de

presión no cambia. Por su parte, el modelo ternario presenta una concentración empobrecida.

Con el objetivo de lograr un ajuste en los resultados del modelo ternario diluido se realizan variaciones en los parámetros de ajuste anteriormente mencionados. Se hace un análisis de los distintos coeficientes de difusión entre especies, como muestra la Figura 4.20.

Como era de esperarse, D_{3-12} toma un valor intermedio.

Se realiza el mismo análisis que en la sección anterior, variando el coeficiente de difusión D_{3-12} , para observar su influencia en el perfil de concentración de la especie 3. Se muestra en las Figuras 4.21 y 4.22.

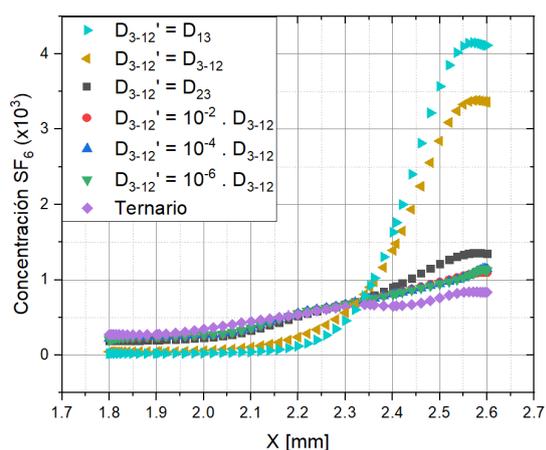


Figura 4.21: Perfiles de concentración de SF_6 , para distintos valores de D_{3-12} .

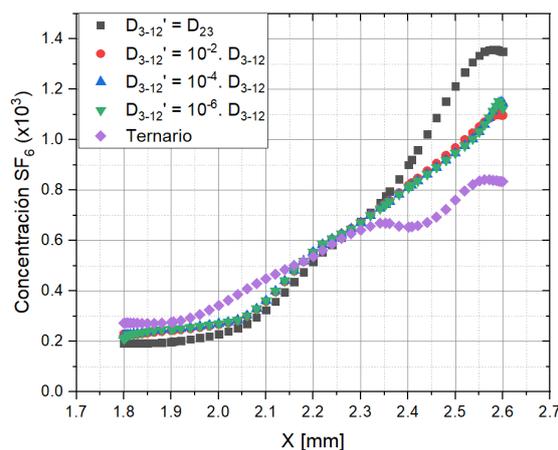


Figura 4.22: Perfiles de concentración de SF_6 , para algunos valores de D_{3-12} .

En la Figura 4.21, se grafican todos los perfiles y en la Figura 4.22, solo algunos de ellos para examinarlos mejor. Se observa que, como era de esperarse, a medida que disminuye el D_{3-12} , el perfil de concentración de SF_6 difunde menos. También, se nota un comportamiento asintótico a medida que D_{3-12} tiende a 0, que no llega a alcanzar al perfil del modelo ternario.

Nuevamente, para validar las simulaciones se hacen los mismos análisis que en la sección anterior. Se calcula el cociente C_{der} , en la parte derecha del corte de salida, para observar si hay un enriquecimiento o empobrecimiento de la especie 3. Se muestra en la Tabla 4.3.

Casos de estudio	% C_{der}
$D'_{3-12} = D_{3-12}$	1.39 ± 0.03
$D'_{3-12} = D_{13}$	1.53 ± 0.03
$D'_{3-12} = D_{23}$	0.99 ± 0.01
$D'_{3-12} = 10^{-2} \cdot D_{3-12}$	0.92 ± 0.02
$D'_{3-12} = 10^{-4} \cdot D_{3-12}$	0.92 ± 0.02
$D'_{3-12} = 10^{-6} \cdot D_{3-12}$	0.92 ± 0.02
Ternario	0.86 ± 0.02

Tabla 4.3: Concentraciones C_{der} de SF_6 en la parte derecha del corte de salida para los distintos casos analizados. La concentración de SF_6 en la mezcla $UF_6 - SF_6$ es 1 %.

Un aspecto a notar, es que nunca se llega a la concentración del lado derecho de la tobera del modelo ternario (0.857 %). Sin embargo, en los casos de las últimas tres filas se logra capturar la física del problema, ya que se obtiene una concentración menor a la inicial de SF_6 (1 %). En conclusión, se observa cómo el perfil de concentraciones es afectado por el factor del coeficiente de difusión D_{3-12} y mediante su modificación, el valor puede acercarse al modelo ternario, pero no es suficiente. Se debe analizar otro factor dentro de las ecuaciones matemáticas del modelo ternario diluido, para poder aproximarnos aún más al modelo ternario. A priori, el modelo es adecuado y se espera que con otros cambios pueda llegar a funcionar para representar de mejor manera al modelo ternario.

Por otro lado, resulta de interés analizar la precisión del cálculo del gradiente de concentración del gas carrier (especie 1) por el software. Recordar que el análisis del gradiente es de interés, ya que proviene de una simplificación del modelo. Para ello, se realiza una simulación donde se iguala a cero el gradiente y luego se compara con el cálculo realizado por el programa y un cálculo externo aproximado.

