

ESCOLA POLITÉCNICA DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
RENATA RAMOS RODRIGUES DE PAULA

**MODELAGEM MATEMÁTICA INTEGRAL DE SISTEMAS DE
SEPARAÇÃO ISOTÓPICA**

SÃO PAULO

2022

ESCOLA POLITÉCNICA DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
RENATA RAMOS RODRIGUES DE PAULA

**MODELAGEM MATEMÁTICA INTEGRAL DE SISTEMAS DE
SEPARAÇÃO ISOTÓPICA**

VERSÃO CORRIGIDA

Tese apresentada à Escola Politécnica da Universidade de São Paulo para obtenção do título de Doutora em Ciências

SÃO PAULO

2022

ESCOLA POLITÉCNICA DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
RENATA RAMOS RODRIGUES DE PAULA

**MODELAGEM MATEMÁTICA INTEGRAL DE SISTEMAS DE
SEPARAÇÃO ISOTÓPICA**

VERSÃO CORRIGIDA

Tese apresentada à Escola Politécnica da Universidade de São Paulo para obtenção do título de Doutora em Ciências

Área de Concentração:
Engenharia Química

Orientador:
Dr. Roberto Guardani

SÃO PAULO

2022

Autorizo a reprodução e divulgação total ou parcial deste trabalho, por qualquer meio convencional ou eletrônico, para fins de estudo e pesquisa, desde que citada a fonte.

Este exemplar foi revisado e corrigido em relação à versão original, sob responsabilidade única do autor e com a anuência de seu orientador.

São Paulo, 02 de Maio de 2022

Assinatura do autor: Renata R de Paula

Assinatura do orientador: Aberto Luciani.

Catálogo-na-publicação

de Paula, Renata Ramos Rodrigues
Modelagem Matemática Integral de Sistemas de Separação Isotópica / R.
R. R. de Paula -- versão corr. -- São Paulo, 2022.
134 p.

Tese (Doutorado) - Escola Politécnica da Universidade de São Paulo.
Departamento de Engenharia Química.

1.separação isotópica 2.cascata 3.modelagem 4.centrifuga I.Universidade
de São Paulo. Escola Politécnica. Departamento de Engenharia Química II.t.

Agradecimentos

Ao Doutor Roberto Guardani pela orientação e pela atenção que dedicou a este trabalho.

À Doutora Sylvana C. P. Migliavacca por me ensinar os fundamentos da teoria de separação isotópica e me auxiliar em cada passo do meu aprendizado durante o desenvolvimento deste trabalho.

Ao Centro Tecnológico da Marinha em São Paulo (CTMSP) e à Diretoria de Desenvolvimento Nuclear da Marinha (DDNM), pelo desenvolvimento profissional que me proporcionam diariamente.

A minha família, em especial minha mãe, Teresa, e meu pai, Claudio, pelo apoio que me deram durante esta jornada e por me ensinarem a importância do conhecimento.

"A alegria de ver e compreender é a mais bela dádiva da natureza"

Albert Einstein

Resumo

Segundo a *World Nuclear Association*, atualmente 100% do enriquecimento de combustível nuclear para fins comerciais ocorre em centrífugas a gás (*World Nuclear Association 2020*), que são agrupadas em série e paralelo num equipamento chamado de "cascata".

A modelagem matemática clássica de cascatas, segundo a literatura (Villani 1979; Portoghese 2002), utiliza hipóteses simplificadoras de modo a diminuir o número de variáveis calculadas e obter um algoritmo de rápida resolução. Entre elas está a hipótese de centrífugas operando de forma semelhante dentro de um mesmo estágio.

Dependendo do projeto e das condições operatórias da cascata, esta hipótese pode não ser consistente com a realidade, provocando desvios significativos entre variáveis calculadas e experimentais.

Este estudo propõe um modelo matemático robusto que inclui os cálculos de condições operatórias e desempenho de centrífugas ao longo de cada estágio e, portanto, é capaz de fornecer resultados precisos em casos não contemplados pelas hipóteses do modelo clássico.

Através do modelo proposto, foi possível obter mapas completos das variáveis ao longo da tubulação e fornecer informações não contempladas pelo modelo clássico. Estas informações permitem conhecimento profundo do processo sem o custo da instalação de sensores adicionais.

O modelo proposto permitiu também verificar a dependência da queda de pressão e do poder separativo de um estágio com o número de centrífugas que o compõe. Através desta análise, foi possível entender como estágios longos podem impactar o desempenho separativo total de uma cascata.

Palavras-Chave – separação isotópica, cascata, modelagem, centrífuga.

Abstract

According to the World Nuclear Association, all of the world's commercial nuclear fuel enrichment occurs in gas centrifuges, which are connected in parallel and in series to make up "cascades".

The traditional mathematical modelling of cascades, according to literature (Villani 1979; Portoghese 2002), makes some simplifying assumptions to reduce the number of variables to be calculated. One of such assumptions is the equality of operating conditions among centrifuges in the same stage.

This hypothesis might not be consistent with reality for some cascade designs, which causes calculated and measured variables to diverge.

This study proposes a new and more robust mathematical model that calculates operating conditions and separative power for each centrifuge in the cascade and, therefore, is capable of supplying information that the traditional model does not contemplate.

The proposed model allowed for complete mapping of the variables along the pipe, as well as other information not addressed by traditional models. This information, in turn, provides a deep understanding of the ongoing processes, without the need for additional sensors.

The model proposed in this study has also proved capable of determining how pressure drop and separative power in a stage vary with the number of centrifuges within it. It was therefore possible to develop an understanding of the impact of longer stages on the overall separative performance of a cascade.

Keywords – *isotope separation, cascade, modelling, centrifuge.*

Lista de Figuras

1.1	Evolução dos modelos de cascatas para mistura binárias	17
3.1	Reação de fissão nuclear em cadeia	19
3.2	Representação de enriquecimento em centrífuga a gás (Centrus 2020)	20
3.3	Cascata de separação isotópica em Piketon, Ohio, em 1984 (U.S. Department of Energy 2021)	21
3.4	Usina nuclear Angra 2 (Revista Mineração e Sustentabilidade 2021) . .	21
3.5	Variáveis de separação para um separador genérico	24
3.6	Célula de enriquecimento por difusão gasosa (Ragheb 2007)	27
3.7	Exemplo de cascata de difusão gasosa (Ragheb 2007)	28
3.8	Conceito geral dos processos de LIS (Hore-Lacy 2016)	29
3.9	Nações detentoras da tecnologia de centrifugação a gás para enriquecimento de urânio	30
3.10	Gradiente radial de concentração criado pela centrífuga	31
3.11	Contracorrente e gradiente axial de concentração em uma centrífuga .	32
3.12	Associação em paralelo de centrífugas formando um estágio	33
3.13	Representação esquemática de um estágio	33
3.14	Cascata: associação de estágios em série	34
4.1	Regimes de escoamento dentro de uma centrífuga	37
4.2	Distribuição de velocidades na superfície cilíndrica de uma centrífuga (Borman et al. 2016)	38
4.3	Variáveis de entrada e saída de uma centrífuga	38
4.4	Variáveis de vazão de alimentação da centrífuga, G , e do estágio, F . .	39
4.5	Pressões dentro de um estágio determinam o funcionamento das centrífugas localmente ao mesmo tempo que também são influenciadas por elas.	40
4.6	δU e pW para vazão de alimentação fixa $G = 500$ kg/a	43
4.7	δU e pW para pressão de produto fixa $pP = 10$ mbar	44
4.8	δU e pW para corte fixo $\Theta = 0,5$	44
5.1	Esquema da tubulação de processo em três estágios consecutivos . . .	48

5.2	Modelagem matemática clássica de cascatas: as variáveis de entrada são a estrutura da cascata (N, N_k, dow_k), a corrente de alimentação (F e z_F) e as aberturas das válvulas de produto e rejeito (dop e dow).	53
5.3	Balanços de massa total e parcial em um estágio qualquer	56
6.1	Fluxograma para algoritmo de modelagem da cascata com perda de carga	64
6.2	Esquema da tubulação de alimentação do estágio genérico k	65
6.3	A inicialização dos cortes fornece as vazões que entram e saem de cada estágio	66
6.4	Diagrama do algoritmo para cálculo na tubulação de alimentação . . .	68
6.5	Diagrama do algoritmo para cálculo nas tubulações de produto e rejeito	71
6.6	Composições do estágio de alimentação: existem apenas duas por estágio, uma da corrente da direita e outra da esquerda	74
6.7	Centrífugas em um cascata são geralmente dispostas em formato de colunas	80
6.8	Restrições em uma cascata onde o escoamento é crítico ($Mach = 1$) . .	81
6.9	Representação gráfica do método do ponto fixo (Solomon 2015)	84
7.1	Mapa de escoamento para a cascata modelo. As regiões em laranja indicam regime de escoamento de transição segundo Reynolds	91
7.2	Mapa de pressões, em mbar, para a cascata modelo.	93
7.3	Pressões no estágio 1 da cascata modelo.	94
7.4	Pressões no estágio 2 da cascata modelo.	94
7.5	Pressões no estágio 3 da cascata modelo.	95
7.6	Pressões no estágio 4 da cascata modelo.	95
7.7	Pressões no estágio 5 da cascata modelo.	96
7.8	Pressões no estágio 6 da cascata modelo.	96
7.9	Pressões no estágio 7 da cascata modelo.	97
7.10	Pressões no estágio 8 da cascata modelo.	97
7.11	Pressões no estágio 9 da cascata modelo.	98
7.12	Pressões no estágio 10 da cascata modelo.	98
7.13	Mapa de operação das centrífugas para a cascata modelo	100
7.14	Vazões de alimentação e cortes no estágio 1 da cascata modelo.	101

7.15 Vazões de alimentação e cortes no estágio 2 da cascata modelo.	101
7.16 Vazões de alimentação e cortes no estágio 3 da cascata modelo.	102
7.17 Vazões de alimentação e cortes no estágio 4 da cascata modelo.	102
7.18 Vazões de alimentação e cortes no estágio 5 da cascata modelo.	103
7.19 Vazões de alimentação e cortes no estágio 6 da cascata modelo.	103
7.20 Vazões de alimentação e cortes no estágio 7 da cascata modelo.	104
7.21 Vazões de alimentação e cortes no estágio 8 da cascata modelo.	104
7.22 Vazões de alimentação e cortes no estágio 9 da cascata modelo.	105
7.23 Vazões de alimentação e cortes no estágio 10 da cascata modelo.	105
7.24 Tubulação de alimentação do estágio genérico k	107
7.25 Cenário 1 - Perda de carga percentual em função da quantidade de centrífugas num estágio sob escoamento laminar	110
7.26 Cenário 2 - Perda de carga percentual em função da quantidade de centrífugas num estágio com regime de escoamento variável	112
7.27 Cenário 2 - Pressão e Re na tubulação de alimentação de um estágio com 40 centrífugas e $G_{nom} = 2500$ kg/a. A área em cinza determina a região onde o escoamento é laminar.	113
7.28 Razão da pressão local pela pressão média de alimentação, produto e rejeito num estágio com 40 centrífugas e $G_{nom} = 2500$ kg/a. As pressões locais determinam as condições operacionais das centrífugas em cada ponto.	114
7.29 Poder separativo individual das centrífugas num estágio com $G_{nom} = 2500$ kg/a. O modelo clássico não faz distinção nas condições de operação de centrífugas num mesmo estágio.	115
7.30 Poder separativo individual das centrífugas num estágio com $G_{nom} = 2500$ kg/a. O modelo clássico não faz distinção nas condições de operação de centrífugas num mesmo estágio.	116
7.31 Poder separativo individual das centrífugas no estágio 1 da cascata modelo.	118
7.32 Poder separativo individual das centrífugas no estágio 2 da cascata modelo.	118

7.33 Poder separativo individual das centrífugas no estágio 3 da cascata modelo. O estágio 3 é o estágio de alimentação da cascata. Por essa razão existe uma alteração da pressões no meio do estágio, o que resulta na diferença de perfil da curva de δU em relação aos demais estágios. . .	119
7.34 Poder separativo individual das centrífugas no estágio 4 da cascata modelo.	119
7.35 Poder separativo individual das centrífugas no estágio 5 da cascata modelo.	120
7.36 Poder separativo individual das centrífugas no estágio 6 da cascata modelo.	120
7.37 Poder separativo individual das centrífugas no estágio 7 da cascata modelo.	121
7.38 Poder separativo individual das centrífugas no estágio 8 da cascata modelo.	121
7.39 Poder separativo individual das centrífugas no estágio 9 da cascata modelo.	122
7.40 Poder separativo individual das centrífugas no estágio 10 da cascata modelo.	122

Lista de Tabelas

3.1	Exemplos de isótopos de alguns elementos e sua abundância na natureza (Portoghese 2002; Szady 1989)	22
5.1	Notação das variáveis de um estágio genérico	48
5.2	Dados de entrada do modelo clássico	54
5.3	Dados de saída do modelo clássico	55
6.1	Dados de entrada do modelo proposto	61
6.2	Dados de saída do modelo proposto	62
7.1	Configuração da cascata para validação do modelo proposto	87
7.2	Condições nominais de operação para a cascata de validação do modelo	88
7.3	Composições e desempenho calculados através do modelo clássico e do proposto para a cascata de validação	88
7.4	Configuração da cascata modelo	89
7.5	Condições operatórias e variáveis de projeto selecionadas para a cascata modelo	89
7.6	Cenário 1 - Condições operatórias e variáveis de projeto testadas para um estágio genérico	111
7.7	Cenário 2 - Condições operatórias e variáveis de projeto testadas para um estágio genérico	111
7.8	Composições e desempenho calculados através do modelo clássico e do proposto	117

Lista de Abreviaturas e Siglas

LIS - *Laser Isotope Separation*

SILEX - *Separation of Isotopes by Laser Excitation*

CFD - *Computational Fluid Dynamics*

SPLG - *Workshop on Separation Phenomena in Liquids and Gases*

Lista de Símbolos

D	Diâmetro da tubulação dos estágios
dop	Diâmetro da restrição de saída de produto
dow_k	Diâmetro das restrições interestágios ou da saída de rejeito do estágio k
F	Vazão de alimentação da cascata
$F_{k,i}$	Vazão de alimentação do estágio k na região da centrífuga i
$G_{k,i}$	Vazão de alimentação da centrífuga i no estágio k
$G = f_3(pF)$	Relação entre a vazão e a pressão de alimentação para a centrífuga
i_{alim}	Posição da alimentação no maior estágio
$L_{k,i}$	Comprimento equivalente da tubulação entre duas centrífugas adjacentes
N	Número total de estágios
N_k	Número de centrífugas no estágio k
P	Vazão de produto da cascata
$P_{k,i}$	Vazão de produto do estágio k na região da centrífuga i
$pF_{k,i}$	Pressão de alimentação da centrífuga i no estágio k
$pP_{k,i}$	Pressão de produto da centrífuga i no estágio k
$pW_{k,i}$	Pressão de rejeito da centrífuga i no estágio k
$pW = f_2(pP, \Theta, G)$	Modelo de pressão de rejeito para a centrífuga
S	Número de estágios na seção de recuperação
T_{amb}	Temperatura ambiente
W	Vazão de rejeito da cascata

$W_{k,i}$	Vazão de rejeito do estágio k na região da centrífuga i
$x_{k,i}$	Composição de rejeito da centrífuga i no estágio k
x_W	Composição do rejeito da cascata
$y_{k,i}$	Composição de produto da centrífuga i no estágio k
y_P	Composição do produto da cascata
$z_{k,i}$	Composição de alimentação da centrífuga i no estágio k
z_F	Composição da alimentação da cascata
$\alpha_{k,i}$	Fator de separação da centrífuga i no estágio k
$\beta_{k,i}$	Fator de enriquecimento da centrífuga i no estágio k
$\beta = f_1(pP, \Theta, G)$	Modelo de fator de enriquecimento para a centrífuga
$\gamma_{k,i}$	Fator de empobrecimento da centrífuga i no estágio k
$\delta U_{k,i}$	Poder de separação da centrífuga i no estágio k
$\Theta_{k,i}$	Corte da centrífuga i no estágio k

Sumário

1	Introdução	15
2	Objetivos	18
3	Revisão Bibliográfica	19
3.1	Enriquecimento de Urânio e Produção de Energia Nuclear	19
3.2	Separação Isotópica	21
3.3	Teoria de Separadores	23
3.4	Difusão Gasosa	26
3.5	Separação Isotópica por Laser	29
3.6	Ultracentrífugas a Gás	30
3.7	Cascatas de Ultracentrífugas	32
4	Modelagem Matemática de Ultracentrífugas	36
4.1	Visão Geral	36
4.2	Variáveis de Operação	38
4.3	Centrífuga Modelo	41
5	Modelagem Matemática de Cascatas	46
5.1	Visão Geral	46
5.2	Cascata Ideal	47
5.3	Cascata Quase-Ideal (Modelo Clássico)	52
6	Cascata Integral (Modelo Proposto)	60
6.1	Visão Geral	60
6.2	Dados de Entrada	61
6.3	Dados de Saída	62
6.4	Hipóteses	63
6.5	Algoritmo de Cálculo	64
6.6	ETAPA I: Fluidodinâmica	65
6.7	ETAPA II: Separação Isotópica	74
6.8	Análise do Escoamento	76
6.9	Cálculo da Perda de Carga	78

6.10 Método Numérico	83
7 Resultados e Discussão	87
7.1 Validação do Modelo	87
7.2 Apresentação dos Resultados Completos	88
7.3 Gradiente de Pressão na Tubulação	106
7.4 Desempenho Separativo do Estágio	114
7.5 Desempenho Separativo da Cascata	116
8 Conclusões	123

1 Introdução

O processo de enriquecimento de urânio consiste da elevação da proporção do isótopo ^{235}U em relação ao isótopo ^{238}U , que se encontram na natureza nas proporções aproximadas de 0,711% e 99,289% em massa, respectivamente (Migliavacca 1999).

O enriquecimento pode ser realizado de diferentes formas, sendo a principal delas através de cascatas de separação isotópica por ultracentrífugas a gás.

Uma única ultracentrífuga não é capaz de enriquecer quantidades comercializáveis de urânio até a concentração de 4%, que é a necessária para uso em combustíveis para reatores nucleares. Portanto associa-se uma grande quantidade de ultracentrífugas em série e em paralelo no processo de enriquecimento. A essa associação dá-se o nome de cascata.

A teoria de cascatas de separação isotópica foi desenvolvida nos anos de 1950 e descrita por Karl Cohen (Cohen 1951). Em seu trabalho, Cohen assumiu que o urânio natural era uma mistura de apenas dois isótopos diferentes: ^{235}U e ^{238}U , desprezando isótopos como o ^{234}U , cuja concentração em porcentagem molar é em torno de 0,0054% (Axelsson, Fischer e Penkin 2009).

Cohen também criou a definição de "cascata ideal" de modo a simplificar significativamente os modelos matemáticos e, portanto, o cálculo de otimização dos processos separativos (Sulaberidze et al. 2020). Em uma cascata ideal, os fatores de separação de diferentes estágios são iguais e as correntes que se misturam possuem concentrações iguais dos compostos, situação que ficou conhecida como "condição de não-mistura".

Na cascata ideal, a performance individual dos elementos separativos dentro de um estágio não é abordada, uma vez que eles estão representados pelo fator de separação do estágio como um todo.

Em 1973, Laguntsov contribuiu com o desenvolvimento do modelo proposto por Cohen ao incluir enriquecimentos arbitrários para cada estágio dentro da cascata,

ainda sob a condição de não-mistura (Laguntsov 1973). Este foi o primeiro tratamento matemático de uma cascata quase-ideal para uma mistura binária.

Palkin (1997) acrescentou ao modelo de Laguntsov a possibilidade de mistura de correntes com concentrações próximas, mas não necessariamente iguais, e otimizou as condições operatórias a partir do seu modelo.

Portoghese (2002) baseou-se no mesmo conceito de estágios com fatores de separação não-constantes e desenvolveu uma série de modelos matemáticos considerando diferentes hipóteses para a obtenção dos fatores de separação do estágios. O modelo semi-empírico de Portoghese é uma das principais referências deste estudo para o cálculo de condições operatórias de cascatas de misturas binárias com coeficientes de separação específicos para diferentes estágios.

Os estudos de cascata que se seguiram desde então evoluíram no sentido de abranger os cálculos para misturas de multicomponentes isotópicos (Garza, Garret e Murphy 1961; Kucherov e Minenko 1965; Sulaberidze e Borisevich 2001; Palkin, Sbitnev e Frolov 2002; von Halle 1987; Song et al. 2010) ou no sentido de tratar o processo em regime transiente (Orlov, Ushakov e Sovach 2016; Orlov, Ushakov e Sovach 2018; Cao et al. 2004).

No entanto, até o momento, nenhum deles abordou o desempenho e as condições operatórias de cada elemento separativo, apenas de cada estágio como se fosse um elemento separativo único. A razão seria a complexidade de tal tratamento matemático.

Este estudo propõe um modelo matemático de cascatas integral, que visa a fornecer uma visão completa das condições operatórias e performance separativa de cada elemento dentro de uma cascata operando em regime permanente com mistura binária de isótopos. No modelo proposto não foi imposta a condição de não-mistura, tornando ele capaz de representar situações de operação não necessariamente próximas da idealidade. Como mostra a figura 1.1, ele é um avanço obtido a partir de desenvolvimentos anteriores, com a eliminação gradual de hipóteses simplificadoras.

Através da validação do cálculos, pode-se demonstrar que o novo modelo

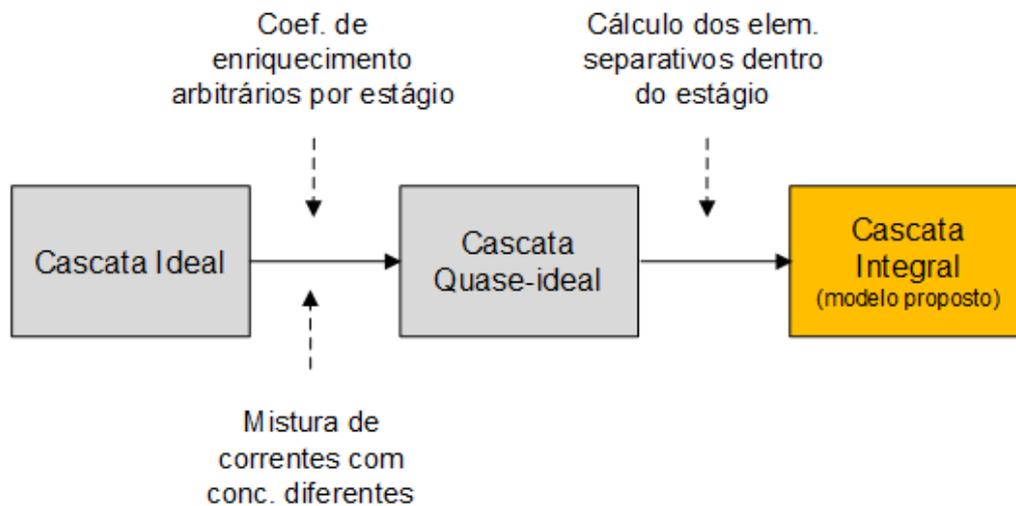


Figura 1.1: Evolução dos modelos de cascatas para mistura binárias

diminui significativamente desvios sistemáticos em comparação com os observados pelo modelo de cascata quase-ideal de Portoghese, aqui tratado por "modelo clássico".

Cabe notar que, desde 1960, a pesquisa e desenvolvimento em ultracentrífugas para enriquecimento isotópico tornou-se sigilosa através de um acordo entre Estados Unidos, Alemanha, Inglaterra e Holanda. Por esta razão, existem poucos dados experimentais disponíveis em literatura aberta para validar os modelos matemáticos de cascata e centrífugas (Glaser 2008).

Assim sendo, a literatura científica da área faz uso dos modelos teóricos anteriores para comparar com os desenvolvimentos atuais (Smirnov et al. 2017; Palkin 2013; Smirnov e Sulaberidze 2014) e assim possibilitar publicação de resultados e desenvolvimento contínuo da tecnologia.

2 Objetivos

O objetivo deste estudo é desenvolver um modelo matemático para simulação de uma cascata integral. Este modelo é capaz de calcular as condições operatórias e a performance de cada elemento separativo dentro de uma cascata de enriquecimento isotópico.

Ele é capaz de fornecer informações locais que geralmente não são obtidas nos processos reais devido ao alto custo de instalação de sensores em pontos variados da tubulação. Em posse destas informações, o engenheiro pode determinar condições operatórias que aumentem a performance da cascata e a vida útil dos equipamentos.

O modelo proposto de cascata integral difere dos modelos matemáticos desenvolvidos até então por abordar os elementos separativos individualmente e não os estágios, associações em paralelo de vários elementos, como se fossem um elemento único.

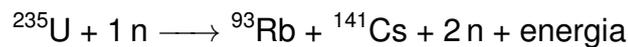
Desta forma, o objetivo pode ser dividido em duas etapas:

1. Desenvolver um modelo matemático integral de simulação para cascatas com foco na operação e performance dos elementos separativos;
2. Utilizar o modelo para uma análise de sensibilidade de variáveis de operação e projeto sobre as pressões dos estágios e o desempenho das centrífugas.

3 Revisão Bibliográfica

3.1 Enriquecimento de Urânio e Produção de Energia Nuclear

Energia nuclear é produzida através da fissão de um núcleo atômico. Abaixo está a reação de fissão de um átomo de urânio de massa atômica 235:



A energia liberada é usada para aquecer água e gerar vapor que gira turbinas, convertendo energia cinética em elétrica.

Esta reação gera outros dois nêutrons livres, que colidirão com mais dois núcleos, causando duas novas fissões e liberando mais dois nêutrons cada. Por esta razão, se trata de uma reação em cadeia, conforme representado na figura 3.1.

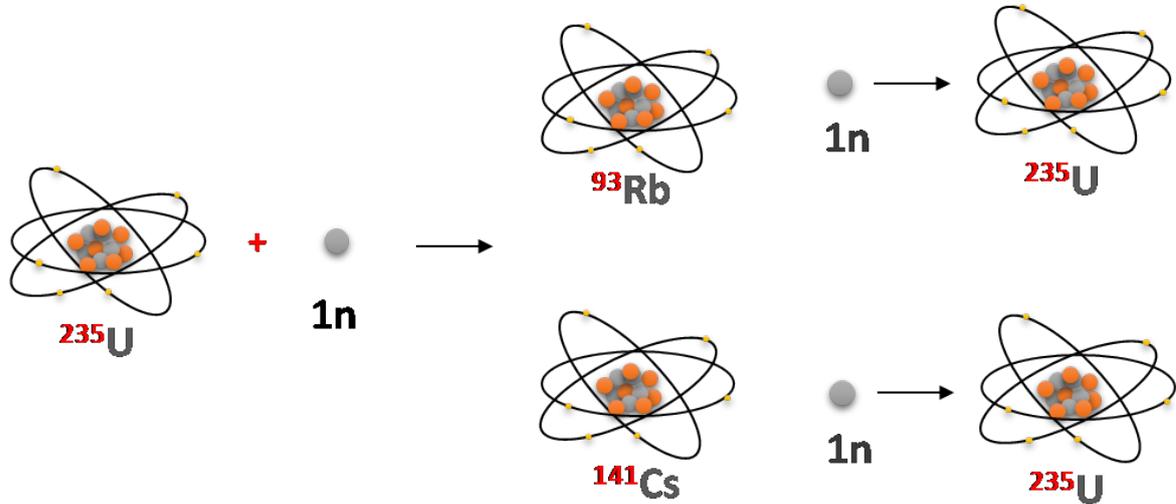


Figura 3.1: Reação de fissão nuclear em cadeia

Apenas átomos físséis são capazes de participar desta reação. Um átomo físsil é, em princípio, um átomo com núcleo grande o suficiente de forma que a energia de ligação dos núcleons é da mesma ordem de grandeza que a energia gerada pelo efeito Coulomb proveniente da repulsão entre as cargas positivas dos prótons.

Assim, quando uma pequena energia é acrescentada, por exemplo a energia

cinética do nêutron que colide com o urânio na reação, o núcleo se desestabiliza e fissiona (Krane 2016).

O isótopo do urânio de massa 235 é o isótopo físsil usado na geração de energia nuclear. Para uso em reatores nucleares, que geram energia elétrica, a composição de ^{235}U necessária é de 3 a 4% (Heriot 1988).