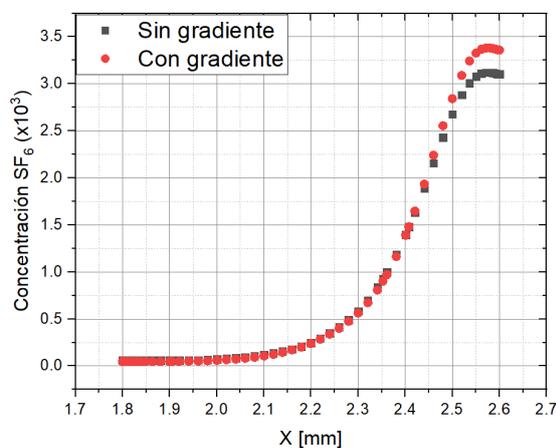


Figura 4.23: Concentración de SF_6 con y sin gradiente de C_1

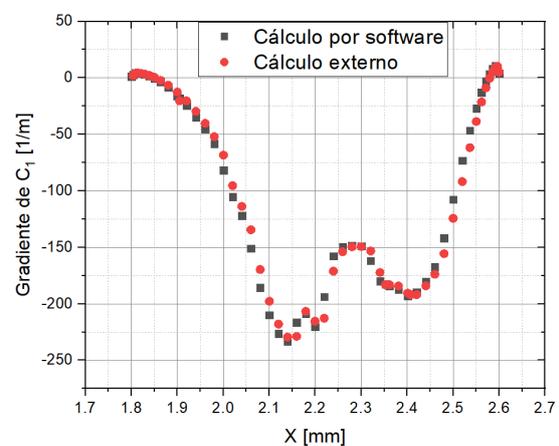


Figura 4.24: Cálculos de gradiente de C_1 por software y externo.

En las Figuras 4.23 y 4.24 se observan las gráficas descritas anteriormente. En la primera, como en el caso de estudio anterior, se observa que no afecta considerablemente el gradiente de concentración de la especie 1 en el perfil de concentración de la especie 3. En la segunda imagen, se comparan los cálculos de este gradiente a partir del software (calculado con funciones *DefineOnDemand*, que saca valores parciales de las simulaciones), con un cálculo externo. Se observa una similitud de ambos métodos, por lo que se concluye que el software lo calcula correctamente.

4.2.6. $He - UF_6 - SF_6$ con SF_6 al 0.1 %, 0.5 %, 1 %, 10 %, 15 % y 20 %: Análisis de modelos ternario y ternario diluido

El siguiente análisis consiste en cambiar el porcentaje de SF_6 en la mezcla para observar hasta qué porcentaje puede considerarse como diluida la especie 3. Se sospecha que, si se reduce el porcentaje de SF_6 , el modelo podría ajustarse mejor y así obtener resultados más similares al modelo ternario, ya que las simplificaciones serían más adecuadas.

Se disminuye el porcentaje de SF_6 en la mezcla para que tome valores de 0.1 % y 0.5 % (mezcla 6 y 7, véase Tabla 2.3). Luego, se normalizan los valores con la concentración de SF_6 de cada mezcla y se gráfica la concentración de la especie diluida para las 3 mezclas. Se muestra en la Figura 4.25.

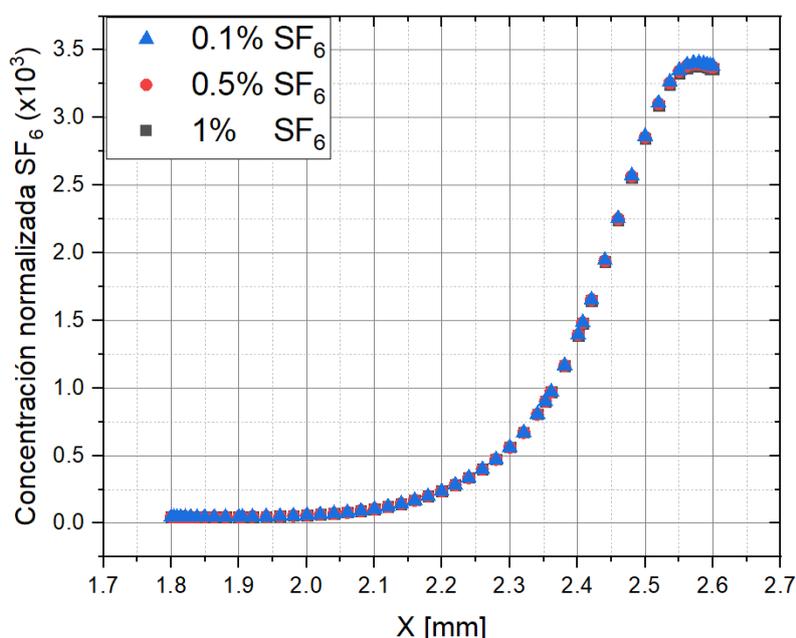


Figura 4.25: Perfiles de concentración normalizados de SF_6 para porcentajes de 0.1 %, 0.5 % y 1 % (mezclas 6, 7 y 8, respectivamente) de SF_6 en $UF_6 - SF_6$.

Se puede notar cómo los perfiles dan muy similares, casi indistinguibles. También se calculan los porcentajes de enriquecimiento, para ver si se mejora el modelo. Se calcula

el porcentaje de SF_6 en la parte derecha del corte de salida (C_{der}), y se lo divide con la concentración de SF_6 en $UF_6 - SF_6$ de la mezcla (es decir, 1 %, 0.5 % y 0.1 % en estos casos), para comparar estos valores de forma normalizada. Se muestra en la Tabla 4.4.

$\%SF_6$	$\frac{C_{der}}{\%SF_6}$
1	1.39
0.5	1.38
0.1	1.38

Tabla 4.4: Cocientes de concentraciones C_{der} sobre porcentaje de SF_6 en mezcla, para mezclas 6, 7 y 8.

Al observar el primer caso (1 % SF_6) se ve que presenta un comportamiento similar al de 0.1 %, por lo tanto sería apropiado considerar al SF_6 como diluido para valores de referencia del orden del 1 %, ya que el cociente se mantiene casi constante para las concentraciones analizadas.

El siguiente análisis consiste en incrementar el porcentaje de SF_6 para encontrar el campo de validez, es decir, el límite superior de este modelo. Se aumenta la concentración de SF_6 en el 5 % de $UF_6 - SF_6$ hacia valores de 10 %, 15 % y 20 %. Como ya son porcentajes considerables de SF_6 en la mezcla, el cambio másico en ella es considerable, por lo tanto se corre la fluidodinámica para cada caso particular. Una vez convergida la primera parte, se realizan los cálculos del modelo diluido. Los resultados del perfil de concentración de SF_6 se observan en la Figura 4.26

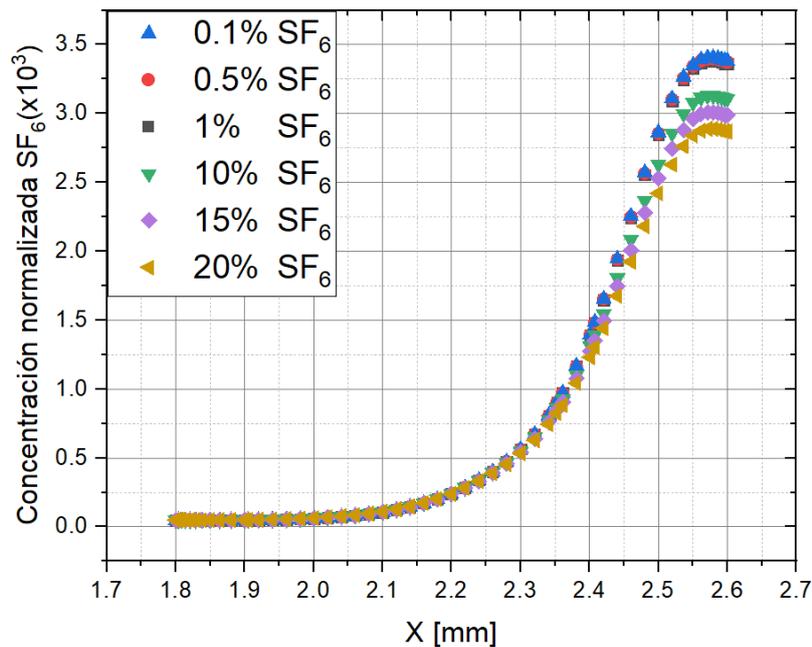


Figura 4.26: Perfiles de concentración normalizados de SF_6 para porcentajes de 0.1 %, 0.5 %, 1 %, 10 %, 15 % y 20 % (mezclas 6 a 11, respectivamente) de SF_6 en UF_6SF_6 .

Se puede apreciar cómo los perfiles son similares, y existe una gran similitud para altos valores de concentración. Los valores de concentración en la region derecha del corte de salida de la especie diluida en la mezcla, para los nuevos casos utilizados, se muestran en la Tabla 4.5.

$\%SF_6$	$\frac{C_{der}}{\%SF_6}$
10	1.36
15	1.35
20	1.34

Tabla 4.5: Cocientes de concentraciones C_{der} sobre porcentaje de SF_6 en mezcla, para mezclas 9, 10 y 11.

Más allá que el modelo difunda más de lo que debería, ya que el cociente debiera dar menor a 1 %, el modelo, a priori, es adecuado. Se llega a un 20 % en la concentración de SF_6 y no se encuentra un corrimiento o desvirtuación en él. Se podría intuir que no se encuentra aún, con estos valores, un límite en el modelo en cuanto al concepto de especie muy diluida. Dicho con otras palabras, hasta un 20 % de SF_6 (en 5 % de $UF_6 - SF_6$, es decir 1 % de la mezcla total) se podría seguir considerando el modelo diluido.

De todas formas, la diferencia entre los perfiles se puede producir por diversos factores que cambian entre los diferentes casos (véase Ecuación 3.19). Estos pueden ser: concentraciones, velocidades, coeficientes de difusión, entre otros. Para profundizar un poco en esto, se proporcionan gráficos para los casos extremos analizados (0.1 % y 20 %).

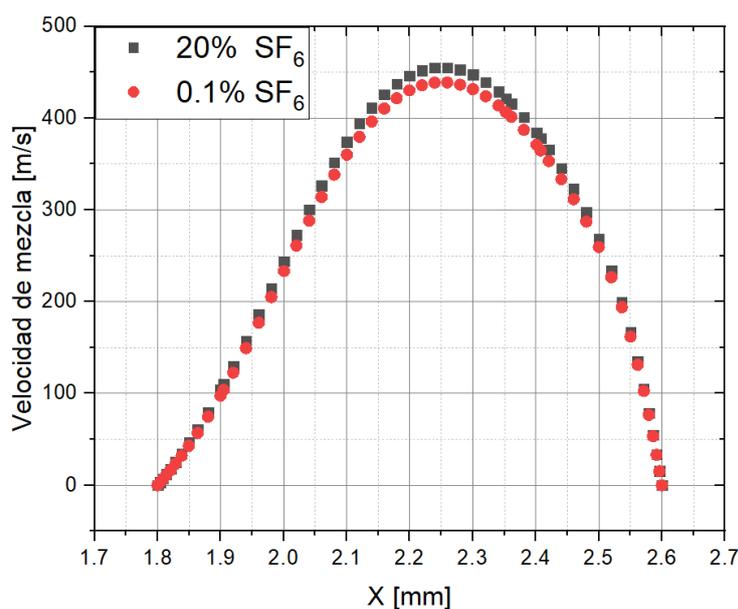


Figura 4.27: Perfiles de velocidad de mezcla para porcentajes de 0.1 % y 20 % (mezclas 6 y 11, respectivamente) de SF_6 en $UF_6 - SF_6$.