O processo de enriquecimento de urânio consiste da elevação da proporção de ^{235}U em relação ao ^{238}U , que se encontram na natureza nas proporções aproximadas de 0,711% e 99,289% em massa, respectivamente (Migliavacca 1999).

Este enriquecimento pode ser realizado através de métodos como a centrifugação a gás, a difusão gasosa e a separação isotópica por laser. Dentre eles, o mais comum é o processo de centrifugação a gás, conforme figura 3.2.

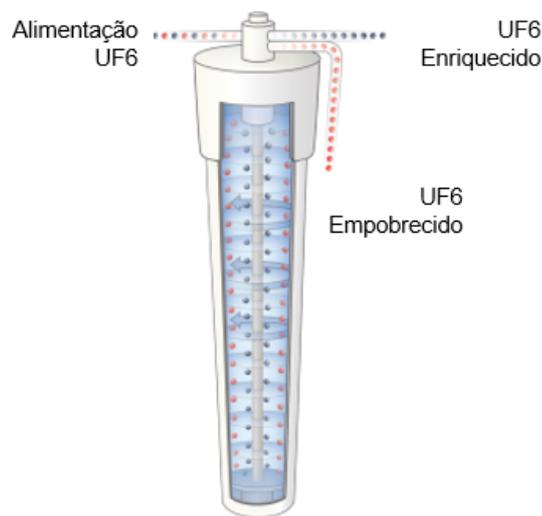


Figura 3.2: Representação de enriquecimento em centrífuga a gás (Centrus 2020)

Dentro da centrífuga, os isótopos se concentram em regiões diferentes devido à diferença de massa atômica. Assim é possível inserir coletores que extraíam vazões enriquecidas e depletadas em ^{235}U .

Como uma única ultracentrífuga não é capaz de enriquecer quantidades comercializáveis de urânio até a concentração de 4%, utiliza-se uma associação delas em série e paralelo chamada de "cascatas de separação isotópica". A figura 3.3 mostra uma cascata americana da década de 80.



Figura 3.3: Cascata de separação isotópica em Piketon, Ohio, em 1984 (U.S. Department of Energy 2021)

Atualmente o Brasil possui cascatas de enriquecimento de urânio para abastecer duas usinas nucleares em operação: Angra 1 e 2 (figura 3.4). Estas usinas são responsáveis por cerca de 3% da energia consumida no país, um quinto do total produzido pela hidrelétrica de Itaipu.

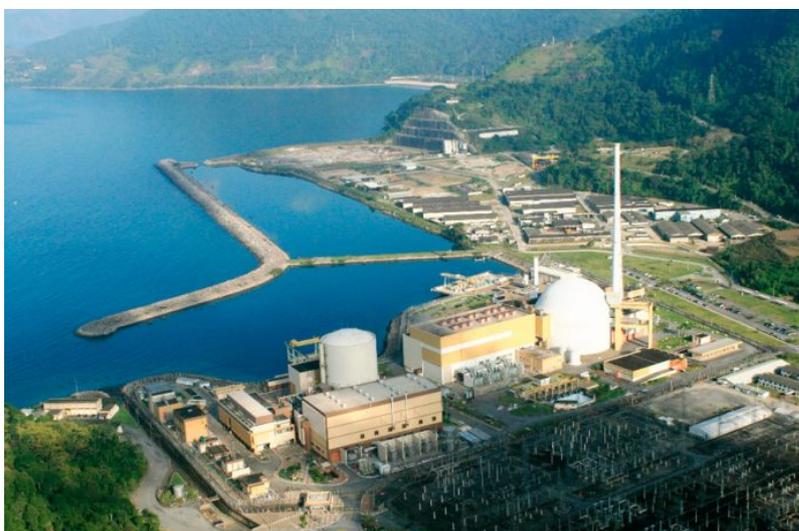


Figura 3.4: Usina nuclear Angra 2 (Revista Mineração e Sustentabilidade 2021)

3.2 Separação Isotópica

Isótopos são elementos atômicos com o mesmo número de prótons, diferentes números de nêutrons e, portanto, diferentes massas atômicas. Eles podem ocorrer

em proporções das mais variadas na natureza. A tabela 3.1 traz alguns exemplos de isótopos e sua abundância.

Tabela 3.1: Exemplos de isótopos de alguns elementos e sua abundância na natureza (Portoghese 2002; Szady 1989)

Elemento Químico	Isótopos	Abundância (% massa)
Urânio	^{234}U	0,006%
	^{235}U	0,711%
	^{238}U	99,283%
Crômio	^{50}Cr	4,41%
	^{52}Cr	83,46%
	^{53}Cr	9,54%
	^{54}Cr	2,61%

Os isótopos possuem uma grande abrangência de aplicações, que vão desde a área médica até a segurança nacional. Alguns exemplos são o ^{232}Th , usado no tratamento contra o câncer, o ^{60}Co , usado em radiografia gama, ^7Li , usado em reatores nucleares, e o ^{14}C , usado na datação de fósseis (Beta Analytic Testing Laboratory 2018; National Isotope Development Center 2018).

Neste estudo, os isótopos de interesse são os de urânio: ^{234}U , ^{235}U e ^{238}U .

O primeiro ocorre em quantidade muito pequena na natureza e, por isso, é geralmente desprezado.

O segundo, que está presente na proporção de 0,711%, é o isótopo físsil do urânio, e portanto é a matéria prima utilizada principalmente como combustível para reatores nucleares.

O terceiro ocorre em quantidades muito maiores, 99,289% em massa, e não é usado em reatores nucleares por não ser físsil como o isótopo ^{235}U (Migliavacca 1999; Portoghese 2002).

Para a aplicação como combustível nuclear para geração de energia elétrica, deve-se aumentar a quantidade do isótopo físsil ^{235}U para valores entre 3 e 4% em massa

(Heriot 1988).

Ao processo que realiza o aumento da concentração do isótopo de interesse dá-se o nome de enriquecimento do urânio. O enriquecimento, portanto, é um tipo de separação isotópica.

Existem três métodos mais comuns de separação de isótopos de urânio (Heriot 1988):

1. Difusão gasosa;
2. Separação isotópica por laser;
3. Centrífugas a gás.

Para melhor entendimento destas tecnologias, uma breve definição de algumas variáveis é dada no próximo item. Nos itens seguintes, o princípio geral de funcionamento de cada uma será abordado.

3.3 Teoria de Separadores

Um separador genérico, como na figura 3.5, possui uma corrente de entrada e duas de saída: produto e rejeito. A espécie química de interesse está mais concentrada na corrente de produto.

A partir das três variáveis de vazão (F , P e W) e das três variáveis de composição (z_f , y_p e x_w), é possível definir as seguintes variáveis e relações algébricas, que são amplamente utilizadas em cálculos separativos:

Razões de abundância: relação entre as composições de dois elementos dentro da mesma corrente numa mistura binária.

$$R_F = \frac{z_f}{1 - z_f} \quad (3.1)$$

$$R_P = \frac{y_p}{1 - y_p} \quad (3.2)$$

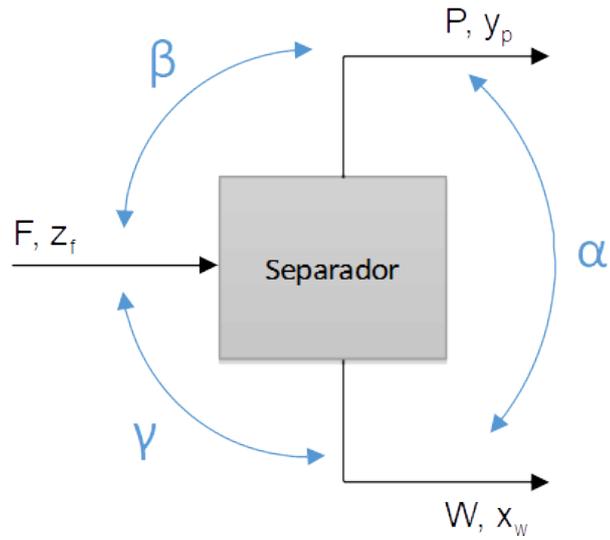


Figura 3.5: Variáveis de separação para um separador genérico

$$R_W = \frac{x_w}{1 - x_w} \quad (3.3)$$

Fator de separação (α): relação entre R_P e R_W

$$\alpha = \frac{R_P}{R_W} \quad (3.4)$$

Fator de enriquecimento (β): relação entre R_P e R_F

$$\beta = \frac{R_P}{R_F} \quad (3.5)$$

Fator de empobrecimento (γ): relação entre R_F e R_W

$$\gamma = \frac{R_F}{R_W} \quad (3.6)$$

Relação entre α , β e γ :

$$\beta \cdot \gamma = \frac{R_P}{R_F} \cdot \frac{R_F}{R_W} \quad (3.7)$$

$$\beta \cdot \gamma = \frac{R_P}{R_W} \quad (3.8)$$

$$\beta \cdot \gamma = \alpha \quad (3.9)$$

Corte (Θ): relação entre P e F

$$\Theta = \frac{P}{F} \quad (3.10)$$

Utilizando o balanço de massa parcial e manipulações algébricas, é possível obter outra definição para o corte.

$$F \cdot z_f = P \cdot y_p + W \cdot x_w \quad (3.11)$$

$$z_f = \frac{P}{F} \cdot y_p + \frac{W}{F} \cdot x_w \quad (3.12)$$

$$z_f = \Theta \cdot y_p + (1 - \Theta) \cdot x_w \quad (3.13)$$

$$\Theta = \frac{z_f - x_w}{y_p - x_w} \quad (3.14)$$

Pode-se também aplicar as definições dos fatores α , β e γ para se obter a seguinte equação:

$$\Theta = \frac{\gamma - 1}{\alpha - 1} \cdot (1 + z_f(\beta - 1)) \quad (3.15)$$

Poder de Separação (δU): é a variável responsável por exprimir quantitativamente a capacidade de separação de um elemento, levando em conta tanto os valores de vazão quanto os de composição das correntes de entrada e saída.

Esta variável foi criada por Dirac em um manuscrito de 1941 que nunca foi

publicado, porém foi citada por Cohen em sua obra (Cohen 1951).

Dirac postulou a existência de uma propriedade abstrata da mistura isotópica chamada "função de valor", $V(\tilde{x})$, que depende apenas da composição molar da mistura. Através da função de valor, pode-se obter o chamado "fluxo de valor", U , para uma corrente, que é simplesmente a função de valor multiplicada pela vazão da corrente.

Assim, a capacidade de separação de um elemento separativo passou a ser definida pelo balanço dos fluxos de valor das correntes de entrada e saída, chamado "poder de separação", conforme expressão 3.16.

$$\delta U = P \cdot V(\tilde{y}_p) + W \cdot V(\tilde{x}_w) - F \cdot V(\tilde{z}_f) \quad (3.16)$$

onde

$$V(\tilde{x}) = (2\tilde{x} - 1) \ln \left(\frac{\tilde{x}}{1 - \tilde{x}} \right) \quad (3.17)$$

3.4 Difusão Gasosa

O fenômeno de difusão gasosa é baseado na diferença da velocidade de escoamento de gases com diferentes massas atômicas através de meios porosos.

Esse fenômeno foi descoberto por Graham em 1829, num estudo experimental em que ele verificou que as moléculas de hidrogênio atravessavam uma placa de platina quatro vezes mais rápido do que as moléculas de oxigênio (Graham 1829; Wisniak 2013).

Em 1919, a difusão gasosa foi aplicada pela primeira vez na separação de isótopos por Lindemann e Aston, utilizando o gás neônio e um tubo de porcelana como meio separador (Lindemann e Aston 1919).

No entanto, o desenvolvimento mais importante neste sentido foi na Segunda Guerra Mundial, nos EUA e na Inglaterra, quando se utilizou a difusão gasosa em larga escala para separar isótopos de urânio na forma do gás UF_6 (Jones 1985).

O processo opera através de células de difusão, como a da figura 3.6, onde o gás de processo entra com pressão elevada e atravessa os poros de uma barreira física, onde ocorre a separação isotópica, para uma região de pressão mais baixa.

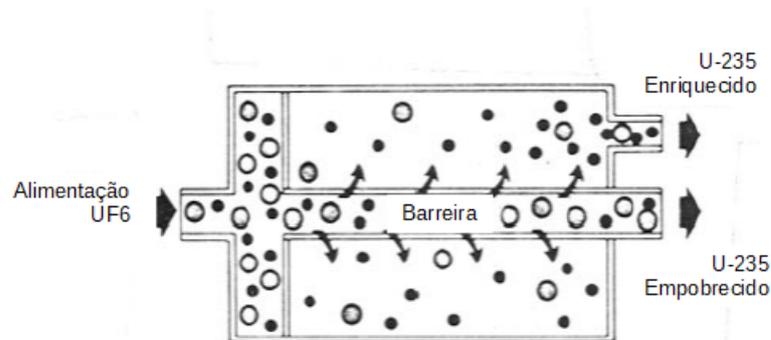


Figura 3.6: Célula de enriquecimento por difusão gasosa (Ragheb 2007)

A eficiência de separação de uma célula de difusão é baixa se comparada com uma centrífuga a gás (α é aproximadamente 1,004 para difusão e maior do que 1,5 para centrifugação, segundo a literatura) (Ragheb 2007; Maier-Komor 2010; Heriot 1988; Fuss 2015).

Portanto é preciso que sejam conectadas várias células em série para resultar numa separação comercialmente interessante. Este arranjo, apresentado na figura 3.7, é chamado de cascata.

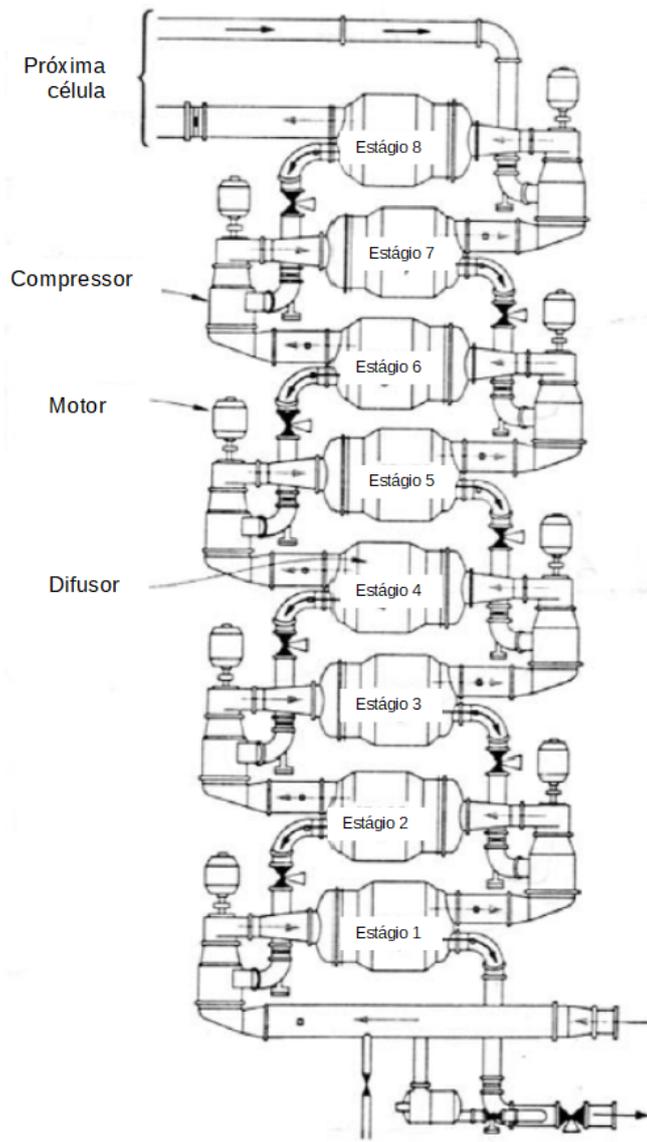


Figura 3.7: Exemplo de cascata de difusão gasosa (Ragheb 2007)

3.5 Separação Isotópica por Laser

Nos anos 70, vários países iniciaram pesquisas na área de separação isotópica por lasers (Laser Isotope Separation – LIS). Devido aos altos custos da tecnologia, nos anos 90 a maioria dos desenvolvimentos foi abandonada, com exceção do método SILEX, Separation of Isotopes by Laser Excitation, que foi desenvolvido na Austrália por Silex Systems Ltd (Fuss 2015; Snyder 2016).

O LIS atraiu interesses no mundo inteiro por ser um processo capaz de altos fatores de separação. Enquanto α para difusão gasosa é em torno de 1,004 e para centrífugas a gás em torno de 1,5, os processos de LIS alcançam valores de 2 a 20 em um único estágio. Ou seja, são processos altamente seletivos (Fuss 2015).

Isso significa que em apenas um único estágio é possível partir do urânio em composição natural e gerar urânio suficientemente enriquecido para uso em reatores nucleares.

No entanto, a maioria dos processos de LIS ainda não foi capaz de produzir urânio enriquecido em quantidades comercialmente ou militarmente viáveis (Mathi et al. 2015). O conceito geral dos processos de LIS é ilustrado na figura 3.8.

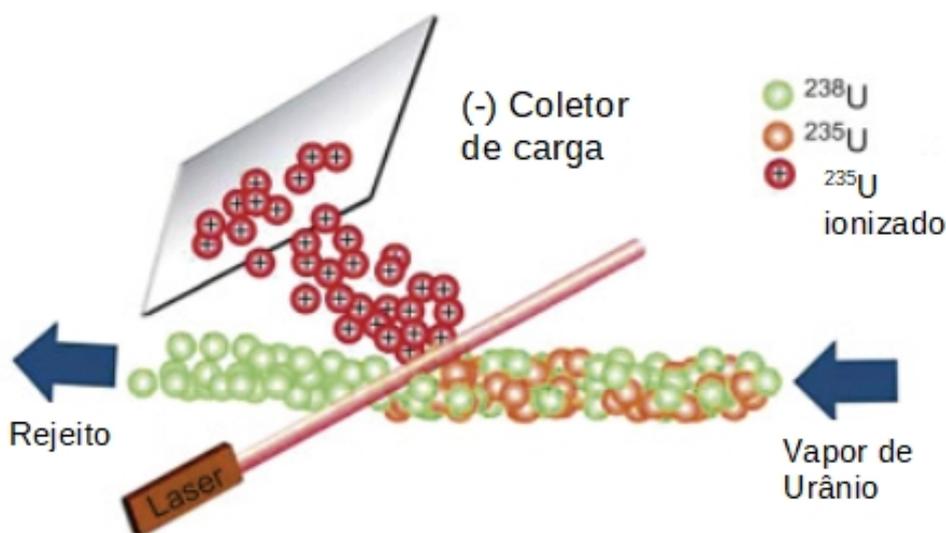


Figura 3.8: Conceito geral dos processos de LIS (Hore-Lacy 2016)

Quando átomos ou moléculas com diferentes composições isotópicas possuem ao menos uma linha espectral não sobreposta, é possível excitar seletivamente

através de laser os átomos ou moléculas de um isótopo de interesse.

A excitação muda as propriedades físicas ou químicas das partículas, o que torna possível a separação dependendo das diferenças existentes entre as partículas excitadas e as não excitadas (Mathi et al. 2015).

Os processos de LIS não serão abordados neste estudo.

3.6 Ultracentrífugas a Gás

Os maiores avanços no processo de centrifugação para separação de isótopos ocorreram a partir do ano de 1953 com a pesquisa do alemão austríaco Gernot Zippe, que resultou em um relatório clássico ORO 315 em 1960 (Heriot 1988).

A centrífuga de Zippe trouxe tamanhos avanços para a área que, em 1960, as principais potências nucleares fizeram um acordo mútuo de sigilo da tecnologia, com o objetivo de evitar proliferação (Heriot 1988; Glaser 2008).

Atualmente, o processo de centrifugação a gás é o mais usual para enriquecimento de urânio no mundo. São 13 as nações detentoras desta tecnologia (*World Nuclear Association 2020*), conforme mostra a figura 3.9.



Figura 3.9: Nações detentoras da tecnologia de centrifugação a gás para enriquecimento de urânio

No processo de centrifugação, os isótopos, na forma do gás UF_6 , são submetidos a uma forte aceleração centrípeta, que provoca maior concentração do isótopo pesado nas paredes e do isótopo leve mais próximo ao eixo, criando um gradiente de concentração radial (Migliorini 2013), como mostra a figura 3.10.

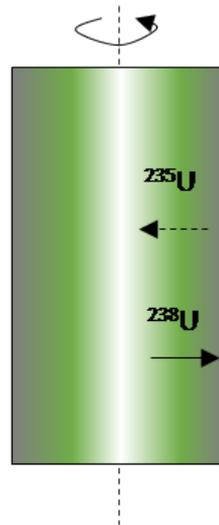


Figura 3.10: Gradiente radial de concentração criado pela centrífuga

Porém, como o efeito separativo do gradiente de concentração radial é muito pequeno, uma vez que a diferença entre as massas dos isótopos é também muito pequena, há ainda a necessidade de introdução de um mecanismo adicional para aprimorar a separação.

Este mecanismo é a contracorrente, que consiste da geração de correntes no sentido axial que carregam o isótopo mais leve para uma das extremidades e o mais pesado para a extremidade oposta, como mostra a figura 3.11.

A criação da contracorrente se dá a partir de quatro fatores elementares (Migliavacca 1999):

1. Introdução da alimentação no centro com retirada de produto e rejeito no topo e no fundo;
2. Aplicação de uma diferença de temperatura nas extremidades superior e inferior do rotor;
3. Existência de um gradiente de temperatura na parede do rotor;

4. Aplicação de uma diferença de pressão nas extremidades superior e inferior.

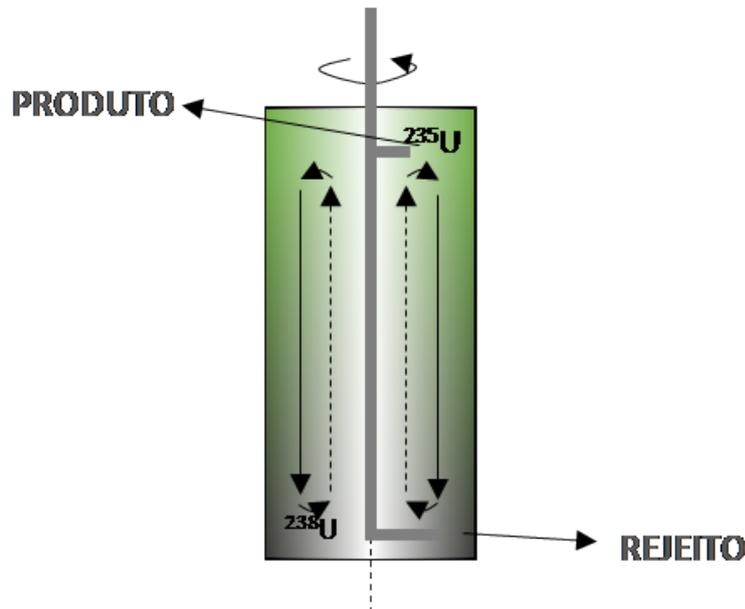


Figura 3.11: Contracorrente e gradiente axial de concentração em uma centrífuga

Nota-se que a gravidade não é um fator que afeta a contracorrente, uma vez que a aceleração gravitacional é desprezível em relação à aceleração centrípeta. Uma descrição mais detalhada da ação dos fatores pode ser encontrada no trabalho de Olander (1981).

3.7 Cascatas de Ultracentrífugas

A centrifugação a gás é, atualmente, o principal processo de enriquecimento de urânio no mundo.

No entanto, o poder de separação isotópica de uma única ultracentrífuga é muito baixo, tanto em termos de massa de produto gerado quanto em termos de concentração do isótopo de interesse no produto (Migliorini 2013). Portanto para a produção em larga escala, deve-se associar um número alto de ultracentrífugas.

Primeiramente, associam-se as centrífugas em paralelo para aumentar a quantidade de material produzido, como mostram as figuras 3.12 e 3.13. Todas as centrífugas da associação em paralelo recebem a mesma alimentação. Seus pro-

duto e rejeitos também são unidos em tubulações comuns. A essa associação de centrífugas em paralelo dá-se o nome de estágio.

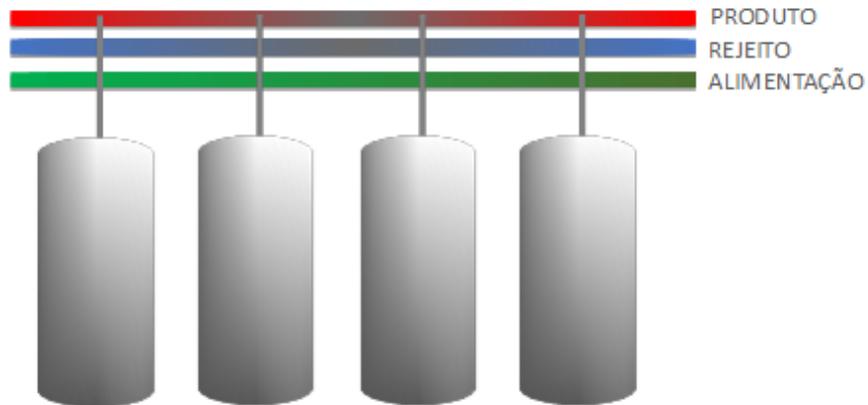


Figura 3.12: Associação em paralelo de centrífugas formando um estágio

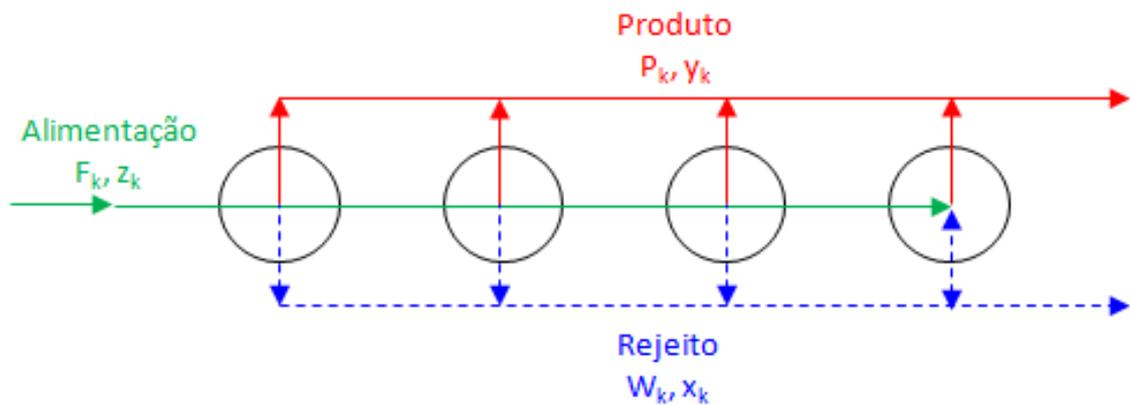


Figura 3.13: Representação esquemática de um estágio

Em seguida, associam-se os estágios em série para aumentar a concentração do isótopo de interesse no produto final. Assim, todo o produto que sai de um estágio alimenta o estágio acima. Todo o rejeito que sai do mesmo estágio alimenta um estágio abaixo.

Portanto, a alimentação de cada estágio é a união do produto do estágio anterior com o rejeito do estágio superior. À cascata composta por esse tipo de associação dá-se o nome de cascata simétrica (Jordan 1992; Portoghese 2002). Uma cascata simétrica de 10 estágios é representada pela figura 3.14.