En la Figura 4.27, se muestra la velocidad en el corte de salida. Existe una leve diferencia en el perfil, ya que tenemos otra mezcla. Como era de esperarse, la mezcla de 20% SF_6 tiene una mayor velocidad por ser una mezcla más liviana. Esto le da sentido a que difunda menos, ya que si pasa por la tobera a mayor velocidad tendrá menos tiempo para difundir, concordando con lo visto en la Figura 4.26.

Otros parámetros de interés a analizar son los coeficientes de difusión entre las especies 1-3 ($He - SF_6$) y 2-3 ($UF_6 - SF_6$). Los coeficientes de difusión están determinados por la presión y la temperatura de la mezcla. Dado que estamos tratando con mezclas diferentes, estas variables termodinámicas cambian para cada caso. En la Figura 4.28 y 4.29, se muestran comparaciones entre las diferentes concentraciones de SF_6 en la mezcla.

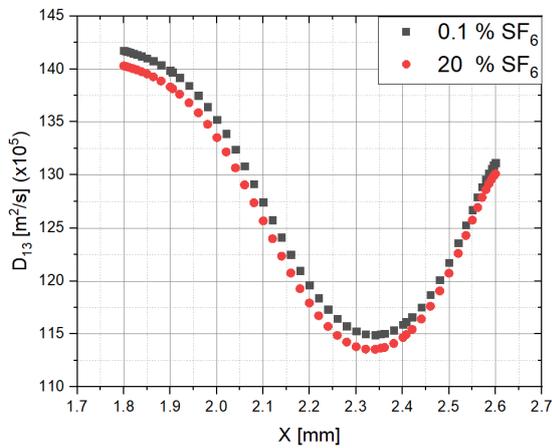


Figura 4.28: D_{13} para modelo ternario diluido con SF_6 al 0.1% y 20%.

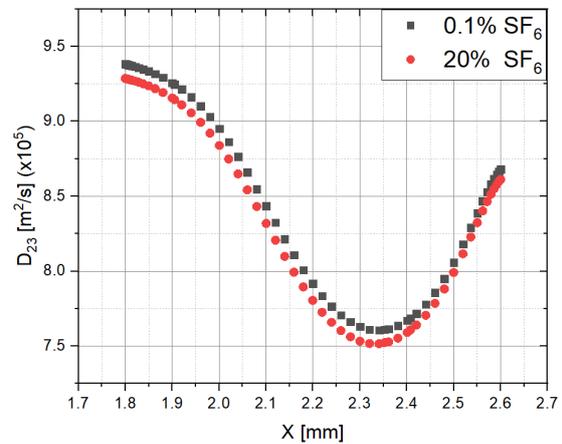


Figura 4.29: D_{23} para modelo ternario diluido con SF_6 al 0.1% y 20%.

También, se puede observar como cambia la concentración C_1 a medida que se modifica la mezcla. Este análisis resulta de interés, ya que en el caso de la proporción de SF_6 0.1%, tendremos una mezcla mas pesada y se espera una mayor concentración de He (gas mas liviano de la mezcla) en la parte izquierda del corte, debido a la influencia de los gradientes de presión. En la Figura 4.30 se muestra una gráfica de esto.

En un análisis paralelo, se grafican los perfiles de SF_6 para las mismas concentraciones, pero con un coeficiente de difusión $D'_{3-12} = 0.01 \cdot D_{3-12}$. Se muestra en la Figura 4.31. Esto para observar que las curvas se comporten de una forma similar para otros valores de coeficiente de difusión. El comportamiento de los perfiles posee un comportamiento que es el esperado.

Otro análisis corresponde al de la densidad. Recordemos que se simula la parte fluidodinámica para luego correr la parte difusiva. Pero como previamente se menciona, la parte difusiva modifica la parte fluidodinámica, por lo que lo correcto sería realimentarla. Este paso inestabiliza más a la convergencia, por esta realimentación adicional.

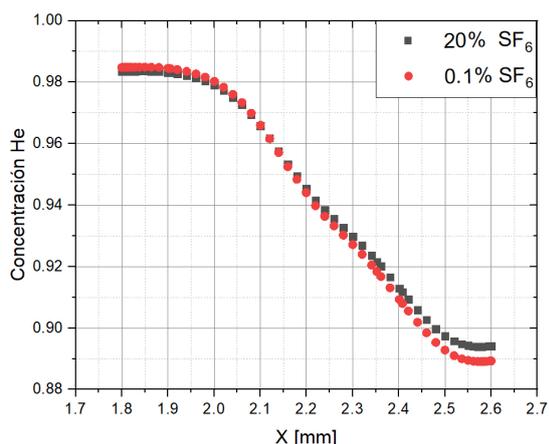


Figura 4.30: Concentración de He para modelo ternario diluido con SF_6 al 0.1% y 20%.