Existem outras formas de se associar os estágios para formar um tipo de cascata dita “assimétrica”. No entanto este tipo de cascata não é de interesse deste

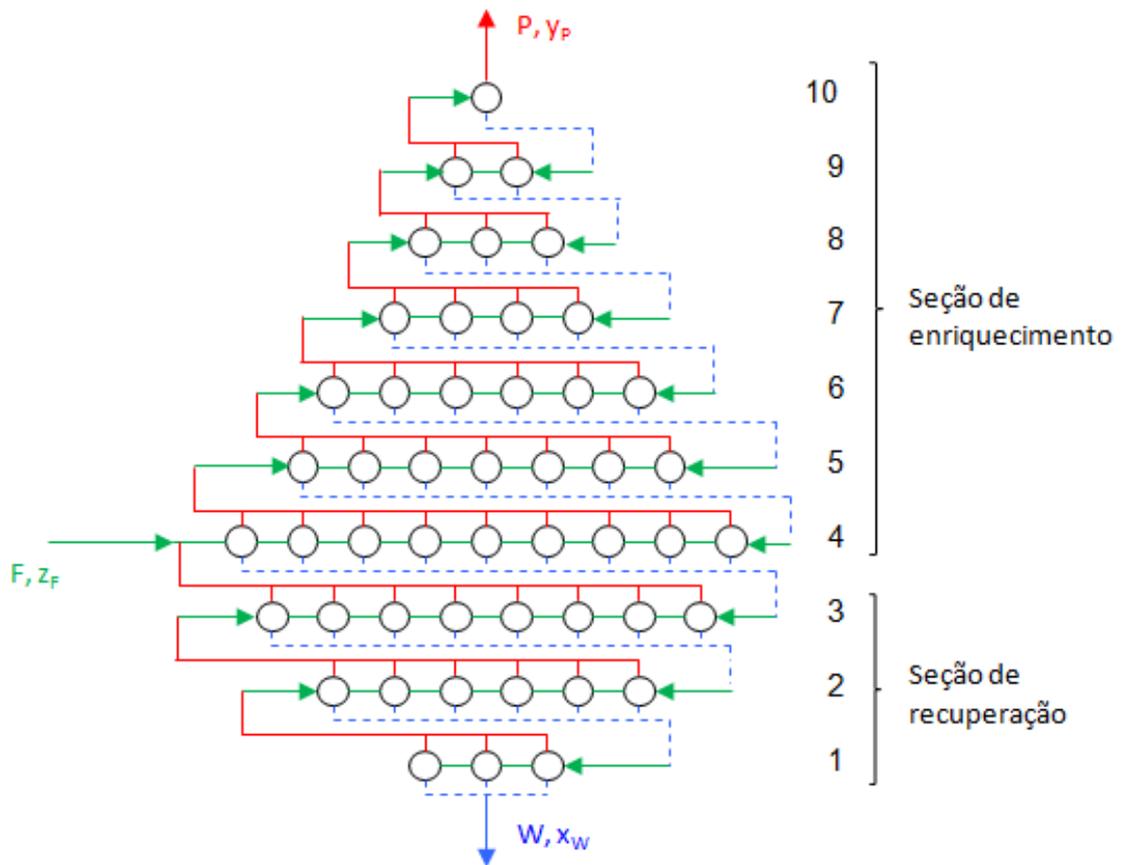


Figura 3.14: Cascata: associação de estágios em série

estudo.

Similarmente às colunas de destilação, a seção acima do estágio de alimentação recebe o nome de seção de enriquecimento. É nesta seção que ocorre de fato o aumento da concentração do isótopo de interesse em relação à concentração da alimentação.

A seção abaixo do estágio de alimentação é a seção de recuperação. Nesta seção o rejeito é gradualmente empobrecido, de forma a se obter um melhor aproveitamento da matéria prima (Jordan 1992).

Nota-se pela figura 3.14 que o número de centrífugas em cada estágio é diferente e a cascata assume a forma de uma "gota". Este formato é resultado do

cálculo segundo a hipótese de "cascata ideal"(Villani 1979).

A teoria de cascata ideal, desenvolvida por Cohen (1951), é utilizada até hoje para a definição do número de estágios e de centrífugas por estágio. Mais detalhes são dados no Capítulo 5.

4 Modelagem Matemática de Ultracentrífugas

4.1 Visão Geral

Dentro de uma centrífuga, os regimes de escoamento variam desde o escoamento contínuo até o molecular.

O primeiro ocorre na região mais próxima à parede, para onde os gases são empurrados e, portanto, onde a densidade é maior. O segundo ocorre próximo ao eixo de rotação, onde existe uma região de vácuo, ou seja, um grande espaçamento entre as moléculas de gás.

A figura 4.1, baseada no trabalho de Jiang & Zeng (2012), apresenta um esquema de como os regimes de escoamento estão distribuídos.

A presença de vários regimes impede que os parâmetros da centrífuga sejam descritos por um único sistema de equações, como as equações de Navier-Stokes, que são aplicadas apenas em regimes viscosos (Jiang e Zeng 2012).

Para as regiões de regime molecular, são necessários modelos que considerem o movimento individual e as colisões de cada molécula, como a equação de Boltzmann (Jiang e Zeng 2012).

Devido à complexidade do sistema, ainda não há uma solução analítica que descreva o caso na sua integralidade, por isso ao longo dos anos foram desenvolvidos modelos simplificados da realidade.

A simplificação mais comum é assumir que a centrífuga seja um cilindro girante sem componentes internos, sem alimentação e sem retirada de produto e rejeito (sistema fechado). A partir disto, assume-se existência de escoamento apenas no sentido axial, gerado pela base do cilindro girando a uma velocidade menor que o corpo. Então aplicam-se as equações de Navier-Stokes para a região de regime viscoso, obtendo-se a solução do perfil de velocidades interno da centrífuga.

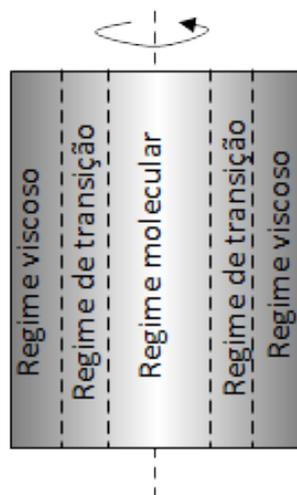


Figura 4.1: Regimes de escoamento dentro de uma centrífuga

Cohen (1951) utilizou esta abordagem em conjunto com a hipótese de gradiente de concentração isotópica na direção radial muito menor que na direção axial. Chegou assim a uma abordagem analítica aproximada para resolução da centrífuga (Cohen 1951; Ratz 1983).

No entanto, devido à imprecisão das soluções analíticas simplificadas, foram desenvolvidas, como segunda alternativa, soluções numéricas através de softwares de CFD (*Computational Fluid Dynamics*).

A solução numérica é também um problema de alta complexidade, devido aos elevados gradientes radiais de pressão e densidade dentro da centrífuga. Por isso, são poucos os países no mundo que foram capazes de obtê-la, como é o caso da Rússia (Bogovalov et al. 2012; Borman et al. 2016) e da China (Jiang e Zeng 2012). A figura 4.2 é um exemplo de solução numérica obtida por pesquisadores russos.

Uma terceira alternativa é uma abordagem estatística no campo da inteligência artificial e machine learning: as redes neurais artificiais do tipo *multilayer perceptron* (Andrade, Nascimento e Migliavacca 2005; Migliavacca, Rodrigues e Nascimento 2002).

Em seu trabalho, Migliavacca (2002) treinou, testou e validou uma ferramenta de redes neurais desenvolvida pelo Laboratório de Simulação e Controle de Processos do Departamento de Engenharia Química da Escola Politécnica da Universidade de São Paulo para simulação de centrífugas.

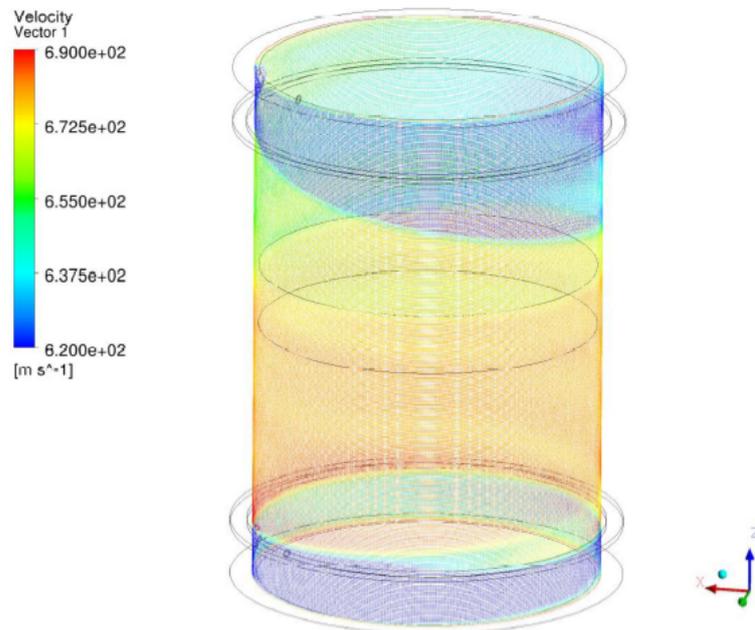


Figura 4.2: Distribuição de velocidades na superfície cilíndrica de uma centrífuga (Borman et al. 2016)

4.2 Variáveis de Operação

Uma centrífuga possui três variáveis de processo para cada corrente de entrada ou saída: vazão (G , P , W), pressão (pF , pP , pW) e composição do isótopo leve (z , y , x), conforme figura 4.3.

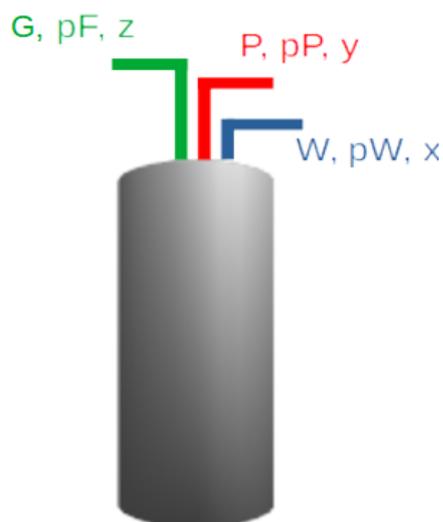


Figura 4.3: Variáveis de entrada e saída de uma centrífuga

É importante ressaltar que a variável de vazão de alimentação individual da centrífuga foi designada por G para evitar a confusão com a variável F , que descreve a

vazão ao longo da tubulação de alimentação de um estágio, conforme mostra a figura 4.4.

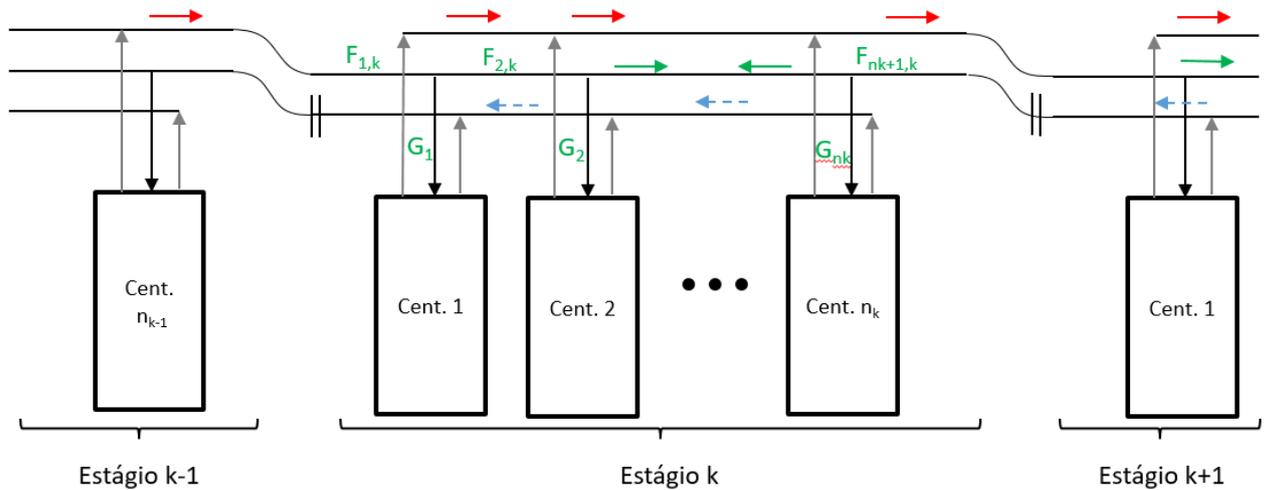


Figura 4.4: Variáveis de vazão de alimentação da centrífuga, G , e do estágio, F

Percebe-se experimentalmente que a centrífuga possui 3 graus de liberdade, ou seja, uma vez determinadas 3 variáveis independentes entre si, as outras também estão determinadas.

Existem 3 equações explícitas que relacionam estas variáveis:

1. Balanço de massa global;
2. Balanço de massa parcial;
3. Relação linear entre pF e G através da condição de *choked flow*;

As 3 outras relações necessárias para obter os graus de liberdade são provenientes da análise do escoamento interno da centrífuga, que está fora do escopo deste estudo.

Por facilidade da definição de um modelo matemático que descreva o comportamento da centrífuga, as variáveis escolhidas são, em geral, a vazão de alimentação G , a pressão de produto pP e o corte $\Theta = P/G$, como será apresentado no capítulo a seguir.

Porém, dentro de uma cascata, o que determina fisicamente a operação de

uma centrífuga são as pressões pF , pP e pW . Por essa razão, a pressão local da tubulação em que centrífuga está determina seu desempenho e as vazões de alimentação, produto e rejeito.

Esta relação, no entanto, não é unidirecional e sim uma relação de equilíbrio. Ou seja, ao mesmo tempo em que as pressões afetam a operação da centrífuga, esta também afeta as pressões na tubulação. Assim, se houver alteração em alguma das pressões, as variáveis da centrífuga e as pressões na tubulação irão se ajustar até que haja equilíbrio das condições.

Dentro de um estágio, as pressões ao longo de cada tubulação estão relacionadas pelas condições físicas do escoamento, conforme figura 4.5. Se centrífugas conectadas em paralelo na mesma tubulação, ou seja, no mesmo estágio, estão submetidas a pressões locais diferentes, elas operarão em condições diferentes e, portanto, o desempenho do estágio será uma média ponderada do desempenho de cada centrífuga que o compõe.

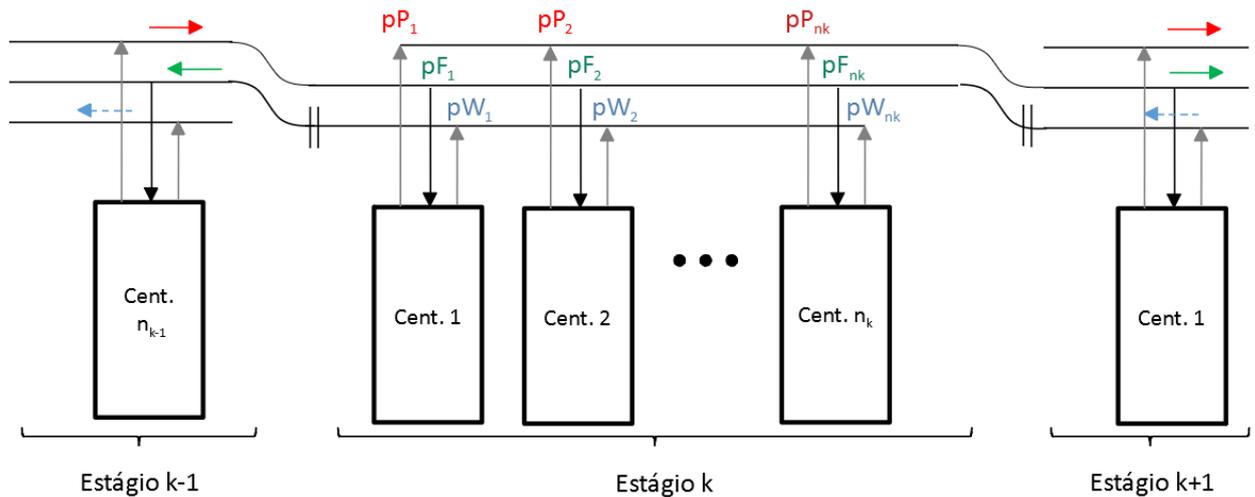


Figura 4.5: Pressões dentro de um estágio determinam o funcionamento das centrífugas localmente ao mesmo tempo que também são influenciadas por elas.

4.3 Centrífuga Modelo

Neste estudo utilizou-se uma combinação de equações da literatura aberta para representar uma centrífuga modelo, que será usada para demonstrar os resultados de cascata calculados pelo modelo matemático de cascata integral proposto.

A centrífuga modelo é aqui denominada Roma-Ratz-An, uma vez que utiliza a combinação do trabalho de Ratz (1983) com o trabalho de An *et al.* (2019) e os parâmetros da "centrífuga de Roma", que é uma centrífuga genérica desenvolvida em 1979 para estudos acadêmicos no 3º Workshop Internacional de Fenômenos de Separação em Líquidos e Gases (3rd International Workshop on Separation Phenomena in Liquids and Gases – SPLG).

O trabalho de Ratz forneceu uma equação para o cálculo do poder de separação δU de uma centrífuga, dados os seus parâmetros de operação e características geométricas.

O trabalho de An *et al.* (2019) produziu um modelo empírico para a pressão de rejeito, que foi apresentado no 15º Workshop Internacional de Fenômenos de Separação em Líquidos e Gases (15th International Workshop on Separation Phenomena in Liquids and Gases – SPLG).

Poder de Separação e Fator de Enriquecimento

O modelo de Ratz é um conjunto de relações expostas no artigo de Glaser (2008) que têm o objetivo de calcular a variável δU . Esta variável é usual na avaliação da capacidade separativa de elementos separadores pois leva em conta tanto a vazão das correntes de alimentação, produto e rejeito quanto a composição final destas, conforme exposto no capítulo 3.3.

Para calcular δU , foram inseridas as configurações geométricas da centrífuga de Roma apresentadas no Anexo I, de acordo com Glaser (2008).

A partir de δU , é possível calcular o fator de enriquecimento β . O cálculo

completo de δU de Ratz está descrito no Anexo I.

Obtém-se assim a função representada por f_1 no algoritmo para cálculo da cascata:

$$\beta = f_1(pP, \Theta, G) \quad (4.1)$$

onde

pP : pressão da corrente de produto;

Θ : corte;

G : vazão mássica de alimentação do gás na centrífuga.

Pressão de Rejeito

O modelo de pressão de An *et al.* mostra a relação empírica da pressão de rejeito (pW) com a pressão de produto (pP), a vazão de alimentação (G) e o corte (Θ). A função que expressa esta relação é dada pelos parâmetros e equações a seguir:

$$pW = \frac{pP - \delta}{k'} \quad (4.2)$$

$$k' = a_1 + b_1 \cdot \Theta \cdot G \quad (4.3)$$

$$\delta = a_2 + b_2 \cdot \Theta \cdot G + c_2 \cdot G \quad (4.4)$$

$$a_1 = 0,62367 \quad (4.5)$$

$$b_1 = -0,0085 \quad (4.6)$$

$$a_2 = -0,02339 \quad (4.7)$$

$$b_2 = -0,008876 \quad (4.8)$$

$$c_2 = 0,00219 \quad (4.9)$$

onde pP e pW estão em Torr e G em mg/s.

Estas relações que geram o valor de pW serão representadas pela função f_2 , aplicada no algoritmo para o cálculo da cascata com perda de carga.

$$pW = f_2(pP, \Theta, G) \quad (4.10)$$

Comportamento da Centrífuga Modelo

Uma vez que as funções de pW e δU estão definidas, foi possível traçar superfícies das figuras 4.6, 4.7 e 4.8 em relação às suas 3 variáveis independentes (pP , Θ e G).

Percebe-se que a centrífuga apresenta um ponto ótimo de funcionamento, também chamado de ponto de operação nominal. Este é o ponto em que o poder de separação é máximo.

Assim sendo, as cascatas devem operar em condições tais que as centrífugas estejam o mais próximo possível das condições nominais. Quanto maior o desvio delas, maior a perda de poder separativo da cascata.

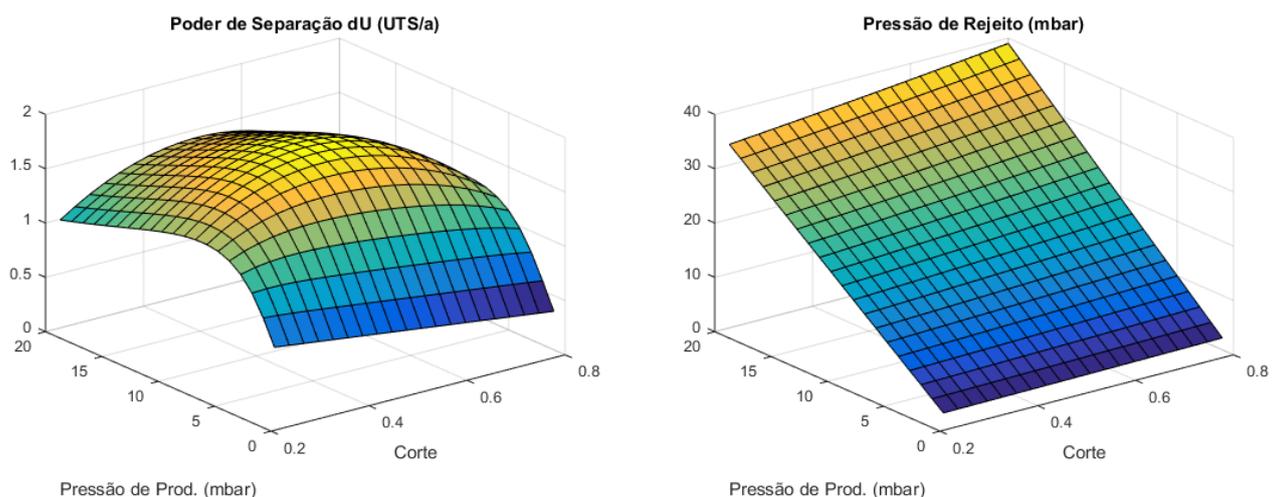


Figura 4.6: δU e pW para vazão de alimentação fixa $G = 500$ kg/a

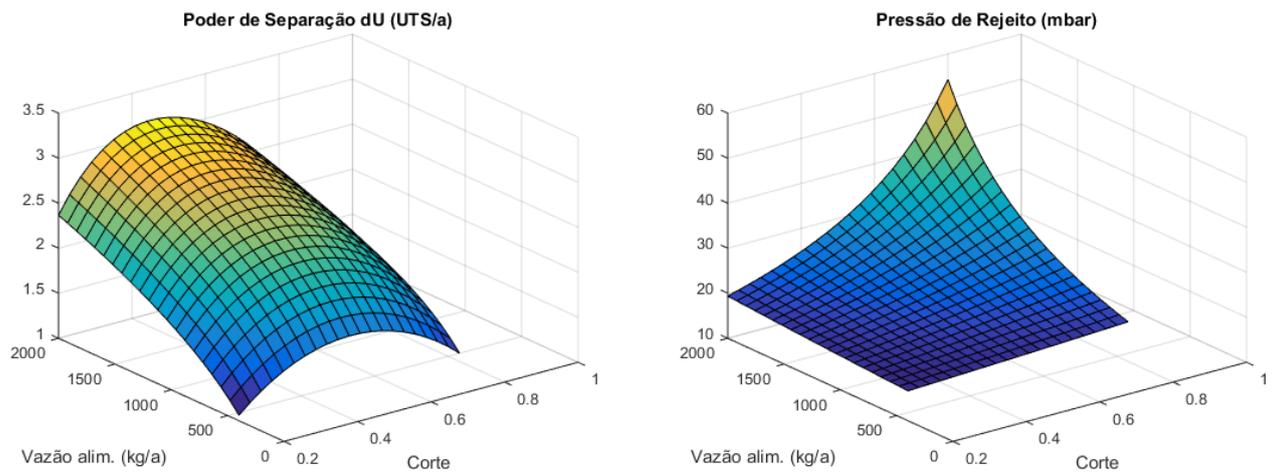


Figura 4.7: δU e pW para pressão de produto fixa $pP = 10$ mbar

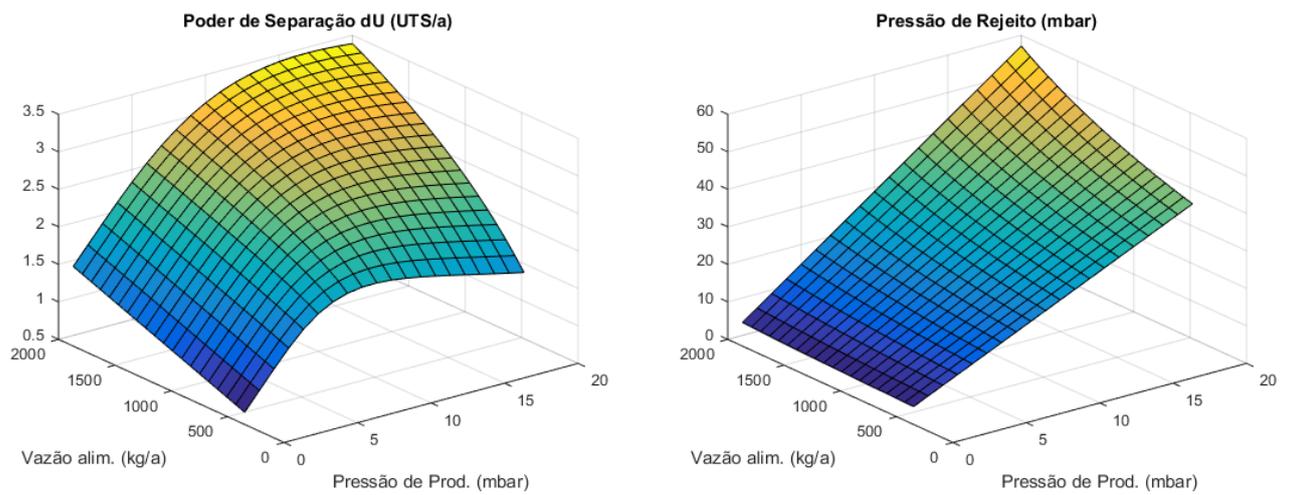


Figura 4.8: δU e pW para corte fixo $\Theta = 0,5$

Vazão Mássica por Pressão de Alimentação

Existe ainda uma terceira função que relaciona os parâmetros G (vazão mássica de alimentação) e p^F (pressão de alimentação).

Através da inserção de restrição suficientemente pequena na tubulação de alimentação individual das centrífugas, provoca-se a condição de "*choked flow*" em que a vazão de escoamento é diretamente proporcional à pressão p^F à montante da restrição.

Esta função é determinada de forma empírica. Para o caso da centrífuga modelo, por conveniência, ela será dada por:

$$G = f_3(p^F) = 50 \cdot p^F \quad (4.11)$$

onde p^F está em mbar e G em kg/a.

5 Modelagem Matemática de Cascatas

5.1 Visão Geral

A modelagem matemática de cascatas desempenha um papel importante no entendimento do processo separativo global. Ela se faz necessária tanto no projeto do equipamento (definição de número de estágios e número de elementos por estágio) quanto em qualquer alteração nos parâmetros operacionais.

Uma das grandes dificuldades da modelagem é o entendimento das leis físicas que regem o processo de separação molecular dentro das ultracentrífugas (Sulaberidze et al. 2020), o que resulta na não-existência de uma equação determinística para caracterizar o comportamento físico da separação e das condições de escoamento.

Em busca da solução deste problema, Cohen (1951), em seu estudo pioneiro, adotou fatores de separação α constantes para caracterizar o desempenho separativo dos estágios, sem abordar cada elemento separativo individualmente e as condições operatórias a que eles estão submetidos. Tal abordagem reduz significativamente o número de variáveis envolvidas e torna possíveis os cálculos de otimização.

Assim Cohen definiu a primeira cascata modelo, a cascata ideal, e sua teoria ainda é utilizada para o projeto de cascatas. As principais características e hipóteses adotadas são descritas no Capítulo 5.2.

Desde 1951, a teoria de modelagem de cascatas evoluiu no sentido de tornar o modelo mais representativo da realidade, eliminando gradualmente as simplificações adotadas pela cascata ideal.

A primeira evolução notável ocorreu no trabalho de Laguntsov (1973), que incluiu os cálculos com fatores de enriquecimento diferentes para cada estágio, aproximando o modelo da realidade. Portoghese (2002) baseou-se no mesmo conceito e desenvolveu um modelo semi-empírico de cálculo de cascatas ao incluir métodos estatísticos para obter os fatores de enriquecimento dos estágios.

Nesta tese, estes modelos, aplicados para mistura binária, são chamados de "cascata quase-ideal". Eles são abordados no Capítulo 5.3.

Evoluções ocorreram também no sentido de incluir misturas de mais de dois isótopos no processo separativo (Garza, Garret e Murphy 1961; Kucherov e Minenko 1965; Sulaberidze e Borisevich 2001; Palkin, Sbitnev e Frolov 2002; von Halle 1987; Song et al. 2010) ou no sentido de tratar o processo em regime transiente (Orlov, Ushakov e Sovach 2016; Orlov, Ushakov e Sovach 2018; Cao et al. 2004). Estes casos não serão abordados neste estudo.

Atualmente, nenhum dos modelos existentes calcula os fatores de separação e as condições operatórias individuais de cada elemento da cascata, devido à complexidade de tal tratamento. Este é o modelo de cascata integral desenvolvido nesta tese e apresentado no Capítulo 6.

5.2 Cascata Ideal

A teoria de cascata ideal, desenvolvida em várias referências clássicas (Cohen 1951; Villani 1979; Benedict, Pigford e Levi 1981; Pratt 1967), será apresentada neste capítulo com base no trabalho de Villani (1979).

A cascata ideal é definida como a cascata simétrica projetada de tal forma que a vazão de produto P_{k-1} do estágio $k - 1$ e a de rejeito W_{k+1} do estágio $k + 1$ possuem composições idênticas, uma vez que alimentam o estágio k , conforme figura 5.1.

Esta condição é chamada de "condição de não-mistura". Ela garante que não haja perdas no trabalho separativo e a planta seja o mais eficiente possível.

A cascata é dita simétrica quando o produto de um estágio alimenta o estágio imediatamente superior e, de forma análoga, o rejeito alimenta o estágio imediatamente inferior, conforme figuras 3.14 e 5.1.

As variáveis usadas para definir as vazões mássicas, composições mássicas

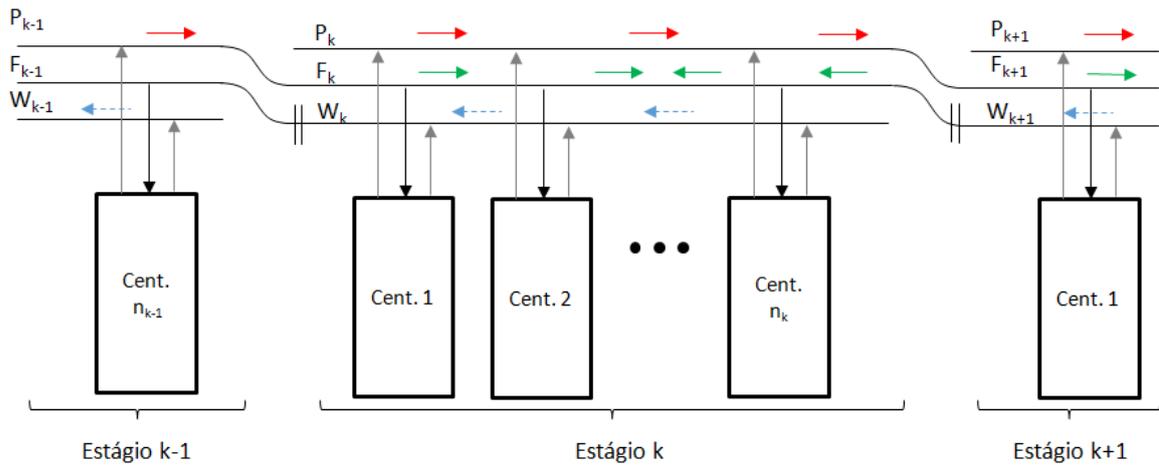


Figura 5.1: Esquema da tubulação de processo em três estágios consecutivos

e razões de abundância de cada estágio genérico são apresentadas na tabela 5.1.

Tabela 5.1: Notação das variáveis de um estágio genérico

Corrente	Vazão Mássica	Composição	Razão de Abundância
Alimentação	F_k	z_k	R_k
Produto	P_k	y_k	R'_k
Rejeito	W_k	x_k	R''_k

Nota-se que o foco da teoria é nas variáveis dos estágios, e não das centrífugas que os compõem. Por essa razão, as variáveis da tabela possuem apenas o subscrito k , que indica o estágio a que se referem. Desta forma, assume-se que todas as centrífugas dentro de um estágio k possuem as mesmas composições e razões de abundância do estágio e operam nas mesmas condições.

Conforme já mencionado, uma hipótese básica da cascata ideal é a hipótese de não-mistura, dada pelas equações a seguir para as composições e razões de abundância, respectivamente.

$$z_k = y_{k-1} = x_{k+1} \quad (5.1)$$

$$R_k = R'_{k-1} = R''_{k+1} \quad (5.2)$$

A partir da definição do fator de enriquecimento, dada no Capítulo 3.3, e da condição de não-mistura, equação 5.2, aplicadas a um estágio $k - 1$, se obtém:

$$R'_{k-1} = \beta R_{k-1} \quad (5.3)$$

$$R_k = \beta R_{k-1} \quad (5.4)$$

A segunda hipótese básica da cascata ideal é que o fator de separação, enriquecimento e empobrecimento de todos os estágios são iguais, ou seja:

$$\alpha_k = \alpha_{k-1} = \alpha_{k-2} = \dots = \alpha \quad (5.5)$$

$$\beta_k = \beta_{k-1} = \beta_{k-2} = \dots = \beta \quad (5.6)$$

$$\gamma_k = \gamma_{k-1} = \gamma_{k-2} = \dots = \gamma \quad (5.7)$$

Sob esta hipótese, usando a equação 5.4, é possível escrever:

$$R_k = \beta R_{k-1} = \beta^2 R_{k-2} = \dots = \beta^i R_{k-i} \quad (5.8)$$

Portanto, sendo R_0 a razão de abundância de alimentação do estágio 0 (estágio de alimentação) e k um estágio genérico qualquer

$$R_k = \beta^k R_0 \quad (5.9)$$

Assim, para uma cascata ideal com razão de abundância do produto desejada de R'_P , a partir das equações 5.3 e 5.9, tem-se

$$R'_P = \beta^{K+1} R_0 \quad (5.10)$$

$$K + 1 = \frac{\ln R'_P / R_0}{\ln \beta} \quad (5.11)$$

A equação 5.11 calcula, portanto, do número $K + 1$ de estágios de enriquecimento necessários para alcançar a composição de produto desejada.

Na cascata ideal todos os estágios possuem os mesmo valores de β e γ , conforme equações 5.6 e 5.7. Assim, a partir da condição de não-mistura e da definição dos fatores de separação, tem-se que $\beta = \gamma$ e portanto:

$$\beta \cdot \gamma = \alpha \quad (5.12)$$

$$\beta^2 = \alpha \quad (5.13)$$

Através de análise análoga à da seção de enriquecimento, o número S de estágios de recuperação, dada uma razão de alimentação R_0 e uma razão de rejeito R''_W é calculado por:

$$S = \frac{\ln R_0/R''_W}{\ln \beta} - 1 \quad (5.14)$$

Portanto o número de estágios total da cascata para uma determinada tarefa de separação é dado por:

$$N = K + 1 + S \quad (5.15)$$

onde o número 1 representa o estágio de alimentação, que geralmente é considerado parte da seção de enriquecimento.

O número de unidades de separação, ou centrífugas, por estágio é dado a partir da vazão de alimentação F_k , cujo cálculo é uma combinação da definição do corte, equação 3.11, com os valores de R_k obtidos pela equação 5.9.

Assim, para um estágio k na seção de enriquecimento:

$$\Theta_k = \frac{z_k - x_k}{y_k - x_k} \quad (5.16)$$

$$\Theta_k = \frac{R_k - R''_k \frac{1 + R'_k}{1 + R_k}}{R'_k - R''_k \frac{1 + R'_k}{1 + R_k}} \quad (5.17)$$

$$\Theta_k = \frac{1}{\beta + 1} \frac{1 + \beta R_k}{1 + R_k} \quad (5.18)$$

Assumindo-se que a vazão de produto final desejada é P , pode-se escrever para o estágio K :

$$F_K = \frac{P}{\Theta_K} \quad (5.19)$$

$$F_K = P(\beta + 1) \frac{1 + R_K}{1 + \beta R_K} \quad (5.20)$$

Seguindo o método de Benedict e Pigford (1981), através de manipulações algébricas pode-se obter as vazões de alimentação F_k em função de uma tarefa de separação desejada (P , y_P , W e x_W) e das variáveis de alimentação (R_0), para todos os estágio das seções de enriquecimento e recuperação, respectivamente:

$$F_k = \frac{\beta + 1}{\beta - 1} P y_P \frac{1}{R_0} (\beta^k - \beta^{-(K+1)}) (1 + R_0 \beta^k) \quad (5.21)$$

e

$$F_{-k} = \frac{\beta + 1}{\beta - 1} W x_W \frac{1}{R_0} (\beta^{S+1} - \beta^k) (1 + R_0 \beta^{-k}) \quad (5.22)$$

Então, a partir de um valor nominal de vazão de alimentação da centrífuga, G_{nom} , calcula-se o número de centrífugas por estágio:

$$N_k = \frac{G_k}{G_{nom}} \quad (5.23)$$

Como os valores da equação 5.23 geralmente são números não-inteiros,

deve-se arredondar para o inteiro mais próximo. Portanto não existe uma cascata perfeitamente ideal, mas os valores reais podem se aproximar muito dos calculados por este modelo dependendo das condições de operação.

Cada estágio da cascata possui um número diferente de centrífugas. Através das equações 5.21 e 5.22, pode-se mostrar que as vazões F_k diminuem à medida que o estágio k está mais distante do estágio de alimentação (estágio 0 nos cálculos apresentados).

Portanto a cascata se torna mais afunilada quando se aproxima do topo e da base, sendo o estágio de alimentação o maior de todos. Assim, ela assume a forma de uma gota, como pode ser visto na figura 3.14.

Os cálculos da cascata ideal garantem que o número de elementos em cada estágio seja mínimo para uma dada tarefa de separação. Portanto as exigências energéticas globais também o são (Jordan 1992).

5.3 Cascata Quase-Ideal (Modelo Clássico)

A partir da teoria da cascata ideal de Cohen (1951) surgiram desenvolvimentos no sentido de tratar os estágios individualmente, ou seja, com fatores de enriquecimento e condições operatórias não idênticas entre si. Todos os modelos com este tipo de tratamento serão chamados nesta tese de "cascata quase-ideal".

Laguntsov (1973) iniciou o estudo de cascatas quase-ideais a partir da hipótese de fatores de enriquecimento arbitrários por estágio. Palkin (1997) baseou-se no trabalho de Laguntsov e incluiu a possibilidade de mistura de correntes com concentrações próximas, mas não exatamente iguais.

Portoghese (2002) acrescentou ao modelo anterior ao calcular as condições de pressão nas tubulações e inserir funções empíricas para o cálculo dos fatores de separação e pressões de rejeito das centrífugas e, portanto, dos estágios.

O modelo de Portoghese é o modelo a partir do qual esta tese foi desen-

volvida. Ele será chamado de modelo clássico e é descrito neste capítulo em linhas gerais.

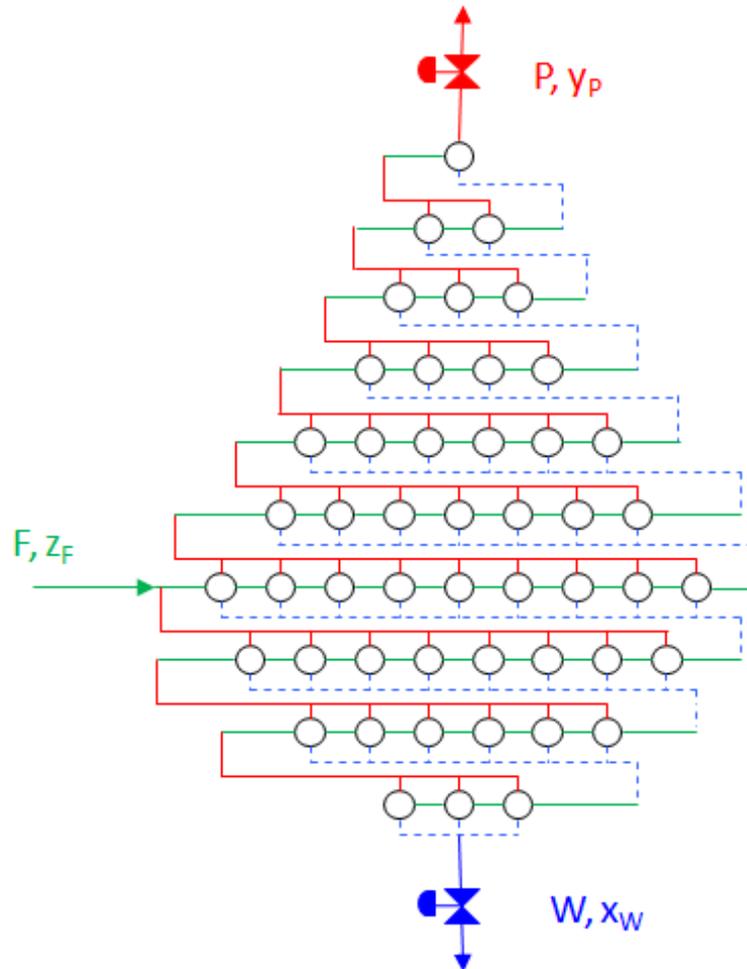


Figura 5.2: Modelagem matemática clássica de cascatas: as variáveis de entrada são a estrutura da cascata (N, N_k, dow_k), a corrente de alimentação (F e z_F) e as aberturas das válvulas de produto e rejeito (dop e dow).

Partindo de uma cascata qualquer, figura 5.2, com número de estágios N e número de centrífugas por estágio N_k , calculados através da teoria da cascata ideal, o objetivo da modelagem matemática é obter as vazões e composições de produto (P e y_P) e rejeito (W e x_W), dada a vazão de alimentação F e sua composição z_F .

Além das características da corrente de alimentação, a própria estrutura da cascata deve ser descrita para permitir o cálculo. Isto inclui não apenas o número de estágios e centrífugas, mas também a descrição de restrições físicas nas tubulações e abertura das válvulas de produto e rejeito. A tabela 5.2 apresenta as variáveis de

entrada do modelo clássico.

Tabela 5.2: Dados de entrada do modelo clássico

Símbolo	Descrição
N	Número total de estágios
S	Número de estágios na seção de recuperação
N_k	Número de centrífugas por estágio (N variáveis)
dow_k	Diâmetro das restrições interestágios (N variáveis)
dow_1	Abertura da válvula de rejeito
dop	Abertura da válvula de produto
F	Vazão de alimentação da cascata
z_F	Composição da alimentação
T_{amb}	Temperatura ambiente
f_1, f_2 e f_3	Modelo do elemento separativo e funções de operação

O cálculo se inicia estabelecendo as hipóteses do sistema. São elas:

1. Gás ideal;
2. Escoamento incompressível, contínuo e laminar;
3. Escoamento crítico através das restrições interestágios e válvulas;
4. Temperatura constante ao longo da tubulação e igual à temperatura ambiente;
5. Perda de carga desprezível ao longo de um estágio.

A hipótese 5, de perda de carga desprezível, faz com que a tubulação inteira de um estágio esteja sujeita à mesma pressão e, por esta razão, todos os elementos separativos de um estágio operam de forma idêntica.

Esta simples hipótese diminui significativamente o número de variáveis a serem calculadas, porque cada estágio pode ser representado pelas variáveis de pressão (pF_k , pP_k e pW_k), corte (Θ_k) e composição (z_k , y_k e x_k) calculadas para uma única ultracentrífuga. As vazões de alimentação, produto e rejeito do estágio (F_k , P_k e W_k)

são simplesmente as vazões de entrada e saída da ultracentrífuga vezes o número de centrífugas daquele estágio (N_k).

A tabela 5.3 apresenta as variáveis calculadas pelo modelo.

Tabela 5.3: Dados de saída do modelo clássico

Símbolo	Descrição
F_k	Vazão de alimentação do estágio (N variáveis)
P_k	Vazão de produto do estágio (N variáveis)
W_k	Vazão de rejeito do estágio (N variáveis)
G_k	Vazão de alimentação individual das centrífugas (N variáveis)
pF_k	Pressão de alimentação do estágio (N variáveis)
pP_k	Pressão de produto do estágio (N variáveis)
pW_k	Pressão de rejeito do estágio (N variáveis)
z_k	Composição de alimentação do estágio (N variáveis)
y_k	Composição de produto do estágio (N variáveis)
x_k	Composição de rejeito do estágio (N variáveis)
Θ_k	Corte do estágio (N variáveis)
α_k	Fator de separação do estágio (N variáveis)
β_k	Fator de enriquecimento do estágio (N variáveis)
γ_k	Fator de empobrecimento do estágio (N variáveis)
δU_k	Poder de separação do estágio (N variáveis)
P	Vazão de produto da cascata (1 variável)
W	Vazão de rejeito da cascata (1 variável)
y_P	Composição do produto da cascata (1 variável)
x_W	Composição do rejeito da cascata (1 variável)

Tem-se, portanto, um total de $15 \cdot N + 4$ incógnitas no sistema a ser resolvido. Para que seja um sistema determinado, é preciso então que ele contenha o mesmo número de equações linearmente independentes.

As primeiras equações são provenientes dos balanços de massa total e par-

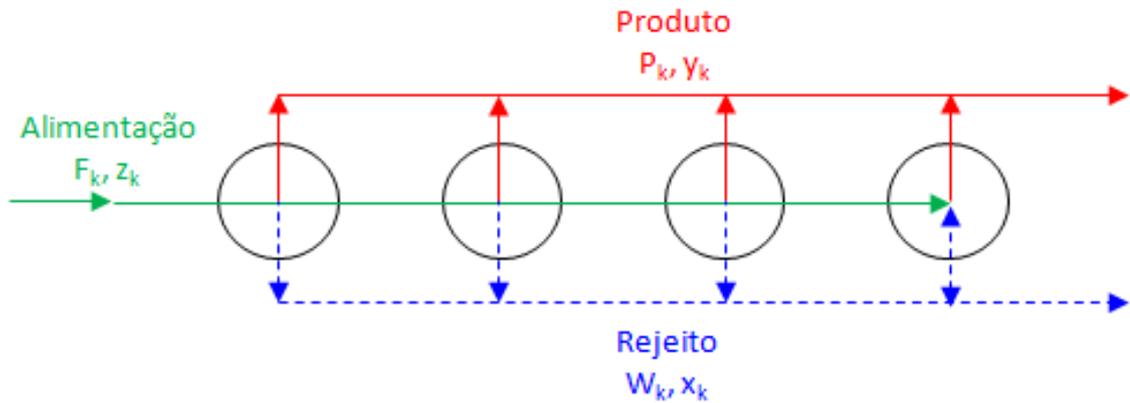


Figura 5.3: Balanços de massa total e parcial em um estágio qualquer

cial, respectivamente, de cada estágio, conforme figura e equações a seguir.

$$\begin{cases} F_k = P_k + W_k & k \neq S + 1 \\ F_k = P_k + W_k + F & k = S + 1 \end{cases} \quad (5.24)$$

$$\begin{cases} F_k \cdot z_k = P_k \cdot y_k + W_k \cdot x_k & k \neq S + 1 \\ F_k \cdot z_k = P_k \cdot y_k + W_k \cdot x_k + F \cdot z_F & k = S + 1 \end{cases} \quad (5.25)$$

Em seguida, podem-se escrever os balanços de massa total e parcial para as alimentações de cada estágio. Na cascata simétrica, a alimentação do estágio k é dada pela soma do produto do estágio $k - 1$ com o rejeito do estágio $k + 1$, conforme figura 5.1 e equações a seguir.

Balanço de massa total das alimentações dos estágios:

$$\begin{cases} F_1 = W_2 \\ F_k = P_{k-1} + W_{k+1} & k = 2, \dots, N - 1 \text{ e } k \neq S + 1 \\ F_k = P_{k-1} + W_{k+1} + F & k = S + 1 \\ F_N = P_{N-1} \end{cases} \quad (5.26)$$

Balanço de massa parcial das alimentações dos estágios:

$$\left\{ \begin{array}{l} F_1 \cdot z_1 = W_2 \cdot x_2 \\ F_k \cdot z_k = P_{k-1} \cdot y_{k-1} + W_{k+1} \cdot x_{k+1} \quad k = 2, \dots, N-1 \text{ e } k \neq S+1 \\ F_k \cdot z_k = P_{k-1} \cdot y_{k-1} + W_{k+1} \cdot x_{k+1} + F \cdot z_F \quad k = S+1 \\ F_N \cdot z_N = P_{N-1} \cdot y_{N-1} \end{array} \right. \quad (5.27)$$

O balanço de massa total da cascata dado por $F = P + W$ é uma combinação linear das equações anteriores, por isso não faz parte deste sistema. O mesmo pode ser dito para o balanço de massa parcial: $F \cdot z_F = P \cdot y_P + W \cdot x_W$.

A partir deles, notam-se as seguintes relações de variáveis:

$$P = P_N \quad (5.28)$$

$$W = W_1 \quad (5.29)$$

$$y_P = y_N \quad (5.30)$$

$$x_W = x_1 \quad (5.31)$$

A soma das relações anteriores com os balanços de massa apresentados resulta em $4 \cdot N + 4$ equações. As demais equações do sistema são provenientes das definições da teoria de separadores, das funções das centrífugas e do escoamento crítico de fluidos através de restrições.

Da teoria de separadores (Capítulo 3.3), são empregadas as definições linearmente independentes a seguir.

$$\Theta_k = \frac{z_k - x_k}{y_k - x_k} \quad k = 1, \dots, N \quad (5.32)$$

$$\beta_k = \frac{y_k/(1 - y_k)}{z_k/(1 - z_k)} \quad k = 1, \dots, N \quad (5.33)$$

$$\gamma_k = \frac{z_k/(1 - z_k)}{x_k/(1 - x_k)} \quad k = 1, \dots, N \quad (5.34)$$

$$\alpha_k = \beta_k \cdot \gamma_k \quad k = 1, \dots, N \quad (5.35)$$

$$\delta U_k = P_k \cdot V(y_k) + W_k \cdot V(x_k) - F_k \cdot V(z_k) \quad k = 1, \dots, N \quad (5.36)$$

Da modelagem matemática de uma centrífuga (Capítulo 4), são utilizadas as funções que caracterizam o comportamento da centrífuga em cada estágio. Como todas as centrífugas de um estágio operam de maneira idêntica, segundo as hipóteses pré-estabelecidas, estas equações representam a relação das variáveis do estágio como um todo.

$$\beta_k = f_1(pP_k, \Theta_k, G_k) \quad k = 1, \dots, N \quad (5.37)$$

$$pW_k = f_2(pP_k, \Theta_k, G_k) \quad k = 1, \dots, N \quad (5.38)$$

$$pF_k = f_3(G_k) \quad k = 1, \dots, N \quad (5.39)$$

Uma vez que as centrífugas operam de forma idêntica num estágio, a vazão de alimentação do estágio F_k pode ser expressa por:

$$F_k = N_k \cdot G_k \quad k = 1, \dots, N \quad (5.40)$$

Tem-se, então, um total de $13 \cdot N + 4$ equações. As outras $2 \cdot N$ equações restantes provêm de relações de pressão e vazão da tubulação.

Normalmente não existe nenhuma restrição ao longo da tubulação de produto de um estágio k e de alimentação do estágio superior $k + 1$. Portanto, estabelece-se a seguinte relação entre pressões de alimentação pF_{k+1} e de produto pP_k :

$$\begin{cases} pP_k = pF_{k+1} & k = 1, \dots, N - 1 \\ pP_N = f_{restricao}(P_N, dop) \end{cases} \quad (5.41)$$

onde a função $f_{restricao}$ expressa a relação entre a vazão e abertura da válvula de produto com a pressão à montante dela. Esta relação existe devido à hipótese 3 de escoamento crítico (*choked flow*) através de válvulas e é abordada em mais detalhes no Capítulo 6.9.

Devido ao comportamento das curvas da centrífuga e ao ponto nominal de operação, conforme Capítulo 4.3., a pressão das tubulações de rejeito é geralmente mais elevada do que a da tubulação de alimentação. Portanto, são inseridas restrições com diâmetro dow_k entre os estágios $k+1$ e k na transição da tubulação de rejeito para a de alimentação, conforme figura 5.1. Assim estabelece-se a seguinte relação:

$$pW_k = f_{restricao}(W_k, dow_k) \quad k = 1, \dots, N \quad (5.42)$$

onde $f_{restricao}$ é novamente a relação entre a vazão e a dimensão de uma restrição com a pressão à montante para um escoamento crítico (Capítulo 6.9).

Desta forma, as $15 \cdot N + 4$ relações linearmente independentes necessárias estão definidas e é possível resolver o sistema proposto pelo modelo clássico de cascatas.

6 Cascata Integral (Modelo Proposto)

6.1 Visão Geral

Até este capítulo foi apresentada, de forma geral, a evolução dos modelos matemáticos de cascatas em regime permanente para separação de mistura binária.

Foi mostrado que os modelos, até então, adotaram simplificações para não abordar cada ultracentrífuga de uma cascata individualmente, mas os estágios como um todo. Essa simplificação torna possível a resolução dos modelos de forma rápida e robusta. No caso do modelo clássico, ela também é precisa o suficiente em cascatas operando em condições próximas à de uma cascata ideal.

Porém a operação real de uma cascata pode ser tal que as condições calculadas pelo modelo clássico diverjam significativamente dos resultados de campo. Essa situação é particularmente notável em cascatas com estágios grandes, ou seja, com elevado número de centrífugas.

Nestas cascatas, a pressão ao longo da tubulação do estágio pode decrescer de forma que as centrífugas de uma extremidade do estágio operem de forma muito diferente da outra. Isso acontece porque são as pressões das tubulações de alimentação, produto e rejeito que definem o desempenho da centrífuga em um estágio.

Neste caso, a hipótese 5 adotada pelo modelo clássico (Capítulo 5.3) não é mais válida e por isso, as variáveis de pressão e separação isotópica não podem mais ser tratadas como constantes ao longo do estágio.

Assim, o número de variáveis a serem calculadas no modelo da cascata integral, o modelo que calcula integralmente os elementos de separação dentro dos estágios, é $15 \cdot \sum N_k + 4$, como será visto no Capítulo 6.3. Existe, portanto, um aumento significativo em comparação com as $15 \cdot N + 4$ variáveis do modelo clássico.

Devido ao elevado número de incógnitas e à alta não-linearidade do processo e às dificuldades impostas pela não-linearidade do processo, funções comuns de resolução de sistemas de equações não-lineares em softwares de cálculo numérico, como

o Matlab e o R, não convergem para uma solução.

É preciso, portanto, definir um algoritmo de solução próprio para este caso. Os próximos capítulos descreverão o modelo proposto em maiores detalhes.

6.2 Dados de Entrada

Como dados de entrada são utilizadas as variáveis da tabela 6.1.

A diferença entre esta tabela e a tabela 5.2 das variáveis de entrada do modelo clássico é a inclusão do diâmetro na tubulação dos estágios, da posição da alimentação externa no estágio de alimentação e dos dados de comprimento da tubulação entre centrífugas adjacentes.

Tabela 6.1: Dados de entrada do modelo proposto

Símbolo	Descrição
N	Número total de estágios
S	Número de estágios na seção de recuperação
N_k	Número de centrífugas por estágio (N variáveis)
dow_k	Diâmetro das restrições interestágios e da saída de rejeito (N variáveis)
dop	Diâmetro da restrição de saída de produto
F	Vazão de alimentação
z_F	Composição da alimentação
i_{alim}	Posição da alimentação no maior estágio
T_{amb}	Temperatura ambiente
f_1, f_2 e f_3	Modelo de elemento separativo e funções de operação
D	Diâmetro da tubulação dos estágios
$L_{k,i}$	Comprimento da tubulação entre centrífugas ($\sum N_k$ variáveis)

6.3 Dados de Saída

As variáveis de saída a serem calculadas são um total de $15 \cdot \sum N_k + 4$ e estão identificadas na tabela 6.2 a seguir. A única alteração entre esta tabela e a tabela 5.3 é a inclusão do índice i nas variáveis dos estágios.

O índice k será utilizado para designar o estágio e o índice i será usado para designar a posição da centrífuga i no estágio k .