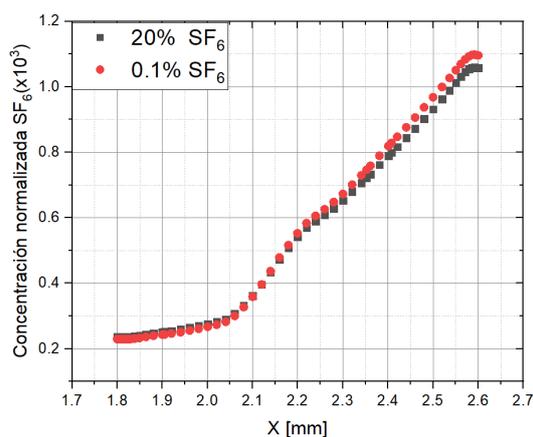


Figura 4.31: Concentración de SF_6 para diluido con $D'_{3-12} = 0.01 \cdot D_{3-12}$.

Notado esto, se calcula a primer orden como queda un perfil de densidad en la salida teniendo en cuenta esta realimentación y sin tenerla en cuenta (como hace *Fluent*), para observar si esto puede llegar a ser un factor de importancia. Es importante recalcar que se hicieron los cálculos con el porcentaje de 0.1% de SF₆, ya que se lo identifica como el caso mas crítico.

Primero, se calcula $m(x)$, la masa de la mezcla para cada punto x del corte de salida, para luego comparar $\rho(x)$ (densidad sacada de *Fluent*) con $\rho_{realimentada} \simeq \rho(x) \cdot \frac{m(x)}{m_0}$, siendo m_0 la masa de entrada de la mezcla. Los resultados se observan en la Figura 4.32 y 4.33.

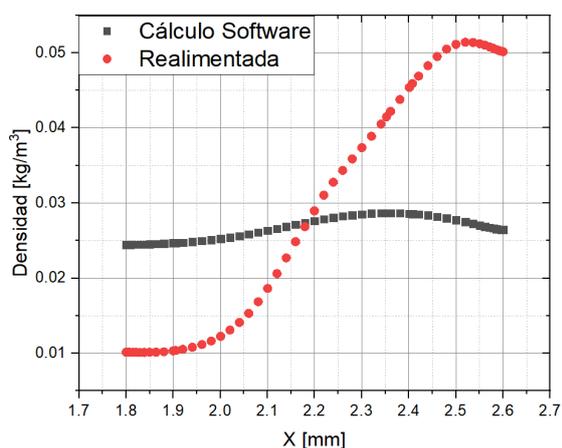


Figura 4.32: Densidad calculada por el software y realimentada calculada a mano

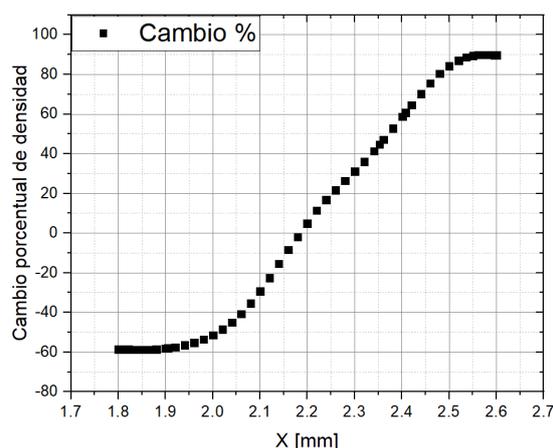


Figura 4.33: Densidad (en %) calculada por el software y realimentada calculada a mano.

Se observa un cambio notorio. La densidad varía hasta un 100% en algunas posiciones del corte de salida. El análisis para tener en cuenta este cambio de densidad se deja para trabajos futuros.

Con todos estos análisis, se puede justificar el cambio que existe entre los perfiles de concentración de SF₆ mostrados en la Figura 4.26. Cada parámetro es motivo de

cambio en el perfil, por lo que no sería correcto esperar a que todos den exactamente iguales, aunque sí muy similares.

Por otro lado, el caso de interés en el proyecto es aplicar este modelo ternario diluido a una mezcla de He y las dos especies de UF_6 . El objetivo es llegar, a priori, hasta un 3% o 4% de enriquecimiento. Un 20%, como el que se prueba en la mezcla con SF_6 , es un caso en el que se está muy por arriba del porcentaje que se busca para la especie diluida.

Otro aspecto que favorece el caso de $He - UF_6$, es que en el desarrollo del modelo ternario diluido, se utiliza la ecuación de un binario para despejar la velocidad \vec{v}_1 (véase 3.16). Esto es más adecuado cuando se utiliza solo UF_6 , debido a la similitud entre sus especies ($^{235}UF_6$ y $^{238}UF_6$). Por lo tanto, se puede decir que el gradiente de C_1 estará mejor calculado de antemano, que en la mezcla de $He - UF_6 - SF_6$. Lo mismo ocurre con la diferencia de masas $m_1 - m_2$, en el caso de utilizar SF_6 esta diferencia cambia considerablemente con las diferentes composiciones de la mezcla $UF_6 - SF_6$, mientras que en el caso de las especies de UF_6 no afecta tanto debido a la similitud de las masas entre sus especies.

Capítulo 5

Conclusiones y pasos futuros recomendados

“Siempre tuve el sueño de ser Campeón del Mundo y no quería dejar de intentarlo, aún sabiendo que quizá nunca se daría.”