Tabela 6.2: Dados de saída do modelo proposto

Símbolo	Descrição
$F_{k,i}$	Vazão de alimentação ao longo dos estágios ($\sum N_k$ variáveis)
$P_{k,i}$	Vazão de produto ao longo dos estágios ($\sum N_k$ variáveis)
$W_{k,i}$	Vazão de rejeito ao longo dos estágios ($\sum N_k$ variáveis)
$G_{k,i}$	Vazão de alimentação das centrífugas ($\sum N_k$ variáveis)
$pF_{k,i}$	Pressão de alimentação das centrífugas ($\sum N_k$ variáveis)
$pP_{k,i}$	Pressão de produto das centrífugas ($\sum N_k$ variáveis)
$pW_{k,i}$	Pressão de rejeito das centrífugas ($\sum N_k$ variáveis)
$z_{k,i}$	Composição de alimentação das centrífugas ($\sum N_k$ variáveis)
$y_{k,i}$	Composição de produto das centrífugas ($\sum N_k$ variáveis)
$x_{k,i}$	Composição de rejeito das centrífugas ($\sum N_k$ variáveis)
$\Theta_{k,i}$	Corte das centrífugas ($\sum N_k$ variáveis)
$\alpha_{k,i}$	Fator de separação das centrífugas ($\sum N_k$ variáveis)
$\beta_{k,i}$	Fator de enriquecimento das centrífugas ($\sum N_k$ variáveis)
$\gamma_{k,i}$	Fator de empobrecimento das centrífugas ($\sum N_k$ variáveis)
$\delta U_{k,i}$	Poder de separação das centrífugas ($\sum N_k$ variáveis)
P	Vazão de produto da cascata (1 variável)
W	Vazão de rejeito da cascata (1 variável)
y_P	Composição do produto da cascata (1 variável)
x_W	Composição do rejeito da cascata (1 variável)

6.4 Hipóteses

As hipóteses para este novo sistema de equações são as seguintes:

1. Gás ideal;
2. Temperatura constante ao longo da tubulação e igual à temperatura ambiente;
3. Tubulação hidraulicamente lisa;
4. Mistura perfeita das vazões de alimentação das duas extremidades de um mesmo estágio;
5. Mistura perfeita das vazões de produto provenientes das centrífugas num mesmo estágio; e
6. Mistura perfeita das vazões de rejeito provenientes das centrífugas num mesmo estágio.

Percebe-se que neste conjunto de hipóteses, não existem definições quanto à característica do escoamento nas tubulações. Ele será definido calculando-se os números adimensionais Reynolds, Knudsen e Mach.

Antecipa-se que, em todos os casos testados durante este estudo, os números de Knudsen e Mach foram tais que o escoamento foi sempre contínuo e incompressível ao longo da tubulação, com exceção dos locais em que há restrições interestágios e válvulas.

Por esta razão, as equações de perda de carga ao longo da tubulação serão apresentadas para os casos de escoamento contínuo e incompressível.

Já no caso de escoamento através de restrições e válvulas, será aplicada a equação apropriada para descrição de escoamento compressível crítico, apresentada no Capítulo 6.9 como a função $f_{restricao}$.

6.5 Algoritmo de Cálculo

O modelo proposto segue uma sequência de macro etapas que é dada pelo fluxograma da figura 6.1.

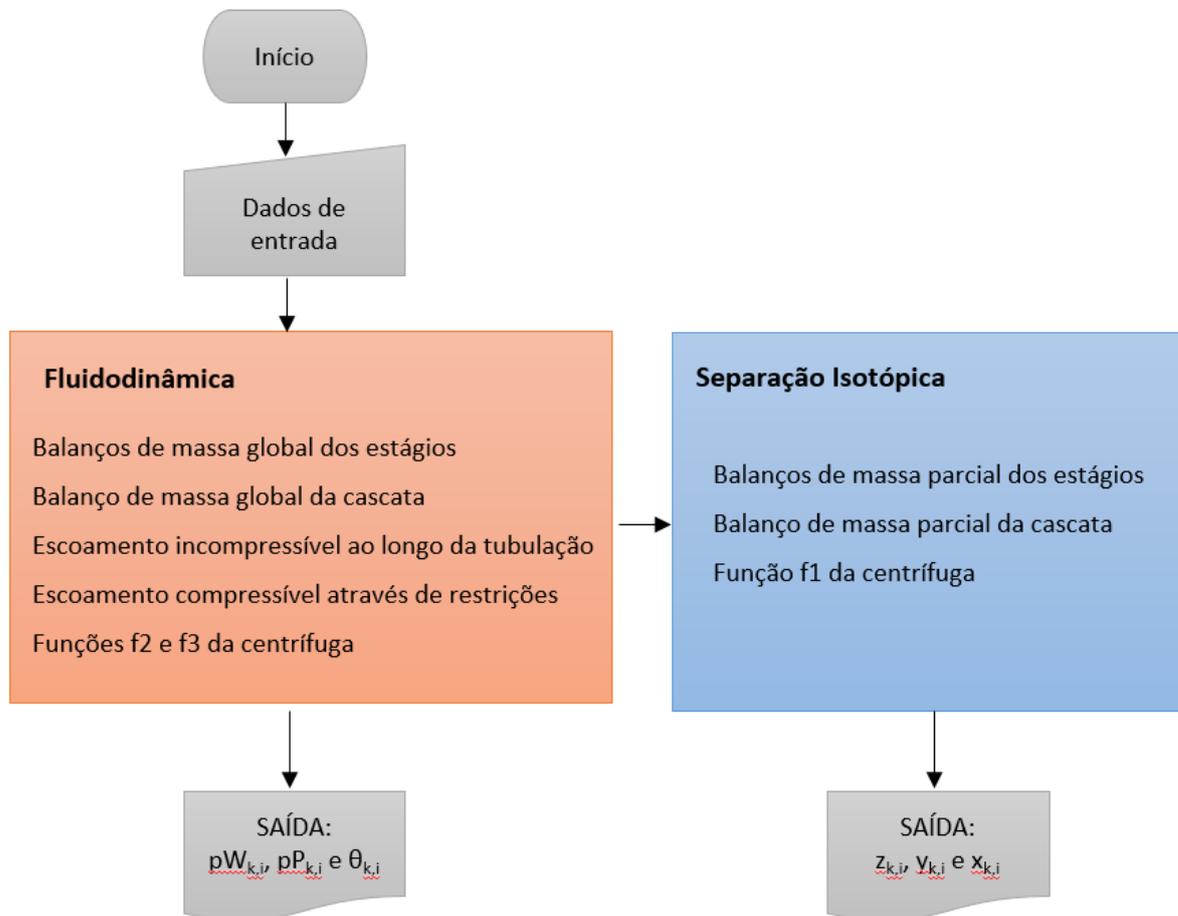


Figura 6.1: Fluxograma para algoritmo de modelagem da cascata com perda de carga

O algoritmo é dividido em duas grandes etapas: o cálculo da fluidodinâmica (Capítulo 6.6) e o de separação isotópica (Capítulo 6.7), conforme fluxograma da figura 6.1. Na primeira, serão calculadas as variáveis de vazão e pressão e, na segunda, as de composição e eficiência da separação dos isótopos.

6.6 ETAPA I: Fluidodinâmica

Os cálculos desta primeira etapa baseiam-se na inicialização dos cortes dos estágios Θ_k . O processo descrito neste capítulo envolve iterações através de otimização para se obterem os valores de Θ_k que garantem que os balanços de massa sejam satisfeitos.

O primeiro passo do algoritmo consiste no balanço de massa global da cascata através da determinação das vazões de entrada e saída dos estágios. O segundo e terceiro passos consistem no balanço de massa dos estágios através do cálculo da variação dos fluxos e das pressões ao longo das tubulações de alimentação, produto e rejeito.

Para melhor entendimento dos cálculos, a figura 6.2 apresenta a configuração da tubulação de alimentação de um estágio genérico k . Nota-se que ela é abastecida pelas duas extremidades: à esquerda pelo produto do estágio $k - 1$ e à direita pelo rejeito do estágio $k + 1$.

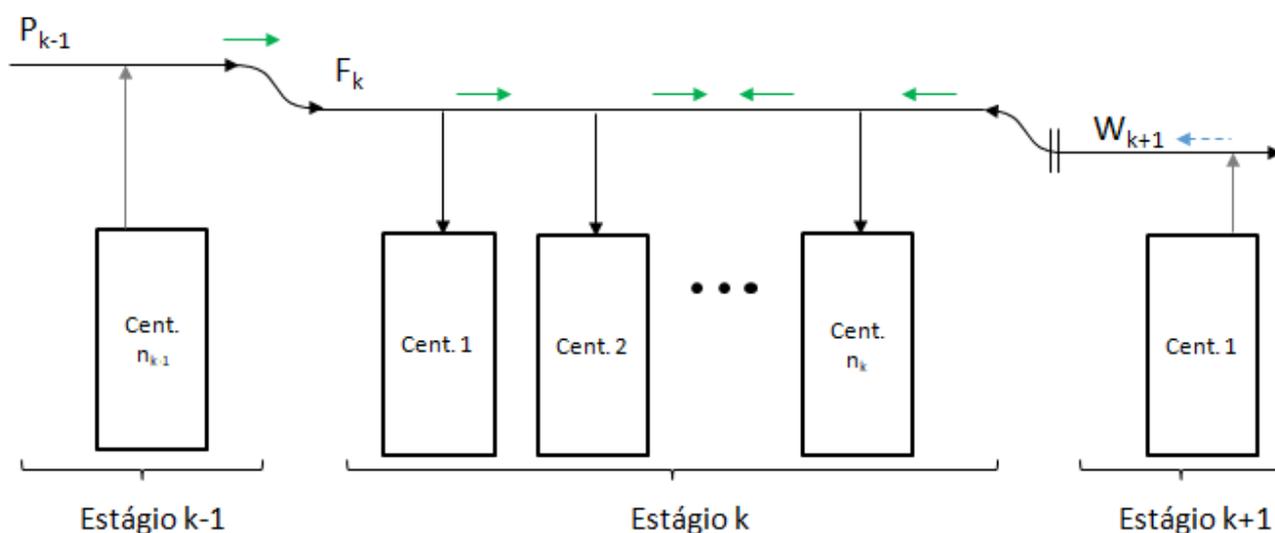


Figura 6.2: Esquema da tubulação de alimentação do estágio genérico k

Portanto o fluxo não é unidirecional, diferentemente das tubulações de produto e rejeito, e a queda de pressão deve refletir essa mudança no sentido da vazão.

Vazões Externas dos Estágios

As vazões externas são dadas por F_k , P_k e W_k e seu cálculo se inicia estimando-se valores de Θ_k . Como o corte é o quociente $\Theta_k = P_k/F_k$, uma vez que todos os cortes estão determinados por inicialização e a vazão de alimentação F da cascata é conhecida, podem-se determinar as vazões de entrada e saída dos estágios, conforme figura 6.3.

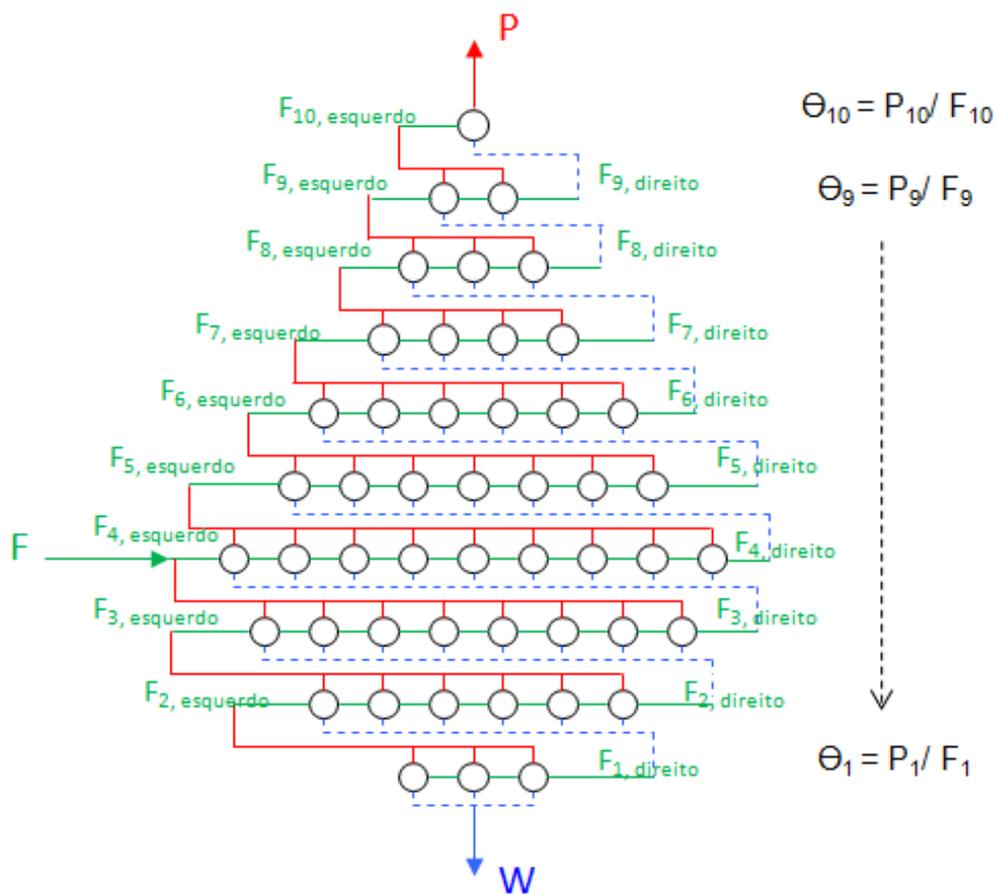


Figura 6.3: A inicialização dos cortes fornece as vazões que entram e saem de cada estágio

O sistema de equações que relaciona as variáveis da figura 6.3 é formado pelos balanços de massa globais das alimentações dos estágios, conforme equações

a seguir:

$$\begin{cases} F_1 = W_2 \\ F_k = P_{k-1} + W_{k+1} & k = 2, \dots, N - 1 \text{ e } k \neq S + 1 \\ F_k = P_{k-1} + W_{k+1} + F & k = S + 1 \\ F_N = P_{N-1} \end{cases} \quad (6.1)$$

Adicionando-se a definição da variável Θ_k , cujos valores foram definidos através de inicialização, pode-se reescrever os balanços da seguinte forma:

$$\begin{cases} F_1 = (1 - \Theta_2) \cdot F_2 \\ F_k = \Theta_{k-1} \cdot F_{k-1} + (1 - \Theta_{k+1}) \cdot F_{k+1} & k = 2, \dots, N - 1 \text{ e } k \neq S + 1 \\ F_k = \Theta_{k-1} \cdot F_{k-1} + (1 - \Theta_{k+1}) \cdot F_{k+1} + F & k = S + 1 \\ F_N = \Theta_{N-1} \cdot F_{N-1} \end{cases} \quad (6.2)$$

Neste sistema as incógnitas são as alimentações dos estágios F_k . Como o número de incógnitas e equações linearmente independentes é o mesmo, o sistema é possível e determinado.

O passo seguinte é determinar as vazões de produto P_k , que geram $F_{k+1,esquerdo}$, e as vazões de rejeito W_k , que geram $F_{k-1,direito}$, conforme figura 6.3. Esta etapa é diretamente calculada pela definição de Θ_k :

$$P_k = \Theta_k \cdot F_k \quad k = 1, \dots, N \quad (6.3)$$

$$\begin{cases} F_{k+1,esquerdo} = P_k & k = 1, \dots, N - 1 \\ P = P_N \end{cases} \quad (6.4)$$

$$W_k = (1 - \Theta_k) \cdot F_k \quad k = 1, \dots, N \quad (6.5)$$

$$\begin{cases} F_{k-1,direito} = W_k & k = 2, \dots, N \\ W = W_1 \end{cases} \quad (6.6)$$

Assim, o balanço de massa da cascata está completo, com as variáveis de vazão F_k , P_k e W_k determinadas para os valores de Θ_k inicializados.

Vazões Internas de Alimentação dos Estágios

O passo seguinte é calcular $F_{k,i}$, $P_{k,i}$ e $W_{k,i}$, que são os valores das vazões aos longo das tubulações dos estágios, integrando-se assim os cálculos de pressão e perda de carga para obter $pF_{k,i}$, $pP_{k,i}$ e $pW_{k,i}$.

Analisa-se primeiro as tubulações de alimentação, estágio a estágio. Uma vez que P_{k-1} é conhecido ($F_{k,esquerdo}$), conforme figura 6.4, tem-se $F_{k,1}$, que é a vazão da tubulação imediatamente anterior à centrífuga 1.

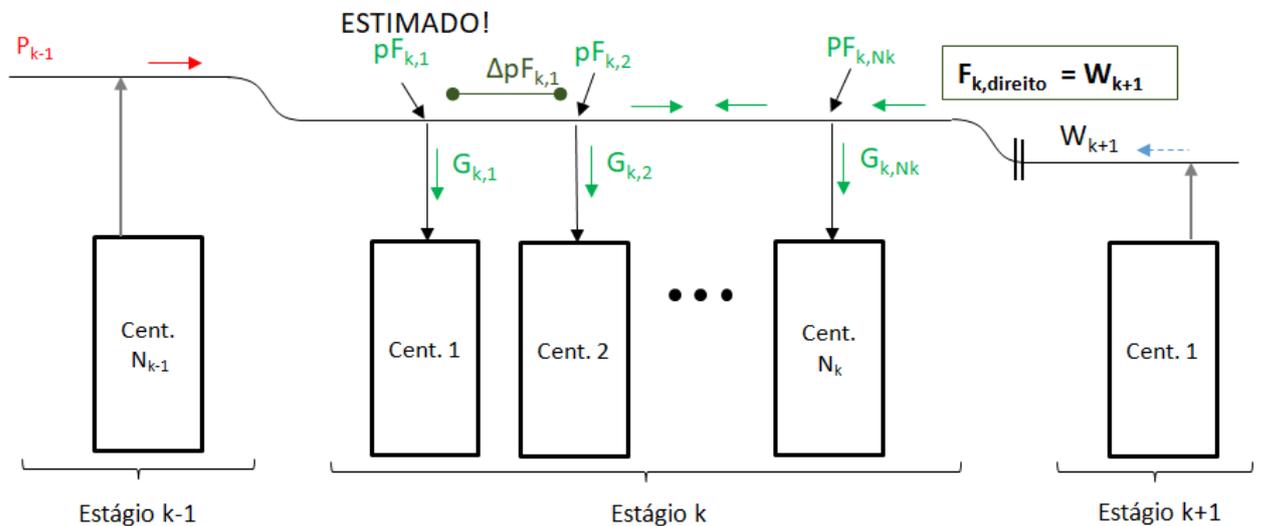


Figura 6.4: Diagrama do algoritmo para cálculo na tubulação de alimentação

Como até então as pressões não estão pré-determinadas em nenhum ponto da tubulação, o processo de cálculo de $pF_{k,i}$ se inicia a partir da estimativa de $pF_{k,1}$. O cálculo das vazões internas, descrito neste tópico, será iterado até que a estimativa $pF_{k,1}$ resulte num balanço de massa coerente dentro do estágio.

Através de $pF_{k,1}$ e da função f_3 da centrífuga (Capítulo 4.2), pode-se calcular a vazão $G_{k,1}$, como mostra a equação 6.7.

$$G_{k,i} = 50 \cdot pF_{k,i} \quad i = 1, \dots, N_k \quad (6.7)$$

A vazão no ponto seguinte da tubulação, $F_{k,2}$, é então dada pela equação 6.8.

$$F_{k,2} = F_{k,1} - G_{k,1} \quad (6.8)$$

Para o cálculo da pressão $pF_{k,2}$ no ponto seguinte, é preciso analisar o escoamento neste segmento da tubulação. Esta análise envolve o cálculo dos números de Reynolds, Knudsen e Mach, descritos no capítulo 6.9, para caracterizar o tipo de escoamento.

Em todos os casos abordados neste estudo os números de Knudsen e Mach foram tais que o escoamento na tubulação é considerado incompressível e contínuo, exceto nas restrições e válvulas.

Desta forma, a queda de pressão ao longo do escoamento pode ser calculada pela equação de Bernoulli, descrita no capítulo 6.10. O número de Reynolds determinará se o escoamento é laminar, de transição ou turbulento e, portanto, permitirá escolher o fator de Fanning apropriado.

Assim, $pF_{k,2}$ é dada pela equação 6.9 a seguir:

$$pF_{k,2} = pF_{k,1} - \frac{\rho \cdot \left(\frac{4F_{k,2}}{\rho \pi D^2} \right)^2 \cdot L_{k,1} \cdot 2f}{D} \quad (6.9)$$

onde $L_{k,1}$ é o comprimento equivalente do trecho de tubulação entre as centrífugas 1 e 2 do estágio k , f é o fator de Fanning para as condições de escoamento, D é o diâmetro interno da tubulação e ρ a densidade do gás nas condições de temperatura e pressão do trecho.

Através de $pF_{k,2}$ e da função f_3 , calcula-se $G_{k,2}$ e, em seguida, a pressão

$pF_{k,3}$ de forma análoga ao descrito pelas equações 6.8 e 6.9, respectivamente.

Os cálculos prosseguem desta forma até que o sentido do escoamento na tubulação se inverta. O ponto de inversão é identificado quando a vazão calculada pela equação 6.8 produz um valor negativo. Deste ponto em diante, portanto, utilizam-se as equações 6.10 e 6.11 no lugar das equações 6.8 e 6.9, respectivamente.

$$F_{k,i+1} = F_{k,i} + G_{k,i} \quad (6.10)$$

$$pF_{k,i+1} = pF_{k,i} + \frac{\rho \cdot \left(\frac{4F_{k,i+1}}{\rho \pi D^2} \right)^2 \cdot L_{k,i} \cdot 2f}{D} \quad (6.11)$$

Os cálculo prosseguem, por fim, até a extremidade direita da tubulação de alimentação do estágio k .

A vazão F_{k,N_k+1} assim obtida deve ser igual à vazão $F_{k,direito}$, ou W_{k+1} , que já é conhecida pela estimativa inicial de Θ_k .

Se as duas vazões não forem numericamente iguais, altera-se o valor estimado de $pF_{k,1}$ de forma iterativa até que o balanço de massa na tubulação de alimentação do estágio seja satisfeito.

A mesma análise é repetida para todos os estágios, determinando-se assim os valores $pF_{k,i}$ e $G_{k,i}$.

Vazões Internas de Produto e Rejeito dos Estágios

O balanço de massa nas tubulações de alimentação determina os valores de pressão $pF_{k+1,1}$ e o balanço de massa de vazões externas dos estágios determina o fluxo P_k . Então, por perda de carga, é possível calcular a pressão final na tubulação de produto pP_{k,N_k} .

Após análise do escoamento por Re, Kn e Mach, calcula-se pP_{k,N_k} através da

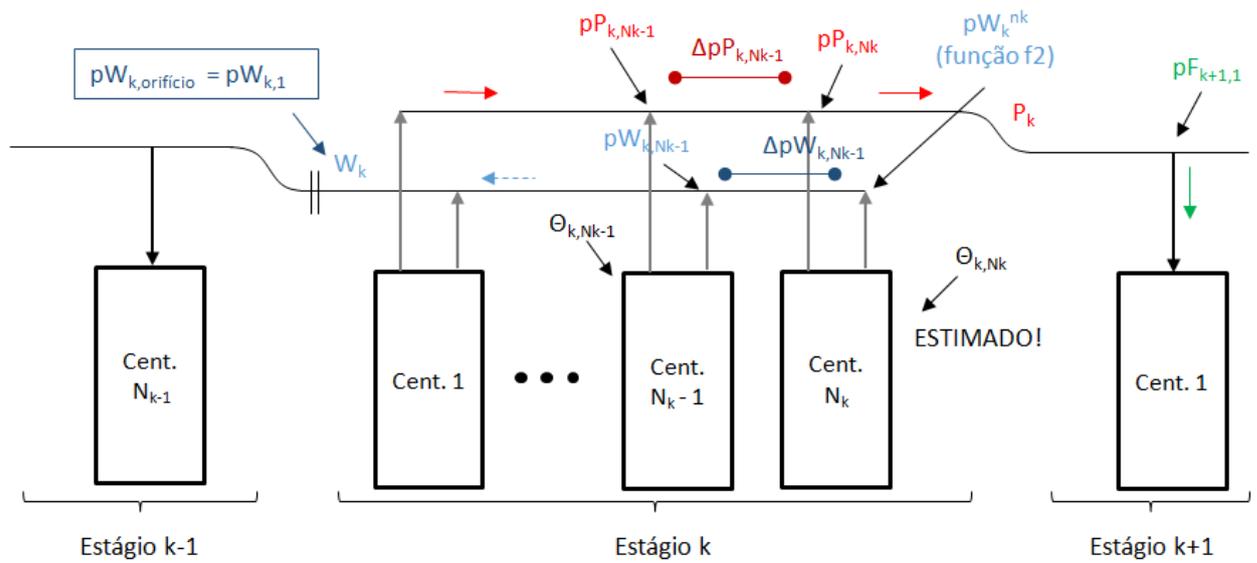


Figura 6.5: Diagrama do algoritmo para cálculo nas tubulações de produto e rejeito

equação 6.12.

$$pP_{k,N_k} = pF_{k+1,1} + \frac{\rho \cdot \left(\frac{4P_k}{\rho\pi D^2} \right)^2 \cdot L_{k,N_k} \cdot 2f}{D} \quad (6.12)$$

Os valores locais de pressão pW_{k,N_k} e pP_{k,N_k} das tubulações de rejeito e produto estão relacionados pela função f_2 (Capítulo 4.2) da centrífuga juntamente com Θ_{k,N_k} e G_{k,N_k} .

Como G_{k,N_k} já é conhecido, estima-se Θ_{k,N_k} para obter pW_{k,N_k} , conforme equação 6.13.

$$pW_{k,N_k} = f_2(pP_{k,N_k}, \Theta_{k,N_k}, G_{k,N_k}) \quad (6.13)$$

Em seguida, calculam-se as vazões de produto e rejeito no trecho entre as centrífugas adjacentes N_k e $N_k - 1$ a partir dos valores conhecidos de G_{k,N_k} e Θ_{k,N_k} , conforme equações 6.14 e 6.15.

Vazão de produto:

$$P_{k,N_{k-1}} = P_{k,N_k} - \Theta_{k,N_k} \cdot G_{k,N_k} \quad (6.14)$$

Vazão de rejeito:

$$W_{k,N_k-1} = W_{k,N_k} + (1 - \Theta_{k,N_k}) \cdot G_{k,N_k} \quad (6.15)$$

onde $W_{k,N_k} = 0$.

Conhecendo-se as vazões, através da perda de carga é possível calcular as pressões da centrífuga adjacente pP_{k,N_k-1} e pW_{k,N_k-1} , conforme equações 6.16 e 6.17.

Pressão de produto:

$$pP_{k,N_k-1} = pP_{k,N_k} + \frac{\rho \cdot \left(\frac{4P_{k,N_k-1}}{\rho \pi D^2} \right)^2 \cdot L_{k,N_k-1} \cdot 2f}{D} \quad (6.16)$$

Pressão de rejeito:

$$pW_{k,N_k-1} = pW_{k,N_k} - \frac{\rho \cdot \left(\frac{4W_{k,N_k-1}}{\rho \pi D^2} \right)^2 \cdot L_{k,N_k-1} \cdot 2f}{D} \quad (6.17)$$

Em posse destes valores, aplica-se novamente a equação 6.13 porém com o objetivo de obter o corte Θ_{k,N_k-1} , uma vez que todas as outras variáveis envolvidas já estão determinadas.

Em seguida, calculam-se os análogos das equações 6.14, 6.15, 6.16 e 6.17 para a centrífuga $N_k - 2$.

O procedimento se repete até a primeira centrífuga do estágio k , localizada na extremidade esquerda da tubulação, onde a vazão W_k obtida deve ser numericamente igual à vazão $F_{k-1,direito}$, que é conhecida pela pelo balanço de massa global dos estágios.

Se os valores forem diferentes, altera-se a estimativa inicial de Θ_{k,N_k} de forma iterativa até que o balanço de massa nas tubulações de rejeito e produto seja satisfeito.

O mesmo algoritmo de cálculo é repetido para todos os estágios, determinando-se assim os valores $pP_{k,i}$, $pW_{k,i}$ e $\Theta_{k,i}$.

Uma vez que todas as incógnitas que caracterizam o escoamento estão determinadas, os valores de $pW_{k,1}$, ou seja, os valores de pressão de rejeito para a primeira centrífuga de cada estágio, são confrontados com os valores calculados através da vazão W_k pela função $f_{restricao}$ (Capítulo 6.9) da restrição presente entre os estágios, ou seja:

$$pW_{k,1} = pW_{k,restricao} = f_{restricao}(W_k, dow_k) \quad (6.18)$$

Caso os valores numéricos não correspondam, alteram-se as estimativas iniciais de cortes dos estágios Θ_k e o procedimento de cálculo da ETAPA I recomeça até que esta condição seja satisfeita.

6.7 ETAPA II: Separação Isotópica

Com os parâmetros de fluidodinâmica definidos, é possível fazer a análise das composições e eficiência de separação isotópica.

O cálculo se inicia estimando-se os valores de $z_{k,esquerdo}$ e $z_{k,direito}$ das correntes de alimentação de todos os estágios, conforme figura 6.6.

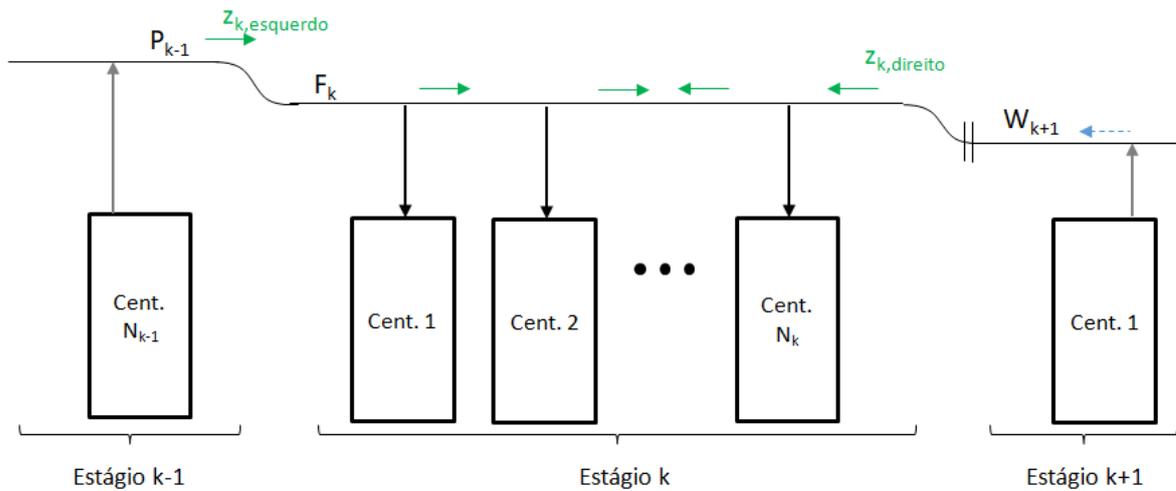


Figura 6.6: Composições do estágio de alimentação: existem apenas duas por estágio, uma da corrente da direita e outra da esquerda

Considera-se, por hipótese, que o valor da composição z_k da tubulação de alimentação de um estágio é proveniente da mistura perfeita das correntes das extremidades deste estágio, portanto:

$$z_k = \frac{F_{k,direito} \cdot z_{k,direito} + F_{k,esquerdo} \cdot z_{k,esquerdo}}{F_k} \quad (6.19)$$

Os valores de z_k obtidos permitem iniciar o cálculo dos balanços de massa parciais dos estágios.

A variável de separação isotópica que relaciona o valor da composição de alimentação de uma centrífuga com a composição de produto $y_{k,i}$ é o fator de enriquecimento $\beta_{k,i}$ dado pela função f_1 . Como as variáveis de entrada f_1 foram calculadas na Etapa I, é possível se obter $\beta_{k,i}$ e $y_{k,i}$ para todas as centrífugas da cascata de forma

direta, conforme equação 6.20.

$$\beta_{k,i} = f_1(pP_{k,N_k}, \Theta_{k,N_k}, G_{k,N_k}) \quad k = 1, \dots, N \quad i = 1, \dots, N_k \quad (6.20)$$

Através da composição z_k da alimentação dos estágios e da definição de β , obtém-se a concentração $y_{k,i}$ de produto das centrífugas, conforme equação 6.23.

$$\beta_{k,i} = \frac{y_{k,i}/(1 - y_{k,i})}{z_k/(1 - z_k)} \quad (6.21)$$

$$\frac{y_{k,i}}{1 - y_{k,i}} = \beta_{k,i} \frac{z_k}{1 - z_k} \quad (6.22)$$

$$y_{k,i} = \frac{\beta z/(1 - z_k)}{1 + \beta z_k/(1 - z_k)} \quad k = 1, \dots, N \quad i = 1, N_k \quad (6.23)$$

Por hipótese, ocorre a mistura perfeita das vazões de produto num mesmo estágio e portanto a composição de produto do estágio é dada pela equação 6.24.

$$y_k = \frac{\sum_i \Theta_{k,i} \cdot G_{k,i} \cdot y_{k,i}}{P_k} \quad (6.24)$$

As composições de rejeito $x_{k,i}$ são calculadas a partir da definição do corte da equação 3.14 do Capítulo 3.3. A equação 6.25 a seguir é uma aplicação desta definição ao presente caso.

$$x_{k,i} = \frac{z_k - \Theta_{k,i} y_{k,i}}{1 - \Theta_{k,i}} \quad k = 1, \dots, N \quad i = 1, N_k \quad (6.25)$$

Por hipótese, ocorre a mistura perfeita das vazões de rejeito num mesmo estágio e portanto a composição de rejeito do estágio é dada por:

$$x_k = \frac{\sum_i (1 - \Theta_{k,i}) \cdot G_{k,i} \cdot x_{k,i}}{W_k} \quad (6.26)$$

Pelo balanço de massa parcial dos estágios da cascata, e observando-se a

figura 6.6, percebe-se que o valor de $z_{k,esquerdo}$ deve corresponder a y_{k-1} e, analogamente, $z_{k,direito}$ deve corresponder a x_{k+1} .

Se os valores não corresponderem, alteram-se as estimativas iniciais das composições $z_{k,esquerdo}$ e $z_{k,direito}$. Os cálculos da Etapa II são, então, refeitos até que haja convergência entre os valores.

Uma vez convergidos, todas as variáveis da cascata estão determinadas.

6.8 Análise do Escoamento

O escoamento pode ser classificado pela análise de três números adimensionais clássicos na mecânica dos fluidos: Reynolds, Knudsen e Mach.

Número de Reynolds

O número de Reynolds é dado pela expressão da equação 6.27,

$$Re = \frac{\rho D v}{\mu} \quad (6.27)$$

onde v é a velocidade do fluido em m/s.

Para $Re < 2100$, o escoamento é do tipo laminar e bem comportado. É neste tipo de escoamento que as equações perda de carga estão mais bem definidas e correspondem melhor aos casos experimentais. Para $Re > 5000$, o regime é turbulento, ou seja, o escoamento é desordenado e aleatório.

Para $2100 \leq Re \leq 5000$, o regime é de transição. Neste regime não existem equações bem definidas para a perda de carga no escoamento (Bird, Stewart e Lightfoot 2002). Portanto, para escoamento de transição, as equações de perda de carga aplicadas foram as mesmas do regime turbulento neste estudo.

Número de Knudsen

O número de Knudsen é dado pela expressão da equação 6.28,

$$Kn = \frac{\lambda_{livre}}{D} = \frac{k_b T d_{mol} p \pi}{D} \quad (6.28)$$

onde λ_{livre} é o livre caminho médio da molécula de UF₆ em m, d_{mol} é o diâmetro da molécula em m, k_b é a constante de Boltzmann e p é a pressão média da tubulação em Pa.

Para $Kn < 0,001$, o escoamento é do tipo contínuo, ou seja, o caminho livre das moléculas é significativamente menor do que o diâmetro delas. Neste caso, as equações de transferência de quantidade de movimento (Navier-Stokes) podem ser aplicadas e, por consequência, toda a teoria derivada delas. O cálculo para perda de carga neste caso está bem definido pela equação de Bernoulli.

Para $Kn > 10$, o escoamento é do tipo molecular, e passa a ser necessário aplicar métodos estatísticos para caracterizar o escoamento pelo movimento das moléculas.

Caso $0,001 \leq Kn \leq 10$, o escoamento é de transição (Ayub et al. 2011).

Ao longo do estudo, o único tipo de escoamento verificado foi o contínuo.

Número de Mach

O número de Mach é dado pela expressão da equação 6.29,

$$Ma = \frac{v}{v_{som}} \quad (6.29)$$

onde v_{som} é a velocidade do som no fluido em m/s.

Para $Ma \leq 0,3$, ou seja, quando a velocidade do fluido é pequena comparada

à velocidade do som no mesmo fluido, a hipótese de escoamento incompressível é válida (Landau e Lifshitz 1987).

Em toda a tubulação da cascata o escoamento é considerado incompressível pelo cálculo de Mach, exceto nas restrições interestágios e em válvulas, onde Mach atinge o valor 1.

No projeto de cascatas, deve-se tomar o cuidado de verificar que nenhuma seção ao longo da tubulação possua escoamentos não-contínuos e/ou compressíveis, uma vez que esses tipos de escoamentos são menos previsíveis do que seus opostos: contínuos e incompressíveis.

6.9 Cálculo da Perda de Carga

Escoamento Incompressível

Ao longo do escoamento do gás na tubulação de uma cascata, os números de Mach são, em geral, muito menores do que a unidade, ou seja:

$$\frac{\delta\rho}{\rho} \sim Ma^2 \ll 1 \quad (6.30)$$

Portanto o escoamento pode ser tratado como sendo incompressível (Fay 1994).

Para escoamento contínuo, incompressível e desenvolvido, pode ser aplicada a equação de Bernoulli a seguir. Esse é o tipo de escoamento presente ao longo da tubulação da cascata, exceto na passagem por restrições interestágios e válvulas de controle.

$$\frac{1}{2}(v_2^2 - v_1^2) + g(z_2 - z_1) + \frac{1}{\rho}(p_2 - p_1) + \frac{\frac{1}{2}v_{medio}^2 \cdot L \cdot f}{D/4} = 0 \quad (6.31)$$

$$\frac{1}{2}(v_2^2 - v_1^2) + g(z_2 - z_1) + \frac{1}{\rho}(p_2 - p_1) + \frac{\left(\frac{4\dot{w}}{\rho\pi D^2}\right)^2 \cdot L \cdot 2f}{D} = 0 \quad (6.32)$$

onde

$z_2 - z_1$: diferença de cota entre os extremos da tubulação (m);

v_1 : velocidade na seção de entrada;

v_2 : velocidade na seção de saída;

ρ : densidade do gás (kg/m³);

f : fator de Fanning.

No caso de escoamento laminar (Bird, Stewart e Lightfoot 2002):

$$f = \frac{16}{Re} \quad (6.33)$$

No caso de escoamento turbulento para tubos hidraulicamente lisos (Bird, Stewart e Lightfoot 2002):

$$f = \frac{0,0791}{Re^{0,25}} \quad (6.34)$$

Para o UF₆, a viscosidade é dada por (Migliorini 2013):

$$\mu = 3,907 \cdot 10^{-6} + 0,0383 \cdot 10^{-6} \cdot T + 2,783 \cdot 10^{-11} \cdot T^2 - 2,099 \cdot 10^{-14} \cdot T^3 [Pa.s] \quad (6.35)$$

Singularidades na Tubulação

Cascatas são normalmente dispostas em corredores, conforme figura 6.7, com poucas singularidades ao longo da tubulação dos estágios.

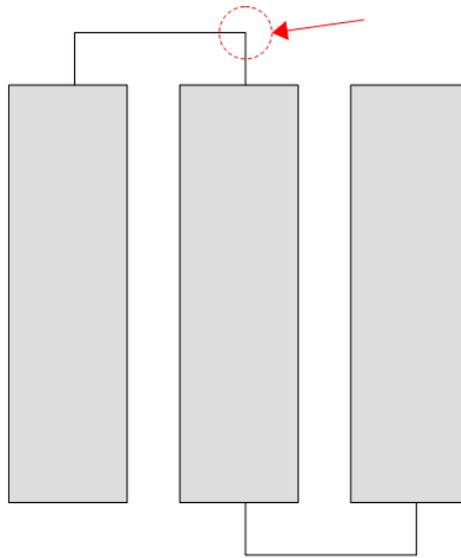


Figura 6.7: Centrífugas em um cascata são geralmente dispostas em formato de colunas

As singularidades mais significativas são os cotovelos de 90° utilizados para conectar tubulações de corredores adjacentes. Nos cálculos com a equação de Bernoulli, essas singularidades foram incluídas através do seu comprimento equivalente $L_{k,i}$.

Escoamento Compressível

Em cascatas podem existir restrições entre a tubulação de rejeito do estágio k com a tubulação de alimentação do estágio $k - 1$. Estas restrições são calculadas de forma a diminuir a pressão de rejeito para o valor projetado para a alimentação das centrífugas.

Nestas restrições o gás adquire velocidade comparável à velocidade do som e, portanto, o escoamento passa a ser compressível. O mesmo acontece nas válvulas que controlam as saídas de produto e rejeito da cascata, conforme figura 6.8.

As referidas restrições são do tipo convergente-divergente e a relação de pressões de estagnação à montante (p_1) e à jusante (p_2) é tal que a seguinte condição é satisfeita:

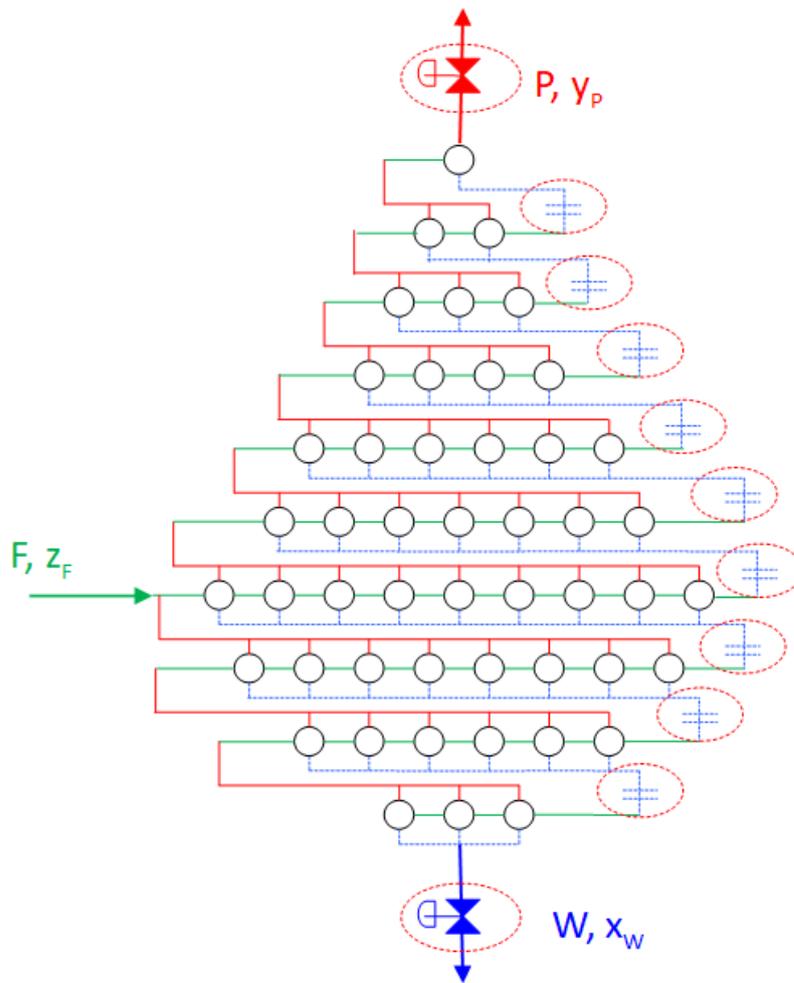


Figura 6.8: Restrições em uma cascata onde o escoamento é crítico (Mach = 1)

$$\frac{p_2}{p_1} < r_c \quad (6.36)$$

onde $r_c = \left(\frac{2}{\gamma+1}\right)^{\gamma/(\gamma-1)} = 0,593$ é a razão crítica do hexafluoreto de urânio, para o qual $\gamma = 1,062$ (Migliorini 2013).

Neste caso, pode-se dizer que ocorreu um escoamento crítico na seção de menor área transversal da restrição, ou seja, a velocidade do gás atingiu a velocidade do som para aquele meio.

São admitidas as seguintes hipóteses (Kayser e Shambaugh 1991):

1. Gás ideal com calores específicos constantes;

2. Escoamento isentrópico e adiabático;
3. Regime permanente;
4. Ausência de reações químicas;
5. Velocidade de aproximação da restrição desprezível;
6. Campo de velocidades e propriedades do fluido constantes na seção transversal do escoamento; e
7. Existência apenas da componente axial da velocidade do fluido;

Assim, pode-se calcular a vazão mássica do gás através da equação 6.37.

$$\dot{m} = \frac{A \cdot M \cdot p_1}{R \cdot T_1} \cdot r_c^{1/\gamma} \sqrt{\frac{2\gamma \cdot R \cdot T_1}{M \cdot (\gamma - 1)} (1 - r_c^{(\gamma-1)/\gamma})} \quad (6.37)$$

onde

\dot{m} : vazão mássica do gás;

A : menor área da seção transversal da restrição;

M : massa molar do gás ;

R : constante dos gases;

p_1 : pressão à montante;

T_1 : temperatura à montante.

Para adaptar a equação para o caso real, que não é isentrópico, acrescenta-se um coeficiente de descarga C_d , obtido experimentalmente:

$$\dot{m} = C_d \cdot \frac{A \cdot M \cdot p_1}{R \cdot T_1} \cdot r_c^{1/\gamma} \sqrt{\frac{2\gamma \cdot R \cdot T_1}{M \cdot (\gamma - 1)} (1 - r_c^{(\gamma-1)/\gamma})} \quad (6.38)$$

Pode-se notar que a equação 6.38 depende apenas da área transversal A e de duas variáveis do escoamento: p_1 e T_1 . Como no cálculo de cascatas uma das

hipóteses iniciais é a de temperatura constante, a vazão mássica depende apenas de p_1 . Esta relação permite que os sistemas descritos nesta tese para resolução de cascatas sejam possíveis e determinados.

Após manipulações algébricas, pode-se obter a equação 6.39 para o cálculo de p_1 em função da vazão mássica. Esta função foi aplicada nos Capítulos 5.3 e 6.6 no formato $f_{restricao}$.

$$p_1 = \frac{\dot{m}}{\left(C_d \cdot \frac{A \cdot M}{R \cdot T_1} \cdot r_c^{1/\gamma} \sqrt{\frac{2\gamma \cdot R \cdot T_1}{M \cdot (\gamma - 1)} (1 - r_c^{(\gamma - 1)/\gamma})} \right)} \quad (6.39)$$

$$p_1 = f_{restricao}(\dot{m}, A) \quad (6.40)$$

6.10 Método Numérico

Adaptação do Método do Ponto Fixo

Para a resolução numérica dos balanços de massa total e parcial (fluidodinâmica e separação isotópica, respectivamente) não foi possível utilizar bibliotecas de otimização já existentes da linguagem R.

Devido à alta complexidade do sistema, dada pelo elevado número de incógnitas e pela não-linearidade de funções que descrevem o comportamento das centrífugas, os métodos de resolução de sistemas das bibliotecas da linguagem utilizada não foram capazes de convergir.

Além da linguagem R, houve tentativas com bibliotecas do software MATLAB, que também não foram capazes de alcançar a convergência, uma vez que o tempo de simulação se tornou muito extenso.

Portanto, foi produzido um método próprio de resolução, proveniente de uma adaptação do método do Ponto Fixo (Solomon 2015) generalizado para um sistema

de equações não-lineares.

Segundo este método, dada uma equação não-linear $f(x) = 0$, pode-se reescrever a equação de forma que $f(x) = g(x) - x = 0$. Assim, a nova equação a ser resolvida é dada por $g(x) = x$. Isto significa que o valor x^* procurado é o ponto de encontro entre uma reta $y = x$ e a curva $y = g(x)$. A figura 6.9 representa de forma gráfica a situação.

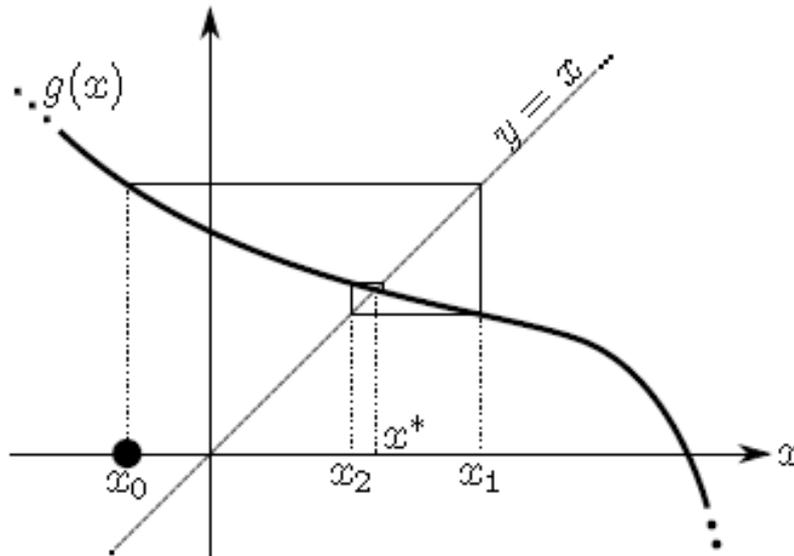


Figura 6.9: Representação gráfica do método do ponto fixo (Solomon 2015)

O método consiste em, a partir de uma inicialização x_0 , substituir os valores calculados em $g(x_j)$ como próximo valor da iteração (x_{j+1}), conforme equação 6.41.

$$x_{j+1} \leftarrow g(x_j) \quad (6.41)$$

A substituição acontece até que se alcance um valor x^* que satisfaça a relação:

$$x^* = g(x^*) \quad (6.42)$$

A aplicação deste método no formato acima não foi suficiente para garantir a convergência. Portanto foi aplicada uma adaptação, dada pela equação 6.43.

$$x_{j+1} = x_j + \lambda \cdot (g(x_j) - x_j) \quad (6.43)$$

Observou-se que a convergência ocorre mais rapidamente e evita mínimos locais com erros elevados ao adicionar um fator de aceleração λ ao método.

O valor de λ é inicialmente definido pelo usuário. Caso o erro da iteração aumente em relação à iteração anterior, λ é multiplicado por um fator λ_{down} menor do que 1. De forma análoga, caso o erro diminua e as iterações caminhem para uma solução aceitável, λ é multiplicado por um fator λ_{up} maior do que 1, diminuindo assim o tempo de resolução.

A variação de λ evita que o processo de resolução fique preso em irregularidades da função objetivo, o que ocorre com facilidade em funções altamente não lineares, como é o caso.

Os valores de λ_{up} e λ_{down} são dados pelo usuário e sua escolha afeta significativamente o caminhar da solução, podendo até torná-la divergente.

A equação 6.43 representa a solução para apenas uma dimensão, mas pode ser generalizada para n dimensões.

O valor inicial x_0 é dado pelo usuário da mesma forma que os valores de λ . Como em qualquer resolução numérica de sistemas de equações não-lineares, o valor de x_0 , se muito distante da solução do problema, pode causar divergência no algoritmo de resolução. Portanto, sugere-se utilizar como x_0 os valores obtidos a partir do modelo clássico de cascatas.

Etapa I: Fluidodinâmica

Na Etapa I dos cálculos, etapa em que são resolvidos os balanços de massa totais na cascata e nos estágios, as variáveis x a serem calculadas são os valores de Θ_k para os estágios.

A função $g(x)$ é dada pela resolução dos balanços de massa nas tubulações de alimentação, produto e rejeito, conforme descrito no Capítulo 6.6.

Etapa II: Separação Isotópica

Uma vez determinados os parâmetros de pressão, vazão e corte ao longo da cascata, inicia-se a resolução dos balanços de massa parciais. Eles tem como variável x as composições $z_{k,esquerdo}$ e $z_{k,direito}$ das correntes de alimentação em cada extremidade dos estágios.

A função $g(x)$ é dada pela resolução dos balanços de massa parciais nas tubulações de alimentação, produto e rejeito, considerando a hipótese de mistura perfeita dentro destas tubulações.

7 Resultados e Discussão

7.1 Validação do Modelo

A validação do modelo proposto foi feita através da comparação com o modelo clássico para um caso em que o escoamento na tubulação seja inteiramente laminar, condição para a qual o modelo clássico tradicionalmente demonstra concordância com os resultados experimentais.

Para tanto, foi criada uma cascata com as configurações da tabela 7.1, utilizando a centrífuga modelo do Capítulo 4.3 e as condições nominais de operação da tabela 7.2. A vazão de alimentação escolhida para satisfazer às condições nominais da tabela foi de $F = 12623$ kg/ano, e a composição corresponde à do urânio natural, $z = 0,711\%$.

Nas condições apresentadas, os resultados obtidos para são dados pela tabela 7.3.

Tabela 7.1: Configuração da cascata para validação do modelo proposto

Estágio	n_k
1	29
2	60
3	46
4	33
5	21
6	11

Percebe-se que os resultados de composição e corte são similares, com pequenas diferenças entre os dois modelos. O desempenho da cascata, dado pelo poder de separação ΔU apresentou um desvio ligeiramente maior, o que é esperado, uma vez que este valor é calculado utilizando 6 variáveis estimadas (composições e vazões), então naturalmente propaga todos os desvios de estimação das variáveis

Tabela 7.2: Condições nominais de operação para a cascata de validação do modelo

G_{nom}	pF_{nom}	L	D	T_{amb}	P/F
500 kg/a	10 mbar	0,5 m	1 in	25 °C	0,5

Tabela 7.3: Composições e desempenho calculados através do modelo clássico e do proposto para a cascata de validação

Modelo	P/F	y_P	x_W	ΔU (UTS/ano)
Clássico	0,206	1,117 %	0,590 %	380
Proposto	0,205	1,116 %	0,595 %	355
Desvio	- 0,49%	- 1,29%	0,79%	- 6,57%

originais.

A partir desta comparação entre modelos e de análises feitas em paralelo com resultados experimentais de cascatas reais, cuja divulgação não é permitida, pode-se validar o modelo proposto neste estudo.

7.2 Apresentação dos Resultados Completos

Para as próximas análises e apresentação dos resultados completos, foi projetada outra cascata modelo a partir da centrífuga do Capítulo 4.3. A tabela 7.4 apresenta a configuração da cascata e a tabela 7.5 apresenta as condições nominais escolhidas.

Estas condições foram escolhidas de forma a possibilitar a obtenção de escoamento não-laminar em algumas porções da tubulação. Neste caso, existem diferenças significativas entre os resultados do modelo clássico e do modelo proposto, uma vez que o primeiro não inclui, por hipótese, a perda de pressão da tubulação provo-

cada por diferentes regimes de escoamento. Estas diferenças serão discutidas nos capítulos adiante.

Tabela 7.4: Configuração da cascata modelo

Estágio	n_k
1	11
2	26
3	39
4	33
5	27
6	22
7	17
8	13
9	8
10	4

Tabela 7.5: Condições operatórias e variáveis de projeto selecionadas para a cascata modelo

G_{nom}	pF_{nom}	L	D	T_{amb}	P/F
2500 kg/a	10 mbar	0,5 m	1 in	25 °C	0,5

A vazão e a composição da alimentação da cascata ($F = 24018 \text{ kg/a}$ $z_F = 0,711\%$) são dadas, respectivamente, pelo cálculo utilizando a teoria da cascata quase-ideal (Capítulo 5.3) e pela composição do urânio natural.

Estes resultados não são provenientes de nenhuma situação de operação real. Portanto o objetivo neste capítulo não é a validação de resultados, mas a exposição de todas as variáveis calculadas pelo modelo proposto e a avaliação da sensibilidade em relação aos parâmetros.

São 3 tipos de mapas obtidos como resultados da simulação:

1. **Mapa de escoamento:** características do escoamento quanto aos números adimensionais Re , Kn e $Mach$;
2. **Mapa de pressões:** pressões ao longo das tubulações de alimentação, produto e rejeito; e
3. **Mapa de operação das centrífugas:** características de pressão de alimentação, vazão de alimentação e corte de cada centrífuga.