— Lionel Andrés Messi, 2022

En este trabajo, se estudian distintos modelos de difusión de especies en mezclas de gases, particularmente en mezclas binarias y ternarias. Además, se desarrolla e implementa un nuevo modelo ternario diluido, con el objetivo de representar de manera óptima y con menor costo computacional al modelo ternario.

Para llevar a cabo el estudio, se utilizan simulaciones numéricas realizadas con el software *ANSYS Fluent*. Este programa, utiliza el método de volúmenes finitos para resolver las ecuaciones que describen el comportamiento de los fluidos. Las simulaciones consisten en una primera parte que calcula los parámetros fluidodinámicos, para que una vez convergida se simule la parte difusiva mediante el acople de un código en lenguaje *C*. Se realizan simulaciones en régimen estacionario y supersónico, utilizando una tobera convergente-divergente como caso de estudio. Los modelos para el cálculo de los coeficientes de difusión que se utilizan son el de Chapman y Chapman-Enskog.

Primero se elige una geometría donde, a priori, se puedan estimar los resultados para intuir los comportamientos de los casos de estudio, y así saber si el modelo responde bien luego de acoplar nuevo código difusivo y simular. Esto quiere decir, que se elige una geometría que cree gradientes de presiones conocidos para tener mayor manejo e información de la misma. También, debe ser una tobera convergente-divergente, para poder simular un flujo supersónico, ya que es el caso de interés en el proyecto dado que se busca zonas de temperaturas bajas tales que favorezcan la aglomeración de moléculas (clusterización), para posteriormente controlarlas con iluminación láser.

Dicha geometría es la tobera cerrada, que se muestra en la Figura 1.6.

Luego, se desarrolla el mallado de la tobera. Se busca que el tamaño de elemento sea pequeño para poder tener precisión a la hora de simular, pero a la vez que no sea tan chico para que el tiempo de simulación no sea muy largo. Esto se logra con un mallado en dos grandes partes, con un menor tamaño de elemento en la garganta de la tobera y la curva de la misma. Se muestra en la Figura 2.5.

Se utilizan criterios de convergencia como el de cálculo de residuos o el cierre de caudales molares y másicos, para poder saber cuando la simulación converge.

Se analizan diferentes mezclas de gases para los distintos modelos. Se utiliza un gas *carrier* en todas las mezclas al 95 %, el cual es el *He*, que ayuda a que la mezcla alcance de manera más fácil el régimen supersónico por su baja masa. Para el 5 % restante, primero se utiliza UF_6 con diferentes porcentajes de la especie $^{235}UF_6$ (0.711 %, 5 %, 10 %, 20 %, 99 %) y luego, $UF_6 - SF_6$ con diferentes porcentajes de SF_6 (0.1 %, 0.5 %, 1 %, 10 %, 15 % y 20 %). Se utilizan 11 mezclas distintas, que se muestran en la Tabla 2.2 y 2.3.

En un principio se analizan simulaciones numéricas de la parte fluidodinámica en una mezcla de $He - UF_6$ con UF_6 natural, para comprender mejor el estado previo al acople de la difusión a la simulación. Allí se observa el núcleo supersónico, la ausencia de una recirculación en la tobera y la variación transversal de presión a lo largo de la curva.

En el análisis de resultados de la parte difusiva, primero se realiza una comparación entre los modelos binario y ternario, para una mezcla de $He - UF_6$ en estado natural (0.711 % de $^{235}UF_6$). Se encuentra una gran concordancia entre los modelos para el gas UF_6 .

Luego, se grafica el perfil de concentración de la especie con menor concentración ($^{235}UF_6$) para el modelo ternario, resultando una forma funcional que pueda deberse a inestabilidades de convergencia. Para ahondar en el análisis de este perfil, se opta por variar el porcentaje de $^{235}UF_6$ en la mezcla, para ver si se encuentra una relación entre el porcentaje y el perfil, comprobando que no son dependientes. También, se varía el coeficiente de difusión entre las especies de UF_6 y se observa una gran dependencia entre el coeficiente y el perfil de concentración, por lo tanto se concluye que el coeficiente de difusión es determinante con el perfil de concentración.

Como siguiente paso, se analiza una mezcla $He - UF_6$ para el modelo ternario, con un 99 % de la especie $^{235}UF_6$. Se observa que el perfil de concentración de la especie $^{238}UF_6$ (la de menor concentración) es similar a la del caso anterior de la especie $^{235}UF_6$. Por lo tanto, se concluye que la forma del perfil no depende de la especie, sino de su grado de dilución. Siguiendo por esta línea, se cambia el coeficiente de difusión entre las especies de UF_6 , desde órdenes 10^{-5} hasta 10^{-11} . Se observa una gran dependencia entre el coeficiente y el perfil de concentración. Se intuye que en el perfil puede haber

una influencia del núcleo supersónico o inestabilidades en el modelo.

Mediante un análisis del modelo ternario se puede observar que contiene ecuaciones de velocidades acopladas, con una fuerte característica no lineal en concentraciones. Esto hace que el modelo sea muy complejo de resolver e inestable. Por lo tanto, se decide buscar una simplificación del mismo, para poder resolverlo de manera más sencilla y con menor costo computacional. La solución a esto fue el modelo ternario diluido, el cual se desarrolla en este proyecto integrador. Para implementarlo, se realiza la simplificación que se cree necesaria para poder resolverlo de manera más sencilla. Su desarrollo se encuentra detallado en la Sección 3.3.