Mapa de Escoamento

O mapa de escoamento da figura 7.1 apresenta a característica de escoamento em todos os pontos da tubulação de alimentação, sendo a primeira linha de acordo com Reynolds, a segunda de acordo com Knudsen e a terceira de acordo com Mach.

No exemplo da figura, as extremidades dos estágios operam em regime de transição segundo Reynolds (regiões em laranja), devido à maior vazão de fluido. Neste caso específico, a hipótese de escoamento laminar adotada pelo modelo clássico seria inválida, o que poderia provocar erros significativos entre os cálculos e os resultados experimentais.

Quanto aos demais números adimensionais, Mach e Knudsen, o escoamento é em geral incompressível e contínuo ao longo da tubulação. Quaisquer outras condições segundo estes números adimensionais provocariam mudanças significativas na operação da cascata.

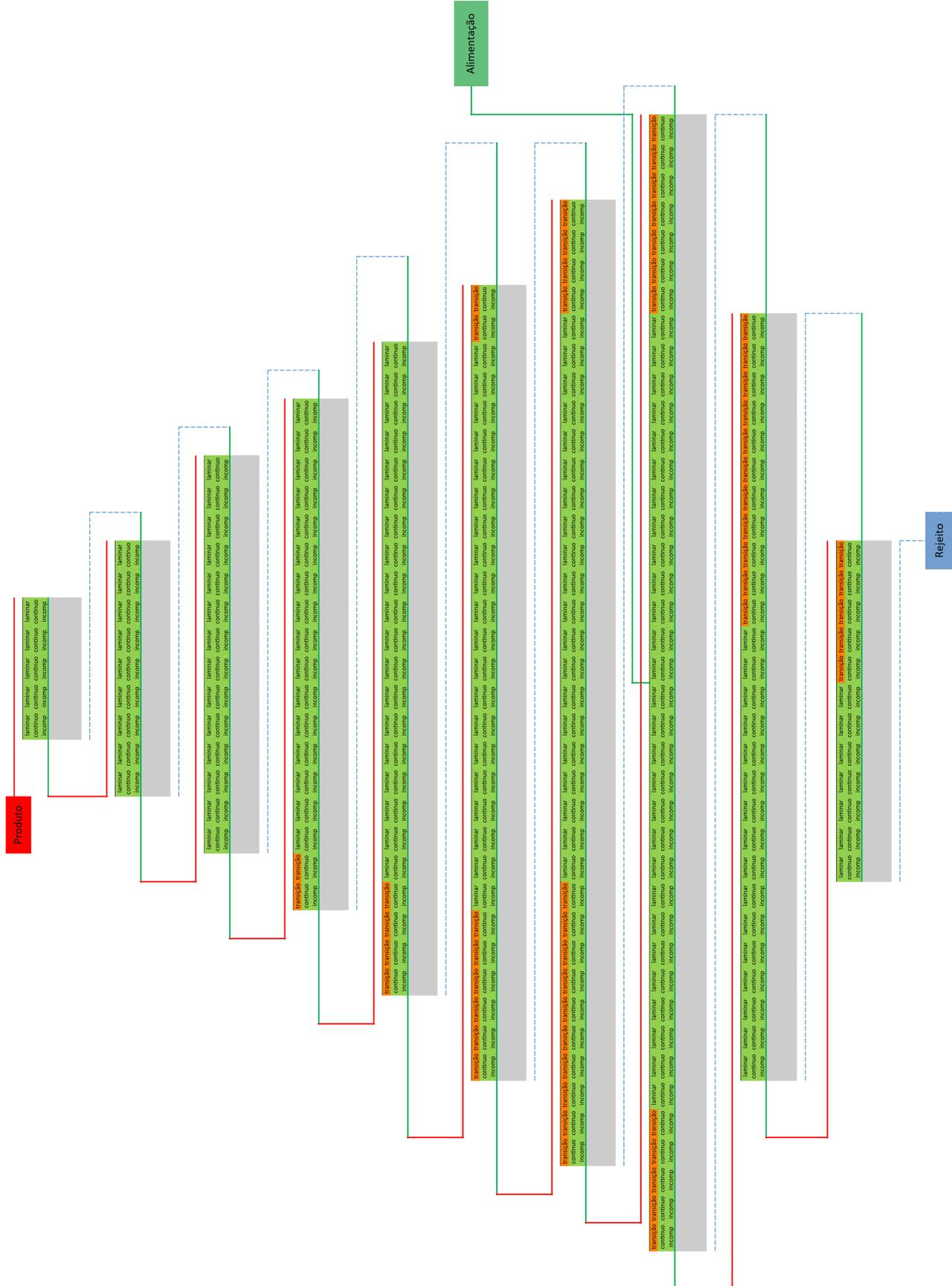


Figura 7.1: Mapa de escoamento para a cascata modelo. As regiões em laranja indicam regime de escoamento de transição segundo Reynolds

Mapa de Pressões

O mapa de pressões da figura 7.2 apresenta a variação de pressão, em mbar, nas tubulações de alimentação, produto e rejeito de cada estágio.

Para melhor visualização, as figuras 7.3 a 7.12 mostram o perfil de pressões estágio a estágio.

Percebe-se que nas regiões onde o escoamento é de transição, que ocorrem principalmente nos estágios que contêm mais centrífugas, a perda de carga é elevada entre trechos adjacentes. Tomando o estágio 3 como exemplo, figura 7.5, percebe-se perda de aproximadamente 30% da pressão de produto entre a centrífuga da extremidade direita e a da esquerda.

Por essa razão, deve-se evitar o projeto de cascatas que contenham escoamento de transição nas condições normais de operação.

Portanto, pode-se concluir que as centrífugas dentro de um mesmo estágio podem operar de formas muito diferentes, uma vez que o que determina o desempenho da centrífuga são as pressões de alimentação, produto e rejeito a que ela está submetida na cascata.

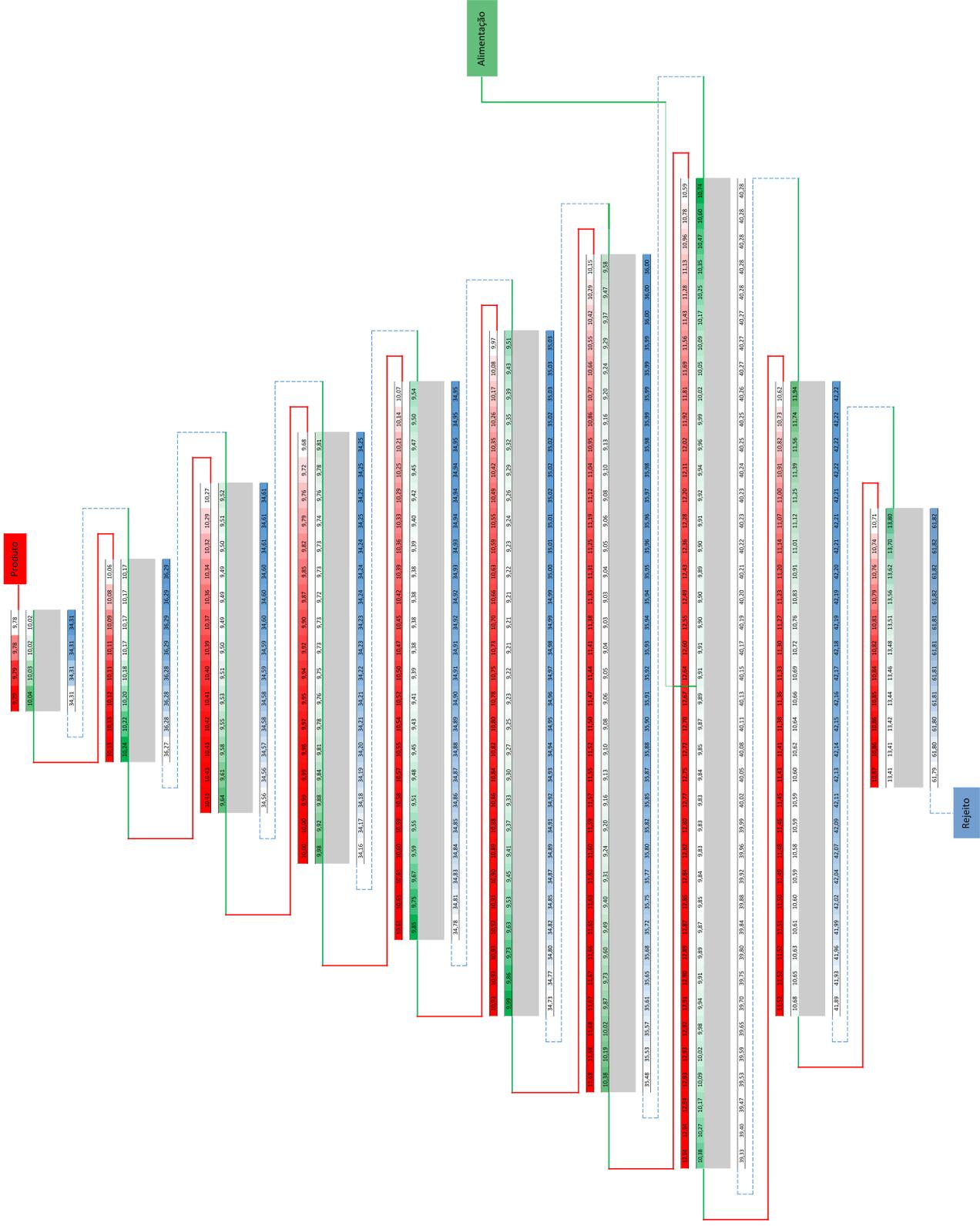


Figura 7.2: Mapa de pressões, em mbar, para a cascata modelo.

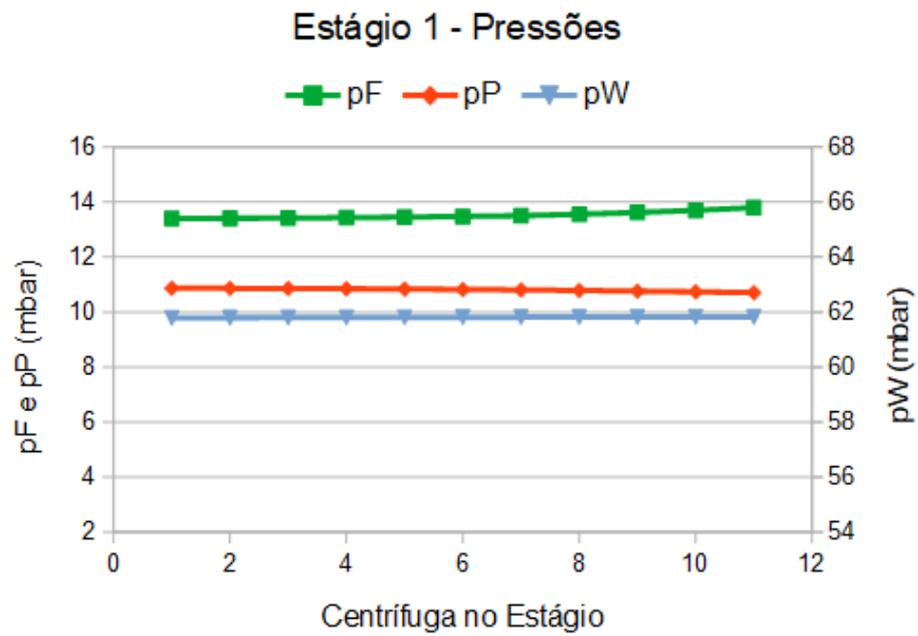


Figura 7.3: Pressões no estágio 1 da cascata modelo.

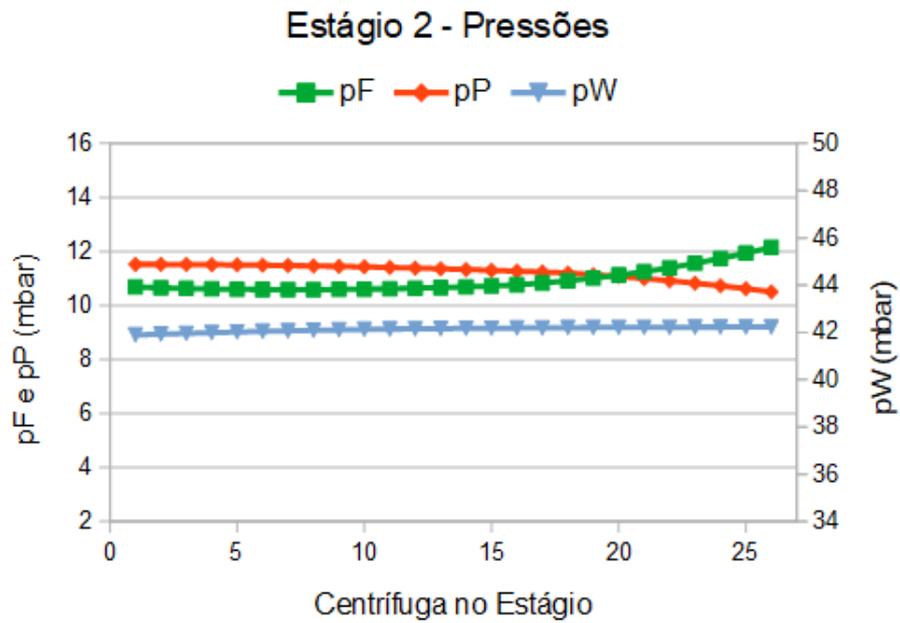


Figura 7.4: Pressões no estágio 2 da cascata modelo.

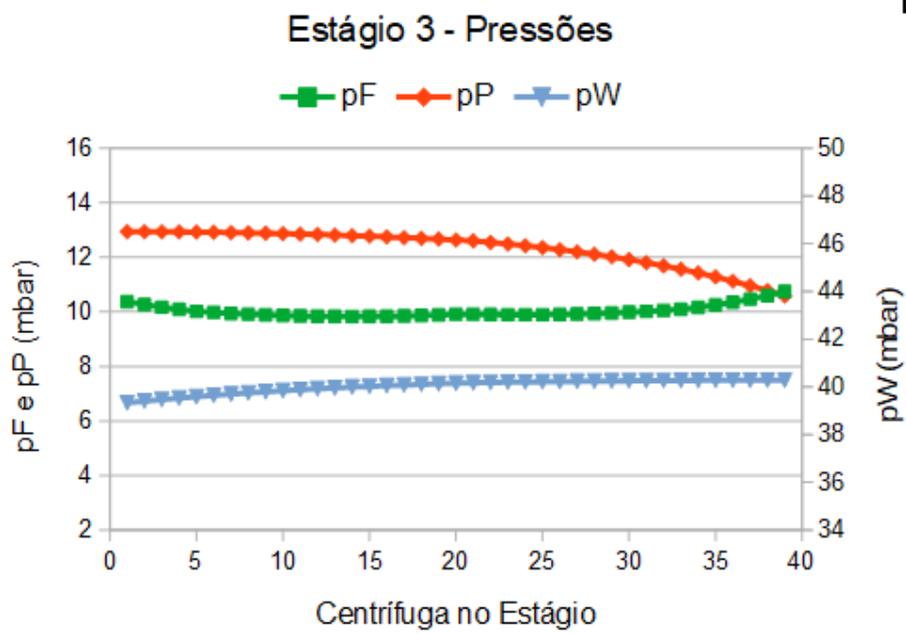


Figura 7.5: Pressões no estágio 3 da cascata modelo.

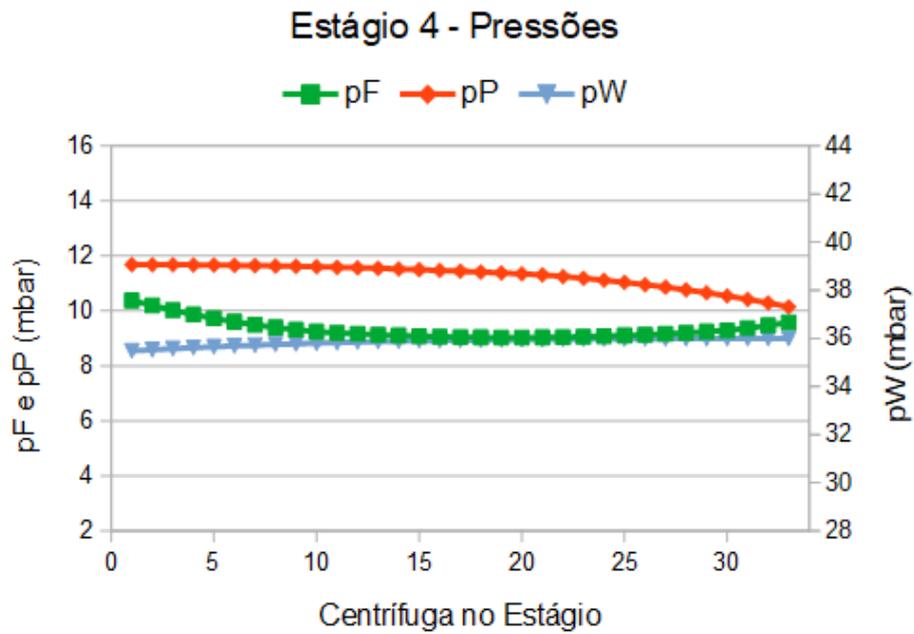


Figura 7.6: Pressões no estágio 4 da cascata modelo.

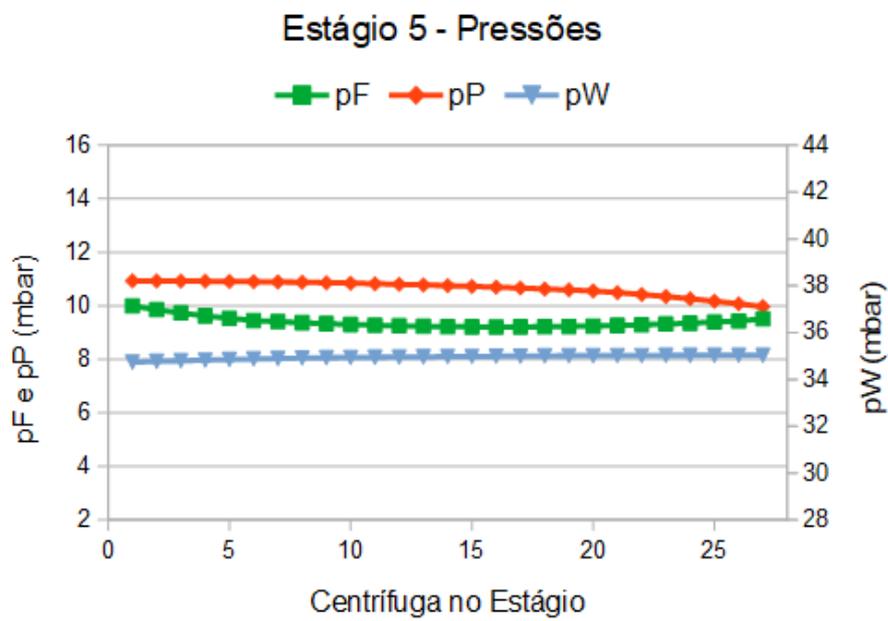


Figura 7.7: Pressões no estágio 5 da cascata modelo.

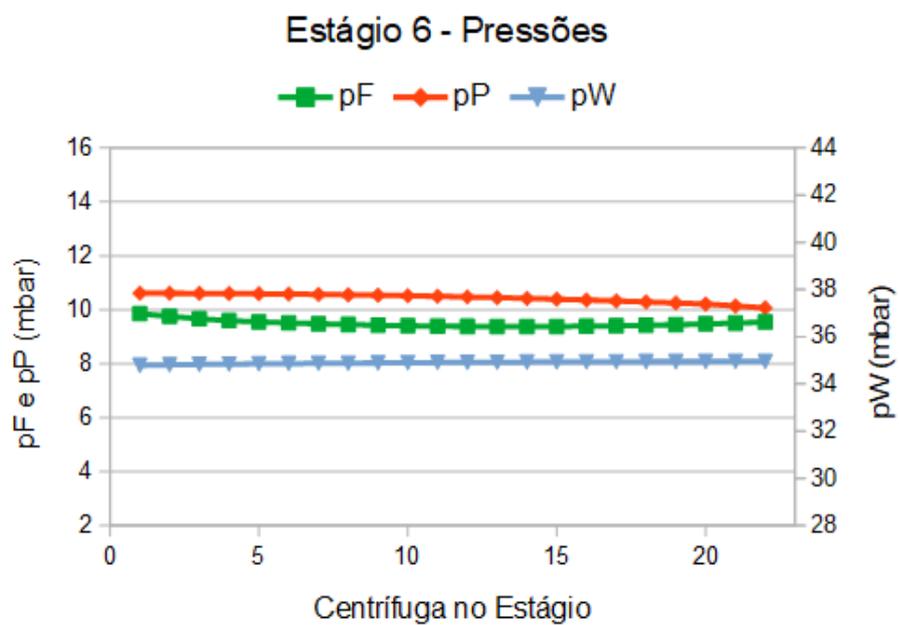


Figura 7.8: Pressões no estágio 6 da cascata modelo.

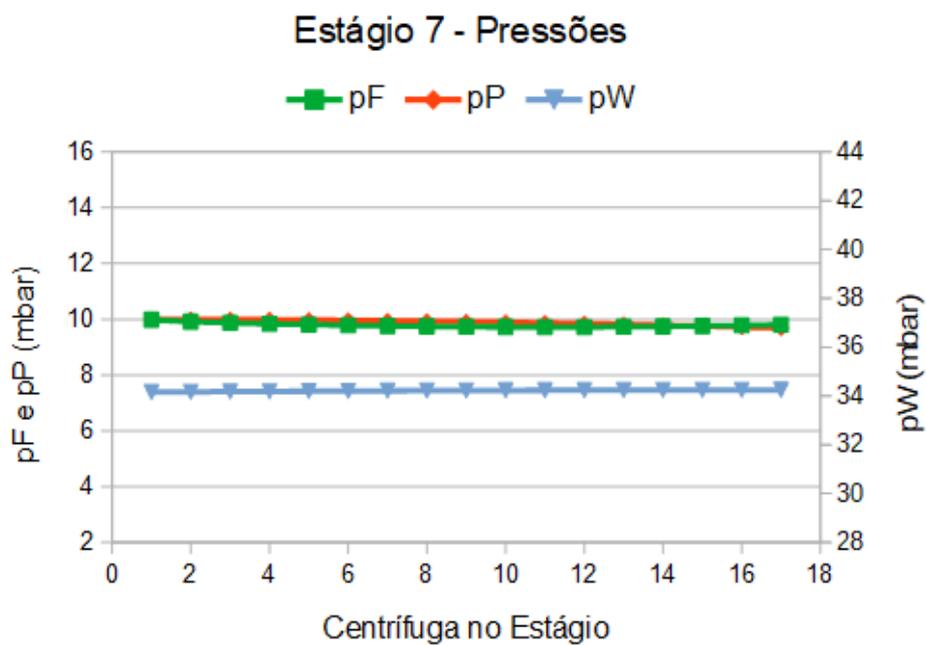


Figura 7.9: Pressões no estágio 7 da cascata modelo.

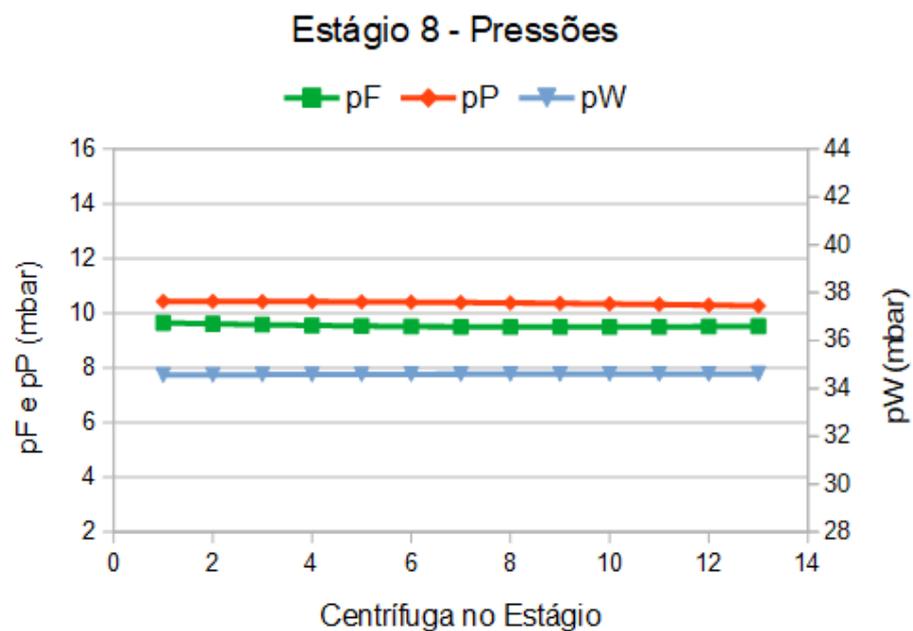


Figura 7.10: Pressões no estágio 8 da cascata modelo.

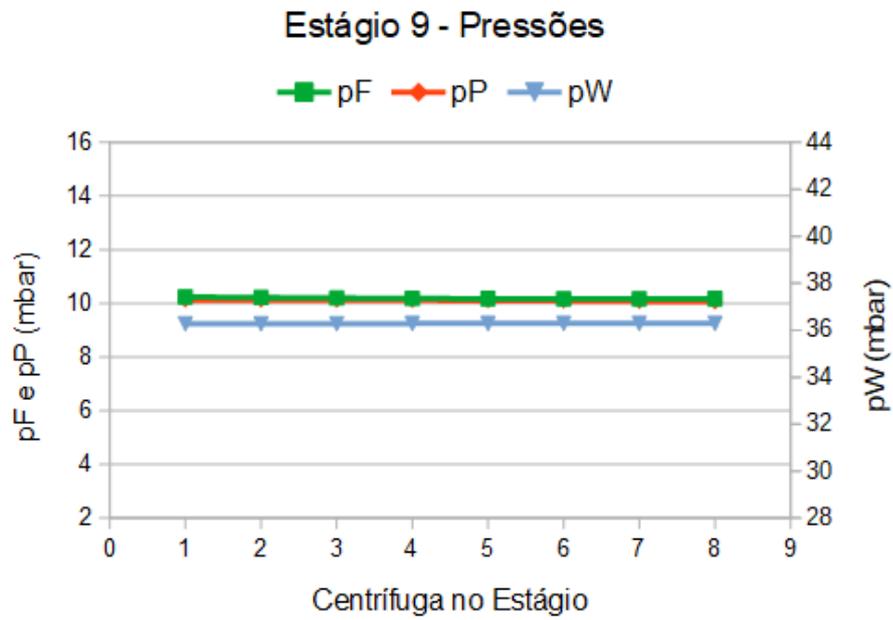


Figura 7.11: Pressões no estágio 9 da cascata modelo.

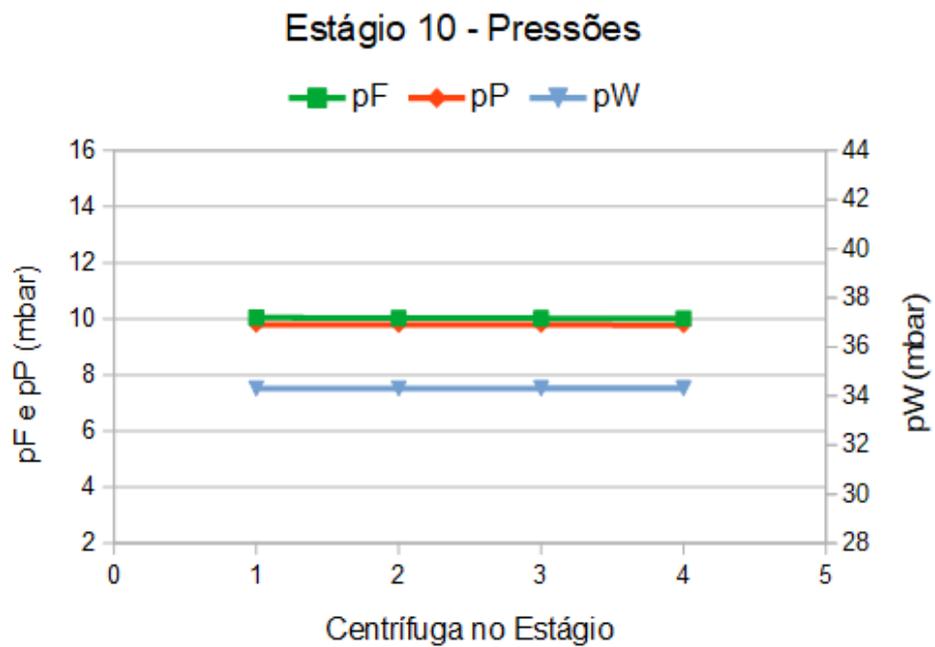


Figura 7.12: Pressões no estágio 10 da cascata modelo.