Se inicia el análisis de este nuevo modelo simulando una mezcla de $He - UF_6$, con UF_6 natural. Se observa que el perfil de concentración de la especie de menor concentración ($^{235}UF_6$), presenta una mayor proporción en el lado derecho con un perfil de acuerdo a lo esperado. Este resultado, concuerda a grandes rasgos con el perfil de UF_6 completo, aunque difunde más de lo que debería. Por esto se analiza el parámetro D_{3-12} , y se analiza variarlo para ver si se puede modificar el perfil, resultando un factor muy importante en el mismo. También, se analiza el gradiente de concentración del He (gas *carrier*, especie 1) y se concluye que no tiene mayor influencia en el perfil de concentración de la especie 3. Para todos estos casos, se calcula el porcentaje de enriquecimiento en la parte derecha del corte de 'salida' para la especie liviana, con el fin de observar si enriquece o empobrece. Se observa que a medida que disminuye D_{3-12} , se empobrece la especie en esa zona, lo que es razonable. El problema de esta mezcla es que no se puede comparar con el modelo ternario, dadas las dificultades en estabilidad y convergencia que se dan para tan poca diferencia de masas ($352 \frac{g}{mol}$ vs. $349 \frac{g}{mol}$) y un grado de dilución tan alto. Por esto se plantea otra mezcla que favorezca este análisis, con una mayor diferencia de masa entre las especies.

La nueva mezcla a analizar es $He - UF_6 - SF_6$. Se inicia el análisis con un 1% de SF_6 en el 5% de $UF_6 - SF_6$. Se simulan casos para el modelo ternario y ternario diluido, y se comparan los perfiles de concentración de SF_6 . En esta ocasión, ambos se comportan de manera esperada con una mayor concentración en la parte derecha, aunque nuevamente se observa más difundido al modelo diluido. Se calcula el porcentaje de enriquecimiento en la parte derecha del corte de 'salida', para observar si enriquece o empobrece. Se observa que el modelo ternario diluido enriquece a la especie liviana, mientras que el modelo ternario la empobrece. Nuevamente, se varía D_{3-12} y se analizan las simulaciones para cada caso. Se observa que a medida que disminuye D_{3-12} , se empobrece dicha especie en esa zona, asemejándose al modelo ternario, lo cual es el resultado que se espera en la práctica. Se espera que otros cambios en el modelo ayuden a acercarse aún más al modelo ternario. Luego, se analiza el gradiente de concentración de la especie 1, para ver si influye notablemente en el perfil de concentración de la especie 3 y se observa que no tiene mayor influencia en él. También, se corrobora que

el software lo calcule de forma correcta.

Por último, se analiza el modelo ternario diluido para diferentes porcentajes de SF_6 en la mezcla $He - UF_6 - SF_6$. Se comienza con un 0.1 % de SF_6 y se llega hasta un 20 % de SF_6 , en el 5 % de UF_6SF_6 . Se normalizan los perfiles de concentración de SF_6 para compararlos, y se observa que son muy similares. Se calcula el porcentaje de enriquecimiento en la parte derecha del corte de 'salida', y todos los casos de estudio dan similares, por lo que se puede concluir que todos están dentro del campo de validez del modelo. Se analizan diferentes variables como velocidad, coeficientes de difusión y concentración de He para los casos extremos, (0.1 % y 20 % de SF_6). Se observa que varían un poco en cada parámetro, lo que justifica que los perfiles de la especie diluida cambien levemente. Para el caso de 0.1 % de SF_6 , se calcula el cambio de densidad que existe entre la parte fluidodinámica y la parte difusiva, y se observa que es considerable, por lo que se deja para trabajos futuros el análisis de este cambio en algunos casos de interés.

Se concluye que el modelo ternario diluido es una buena aproximación al modelo ternario, ya que se obtienen resultados similares, con un menor costo computacional y menor cantidad de problemas de convergencia. Es útil para evitar inestabilidades debido a su álgebra "sencilla", en comparación al modelo ternario. Se corrobora su campo de validez hasta, por lo menos, un 1 % de la especie diluida en la mezcla global (20 % de especie diluida, en un 5 % de gas de proceso). Se deja para trabajos futuros diferentes análisis que puedan optimizar el modelo como por ejemplo, realimentar la densidad o la búsqueda de otros modelos y valores de coeficientes de difusión que puedan adaptarse mejor a las condiciones de la simulación.

Apéndice A

Ecuaciones para las propiedades de las mezclas

Todas estas ecuaciones están basadas en la teoría cinética de los gases.

La masa molar de la mezcla se calcula como se muestra a continuación:

$$m = \sum_i^n C_i m_i$$

Siendo C_i la concentración de la especie i -ésima, m_i la masa molar de la especie i -ésima y n el número de especies de la mezcla.

El calor específico a presión constante C_p de la mezcla, se calcula de la siguiente manera:

$$C_p = \frac{\sum_i C_i m_i C_{pi}}{\sum_i C_i m_i} = \frac{\sum_i C_i m_i C_{pi}}{m}$$

Siendo C_{pi} el calor específico de la especie i -ésima.

Para el caso de la viscosidad μ se calcula como:

$$\mu = \sum_i \frac{x_i \mu_i}{\sum_j x_j \phi_{ij}}$$

donde μ_i es la viscosidad de la especie i -ésima, x_i es la fracción molar de la especie i -ésima y ϕ_{ij} se define como:

$$\phi_{ij} = \frac{\left[1 + \left(\frac{\mu_i}{\mu_j} \right)^{1/2} \left(\frac{m_i}{m_j} \right)^{1/4} \right]^2}{\left[8 \left(1 + \frac{m_i}{m_j} \right) \right]^{1/2}}$$

Por otro lado para el caso de la conductividad térmica k :

$$k = \sum_i \frac{C_i k_i}{\sum_j x_j \phi_{ij}}$$

siendo k_i la conductividad térmica de la especie i .

Apéndice B

Práctica Profesional Supervisada (PPS)

La PPS se llevó a cabo durante el último año de la carrera de ingeniería mecánica del Instituto Balseiro, la cual se desarrolló en las instalaciones del Laboratorio Argentino de Separación Isotópica para Enriquecimiento (LASIE) en el Centro Atómico Bariloche (CAB). La práctica fue supervisada por el Dr. José Héctor González y el Ing. Leandro Rafael Perlo.

Las actividades realizadas fueron:

- Investigación bibliográfica acerca de los modelos de difusión de especies y coeficientes de difusión, como también el estudio de trabajos similares realizados en el proyecto.
- Aprendizaje del software Ansys Fluent: Agregar geometrías, mallado y simulación fluidodinámica.
- Familiarización con las librerías de Fluent definidas por el usuario (UDFs), su desarrollo e implementación.
- Simulaciones de difusión entre especies para mezclas compuestas por 95% He y 5% de un gas de proceso, los cuales fueron UF_6 y $UF_6 - SF_6$. Se utilizaron diferentes proporciones de los isótopos de UF_6 en el primer caso, como así también de SF_6 y UF_6 en el segundo caso. Dichas simulaciones se realizaron en modelos binarios y ternarios.
- Estudio de los modelos de difusión binario y ternario desarrollados en el proyecto.
- Estudio de simplificaciones para el modelo ternario.
- Desarrollo e implementación de un modelo de difusión ternaria con una componente muy diluida.

- Elección de geometría y casos de estudio.
- Simulación de los casos propuestos.
- Análisis de los resultados obtenidos y comparación de modelos.
- Conclusión del trabajo y recomendaciones para trabajos a futuro.

Bibliografía

- [1] Chapman, S., Cowling, T. G. Cambridge mathematical library: The mathematical theory of non-uniform gases: An account of the kinetic theory of viscosity, thermal conduction and diffusion in gases. Cambridge, England: Cambridge University Press, 1970. [3](#), [23](#), [24](#)
- [2] Ehrfeld, W. Elements of Flow and Diffusion Processes in Separation Nozzles. Springer Berlin Heidelberg, 1983. [5](#)
- [3] Morgan, N. M. Estudio de modelos de difusión de especies en mezcla de gases. Proyecto integrador de fin de carrera, Instituto Balseiro, 2020. [5](#), [11](#), [12](#), [23](#), [26](#), [35](#), [36](#)
- [4] Mardones, C. J. Comparación teórico experimental de flujos en toberas en régimen supersónico. Proyecto integrador de fin de carrera, Instituto Balseiro, 2023. [6](#)
- [5] Frigerio, L. J. Modelado de gases en flujo compresible en expansiones libres. Proyecto integrador de fin de carrera, Instituto Balseiro, 2019. [12](#), [23](#), [24](#)
- [6] Shapiro, A. H. The dynamics and thermodynamics of compressible fluid flow, volume 1. Nashville, TN: John Wiley & Sons, 1953. [15](#)
- [7] User's guide. Ansys Fluent 16.0. ANSYS Inc. 2016. [15](#), [16](#), [17](#), [19](#), [24](#)
- [8] White, F. M. Fluid Mechanics. 8^a ed^{ón}. New York, NY: McGraw-Hill Professional, 2015. [16](#)
- [9] Córdoba, A. Estudio de modelos de clusterización en mezclas de gases. Proyecto integrador de fin de carrera, Instituto Balseiro, 2021. [17](#)
- [10] DeWitt, R. Uranium hexafluoride: A survey of the physicochemical properties. **1** (1), 8 1960. [18](#)
- [11] De La Iglesia, G. M. Caracterización de procesos separativos en mezclas de gases. Proyecto integrador de fin de carrera, Instituto Balseiro, 2022. [23](#), [36](#)

- [12] Perlo, L. R. Modelado de gases en flujo compresible en toberas y expansiones. Proyecto integrador de fin de carrera, Instituto Balseiro, 2018. [24](#)
- [13] Cussler, E. L. Cambridge Series in Chemical Engineering: Diffusion: Mass Transfer in Fluid Systems. 3^a ed^{ón}. Cambridge, England: Cambridge University Press, 2009. [29](#)

Agradecimientos

Le agradezco al Instituto Balseiro por haberme dado la oportunidad de estudiar Ingeniería Mecánica.

Agradezco a mis directores, José 'El Pampa' González y Leandro 'Take' Perlo, por haber estado siempre disponibles para ayudarme y guiarme en este proyecto y por ser tan buenas personas conmigo.

Le agradezco a mi familia por haberme apoyado en todo momento en este camino que he elegido.

Soy un agradecido de tener amigos como los que tengo, que me han acompañado en todo momento y me han ayudado a crecer como persona. Particularmente, quiero agradecerle a Ignacio 'Nacho' Larramendy por los días de mucho calor que pasábamos estudiando juntos durante Enero y Febrero de 2020 para preparar el ingreso. Sin él, nunca me hubiera decidido a entrar al Instituto.