Mapa de Operação das Centrífugas

O mapa de operação das centrífugas da figura 7.13 apresenta as seguintes variáveis:

1. Pressão na tubulação de alimentação, em mbar, na 1ª linha;
2. Vazão de alimentação da centrífuga, em kg/a, na 2ª linha; e
3. Corte da centrífuga, adimensional, na 3ª linha.

Para melhor visualização, as figuras 7.14 a 7.23 mostram o perfil de vazões de alimentação e corte das centrífugas estágio a estágio.

Como já era possível perceber através do mapa de pressões, centrífugas do mesmo estágio estão sujeitas a condições de operação diferentes, especialmente nos estágios maiores. No mapa de operação das centrífugas a diferença nas condições de operação pode ser percebida claramente pela diferença no corte.

A vazão de alimentação individual também pode sofrer variações significativas dentro do mesmo estágio dependendo das condições de operação.

Estágio 1 - Vazão de Alimentação e Corte

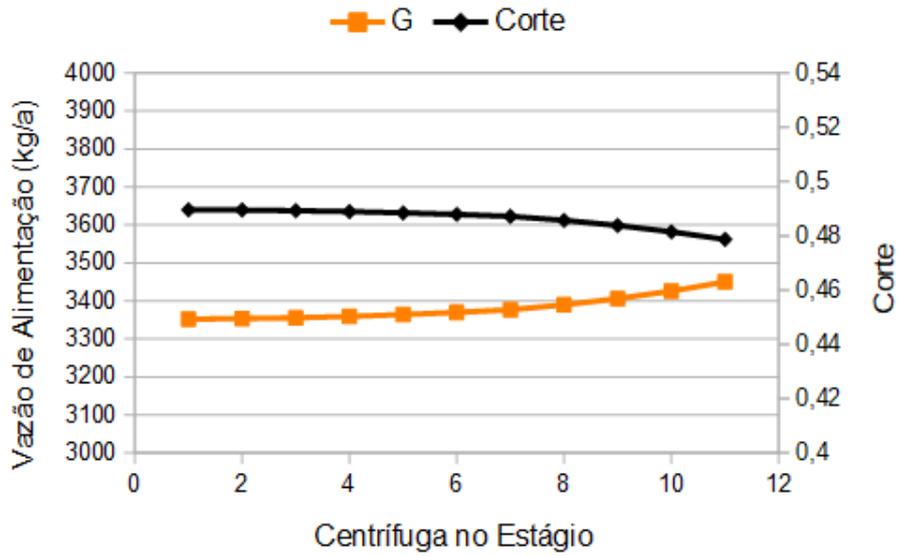


Figura 7.14: Vazões de alimentação e cortes no estágio 1 da cascata modelo.

Estágio 2 - Vazão de Alimentação e Corte

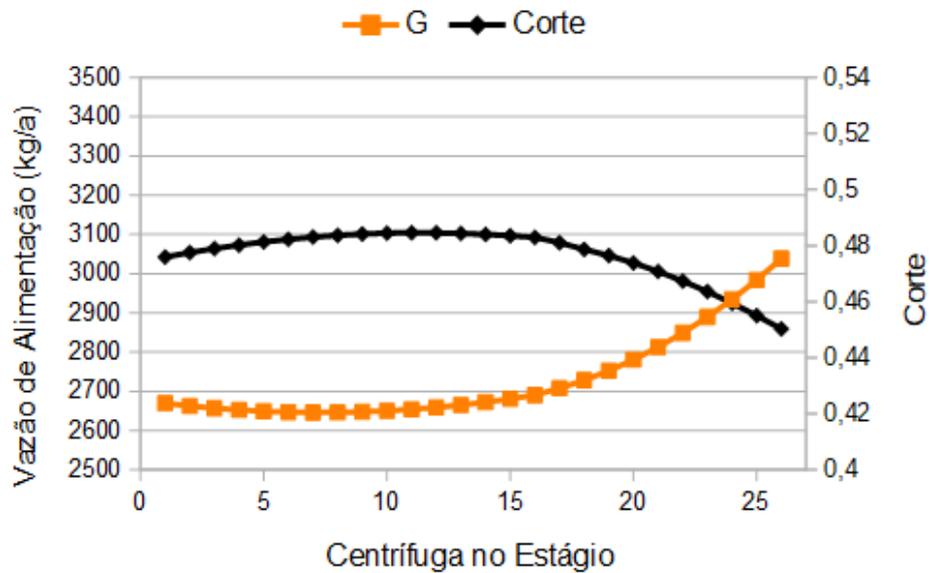


Figura 7.15: Vazões de alimentação e cortes no estágio 2 da cascata modelo.

Estágio 3 - Vazão de Alimentação e Corte

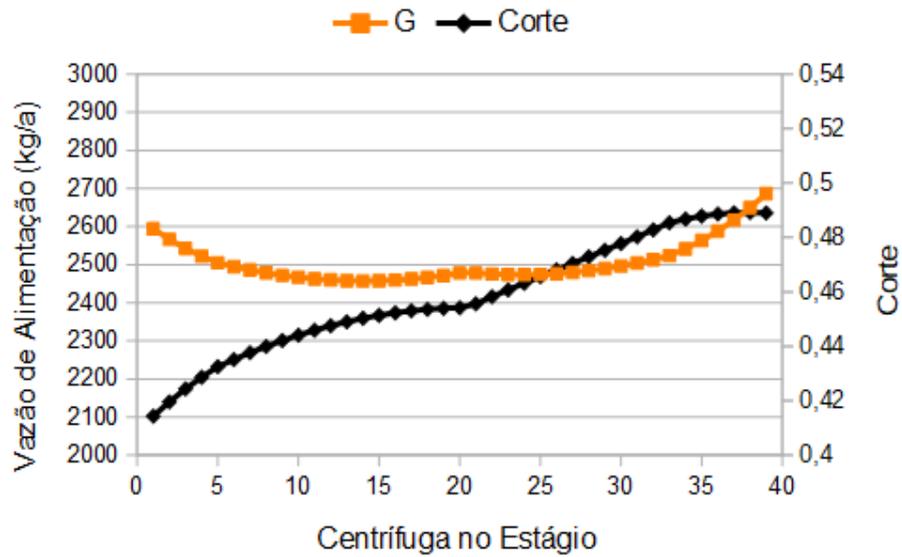


Figura 7.16: Vazões de alimentação e cortes no estágio 3 da cascata modelo.

Estágio 4 - Vazão de Alimentação e Corte

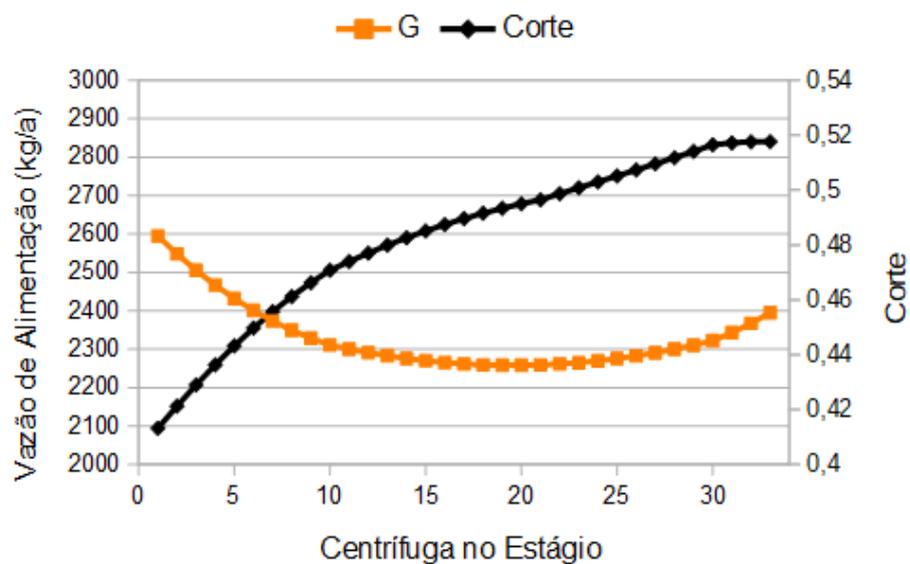


Figura 7.17: Vazões de alimentação e cortes no estágio 4 da cascata modelo.

Estágio 5 - Vazão de Alimentação e Corte

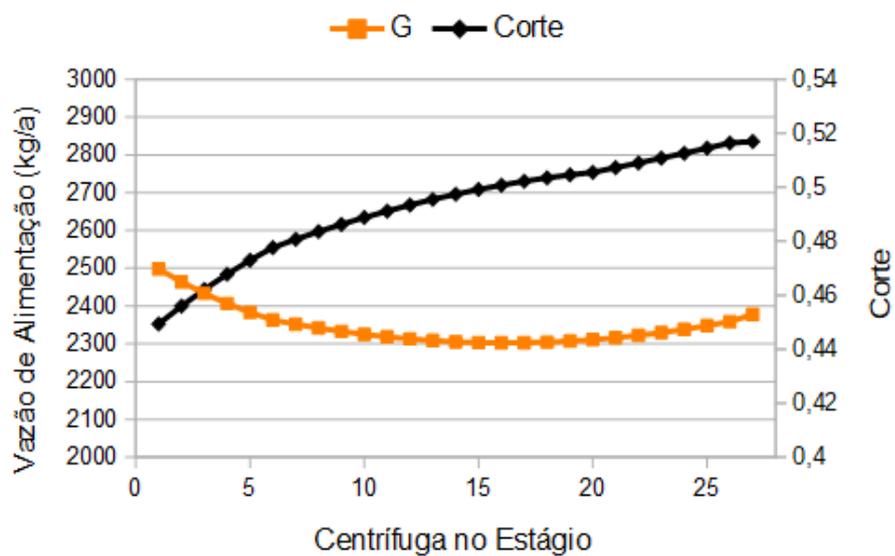


Figura 7.18: Vazões de alimentação e cortes no estágio 5 da cascata modelo.

Estágio 6 - Vazão de Alimentação e Corte

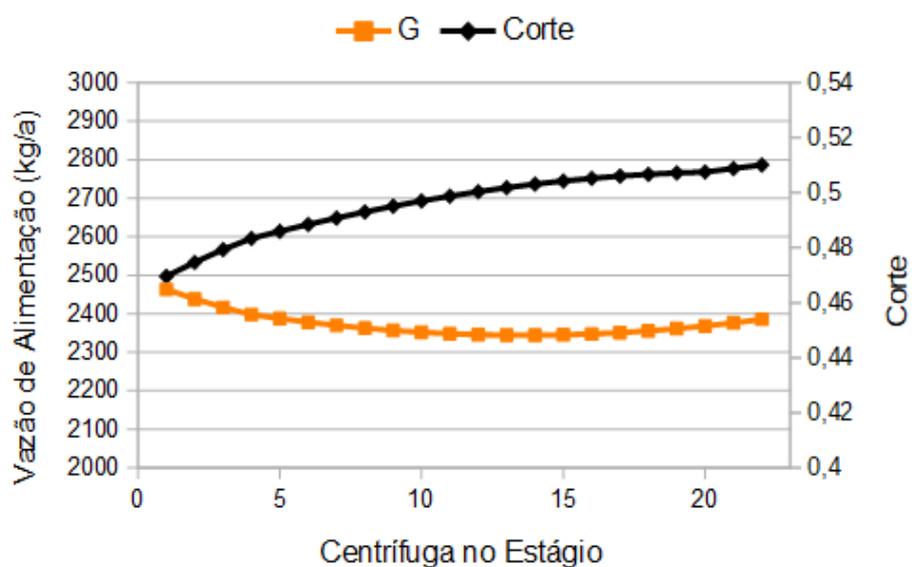


Figura 7.19: Vazões de alimentação e cortes no estágio 6 da cascata modelo.

Estágio 7 - Vazão de Alimentação e Corte

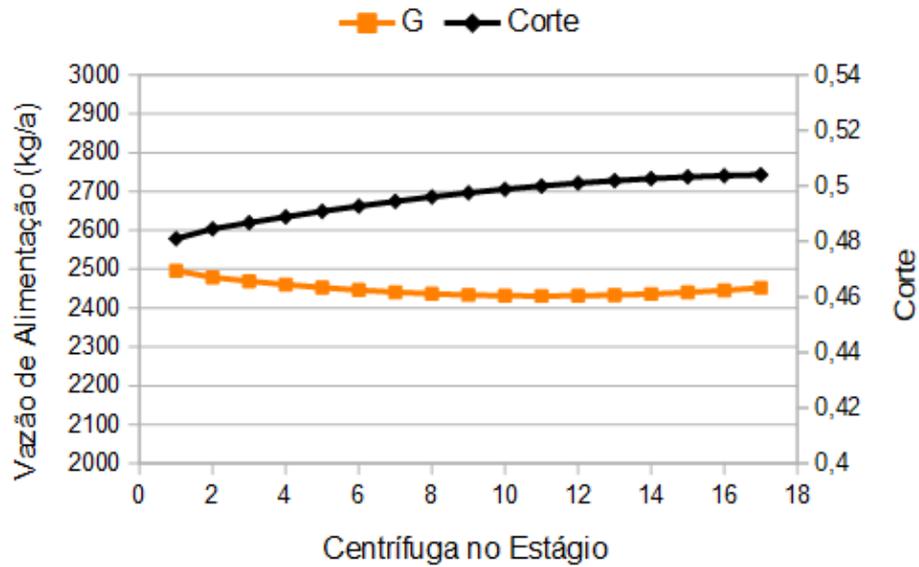


Figura 7.20: Vazões de alimentação e cortes no estágio 7 da cascata modelo.

Estágio 8 - Vazão de Alimentação e Corte

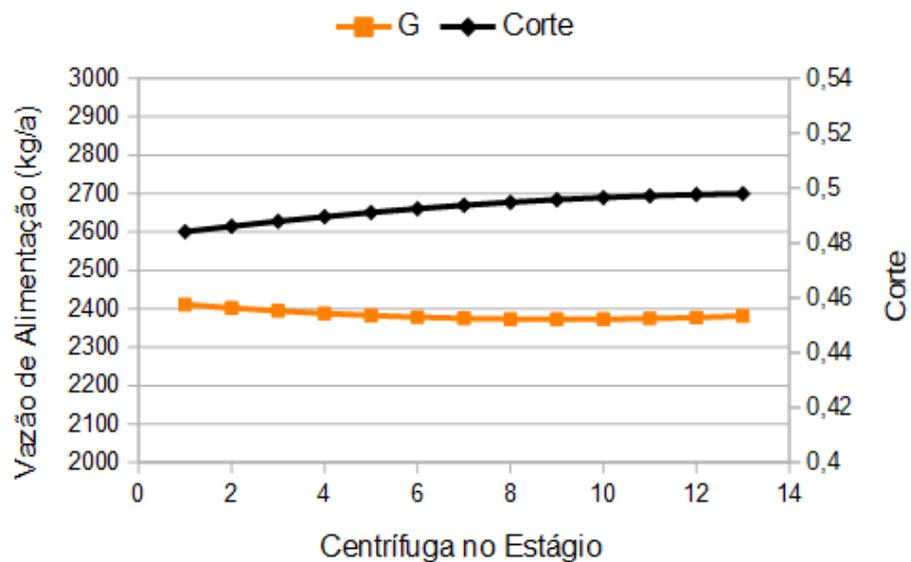


Figura 7.21: Vazões de alimentação e cortes no estágio 8 da cascata modelo.

Estágio 9 - Vazão de Alimentação e Corte

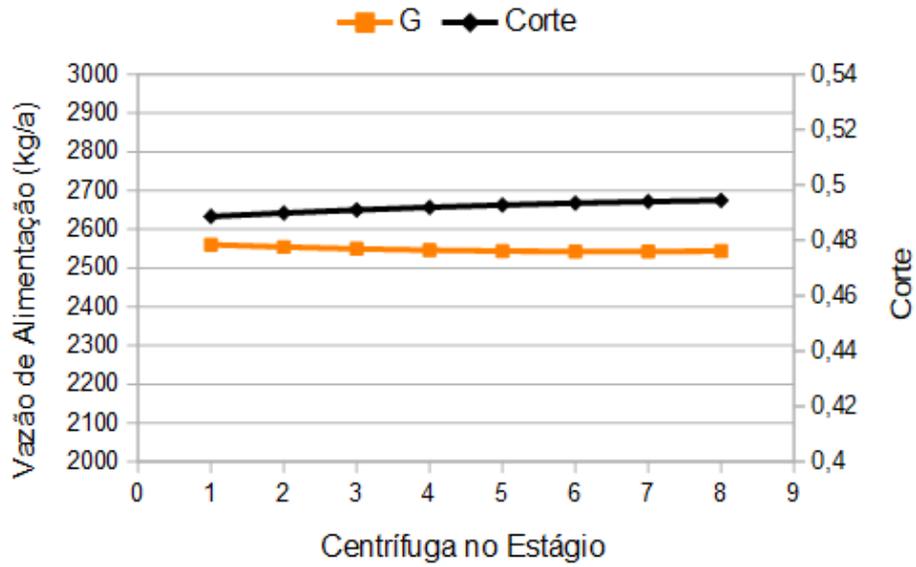


Figura 7.22: Vazões de alimentação e cortes no estágio 9 da cascata modelo.

Estágio 10 - Vazão de Alimentação e Corte

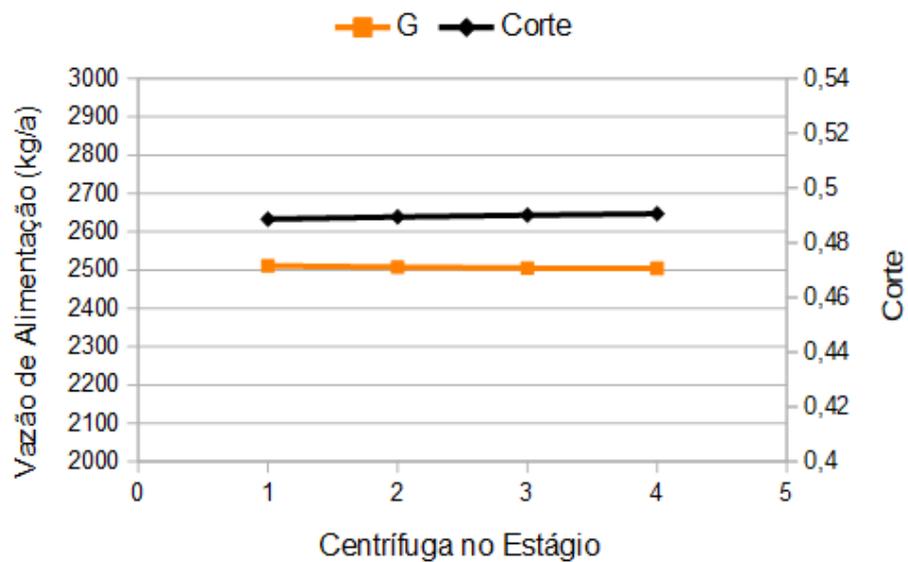


Figura 7.23: Vazões de alimentação e cortes no estágio 10 da cascata modelo.

7.3 Gradiente de Pressão na Tubulação

Nos resultados anteriores, foi possível observar que centrífugas dentro de um mesmo estágio estão submetidas a condições de operação diferentes. Neste capítulo, analisaremos o impacto que as variáveis de processo e projeto exercem sobre as condições de operação em um estágio a partir da Lei de Poiseuille e, em seguida, verificaremos os resultados através da aplicação do modelo proposto.

Conforme explicado no capítulo 4.2, as variáveis que definem o comportamento de um centrífuga dentro da cascata são as pressões p_F , p_P e p_W .

O impacto do gradiente de pressão nas tubulações de um estágio sobre o desempenho da cascata é altamente dependente do tipo de centrífuga que a compõe.

Portanto é importante que o engenheiro entenda como as pressões se comportam dentro de um estágio para então analisar como elas afetam a centrífuga que será utilizada.

Por esta razão, primeiramente será analisado o impacto que as variáveis de projeto e processo exercem sobre as pressões. Em seguida serão analisadas as condições a que centrífugas em diferentes posições estão submetidas em um estágio onde a perda de pressão seja significativa. No capítulo seguinte, por fim, será verificado como a queda de pressão impacta o desempenho do estágio de centrífugas modelo.

Idealmente, busca-se minimizar o gradiente de pressão ao longo de todas as tubulações para que as centrífugas de um mesmo estágio operem o mais próximo possível das condições previstas pela teoria da cascata ideal. Cabe, portanto, definir quando o gradiente de pressão é tal que possa afetar o desempenho da cascata de forma significativa.

Utiliza-se a tubulação de alimentação de um estágio k como exemplo. As seguintes variáveis de projeto e processo serão observadas:

1. Diâmetro da tubulação (D)

2. Comprimento da tubulação entre duas centrífugas adjacentes (L)
3. Número de centrífugas no estágio (n_k)
4. Temperatura ambiente (T_{amb})
5. Pressão média, ou pressão nominal de trabalho (pF_m)
6. Vazão mássica nominal de alimentação da centrífuga (G_{nom})

Conforme figura 7.24, a tubulação de alimentação do estágio k recebe material pelas duas extremidades dentro de uma cascata: uma proveniente do rejeito do estágio superior e outra do produto do estágio inferior.

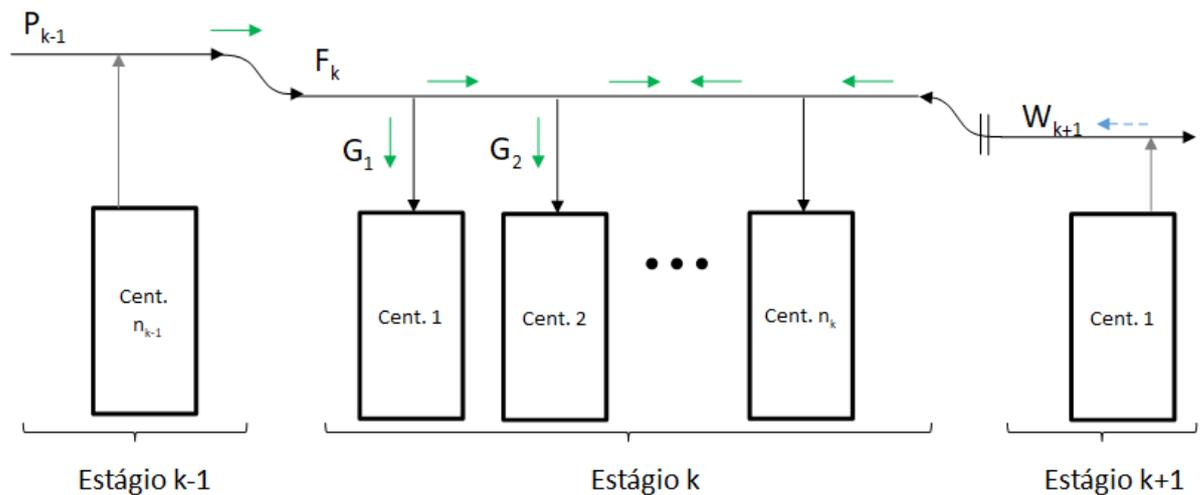


Figura 7.24: Tubulação de alimentação do estágio genérico k

De forma semelhante, nesta análise a tubulação será alimentada pela duas extremidades com vazão mássica igual à metade da vazão total do estágio, ou seja:

$$F_{k,direito} = F_{k,esquerdo} = \frac{F_k}{2} \quad (7.1)$$

A vazão total do estágio, por sua vez, será dada pela quantidade de centrífugas (n_k) multiplicada pela vazão de alimentação nominal (G_{nom}), conforme equação 7.2.

$$F_k = n_k \cdot G_{nom} \quad (7.2)$$

A vazão F_k ao longo da tubulação descrece de G_i até o valor zero conforme as centrífugas são alimentadas, e em seguida aumenta devido à contribuição da extremidade oposta. Conforme Capítulos 4.3 e 6.9, G_i é diretamente proporcional a pF_i num escoamento crítico na razão de uma constante, como mostra a função f_3 .

No entanto, para simplificação da análise, considera-se aqui que todas as centrífugas deste estágio são alimentadas por G_{nom} , de forma que a vazão F_k ao longo da tubulação diminui de acordo com uma progressão aritmética de razão $-G_{nom}$ até o centro do estágio:

$$F_k \rightarrow (F_k - G_{nom}) \rightarrow (F_k - 2G_{nom}) \rightarrow \dots \rightarrow 0 \quad (7.3)$$

Segundo a Lei de Poiseuille, aplicada a um gás ideal, escoamento laminar e incompressível (Anexo II), tem-se que a diferença de pressão entre dois pontos em um escoamento é dada pela equação 7.4:

$$p_1 - p_2 = \frac{128 \cdot \dot{m} \cdot L \cdot \mu \cdot R \cdot T}{M \cdot p_{media} \cdot \pi \cdot D^4} \quad (7.4)$$

onde

\dot{m} : vazão mássica do gás;

M : massa molar do gás ;

R : constante dos gases;

μ : viscosidade do gás;

p_{media} : pressão média entre os dois pontos.

Na tubulação de alimentação a maior diferença de pressão se dá entre a extremidade ($i = 1$) e o centro do estágio ($i = n_k/2$), e portanto o valor de interesse é $pF_1 - pF_{n_k/2}$. Considerando que a p_{media} entre os dois pontos é semelhante à pF_m do

estágio, obtém-se:

$$pF_1 - pF_{n_k/2} = (pF_1 - pF_2) + (pF_2 - pF_3) + \dots + (pF_{n_k/2-1} - pF_{n_k/2}) \quad (7.5)$$

$$pF_1 - pF_{n_k/2} = \frac{128 \cdot L \cdot \mu \cdot R \cdot T_{amb}}{M \cdot pF_m \cdot \pi \cdot D^4} \cdot \left[\left(\frac{F_k}{2} \right) + \left(\frac{F_k}{2} - G_{nom} \right) + \left(\frac{F_k}{2} - 2G_{nom} \right) + \dots + 0 \right] \quad (7.6)$$

Através da soma dos termos de uma progressão aritmética, tem-se:

$$pF_1 - pF_{n_k/2} = \frac{128 \cdot L \cdot \mu \cdot R \cdot T_{amb}}{M \cdot pF_m \cdot \pi \cdot D^4} \cdot \frac{(F_k/2 + 0)}{2} \cdot n_k/2 \quad (7.7)$$

$$pF_1 - pF_{n_k/2} = \frac{128 \cdot L \cdot \mu \cdot R \cdot T_{amb}}{M \cdot pF_m \cdot \pi \cdot D^4} \cdot \frac{F_k}{8} \cdot n_k \quad (7.8)$$

Adicionando-se a definição da equação 7.2, tem-se finalmente:

$$pF_1 - pF_{n_k/2} = \frac{128 \cdot L \cdot \mu \cdot R \cdot T_{amb}}{M \cdot pF_m \cdot \pi \cdot D^4} \cdot \frac{n_k \cdot G_{nom}}{8} \cdot n_k \quad (7.9)$$

$$pF_1 - pF_{n_k/2} = \frac{128 \cdot L \cdot \mu \cdot R \cdot T_{amb}}{M \cdot pF_m \cdot \pi \cdot D^4} \cdot \frac{G_{nom}}{8} \cdot n_k^2 \quad (7.10)$$

O resultado obtido é clássico no que se refere à dependência da queda de pressão em relação a D^4 , L^1 , pF_m^{-1} e G_{nom}^1 num escoamento laminar e incompressível.

A temperatura T_{amb} é a variável que menos afeta o resultado, uma vez que ela está presente na equação 6.35 da viscosidade μ do gás, cujos coeficientes são de baixa ordem de grandeza.

No entanto, é notável que $pF_1 - pF_{n_k/2}$ dependa da segunda potência do número de centrífugas no estágio n_k .

Dependência de n_k

A figura 7.25 mostra a dependência da queda de pressão máxima da tubulação com o número de centrífugas. Ela compara também os resultados obtidos pelo modelo proposto e pela equação 7.10 derivada da Lei de Poiseuille.

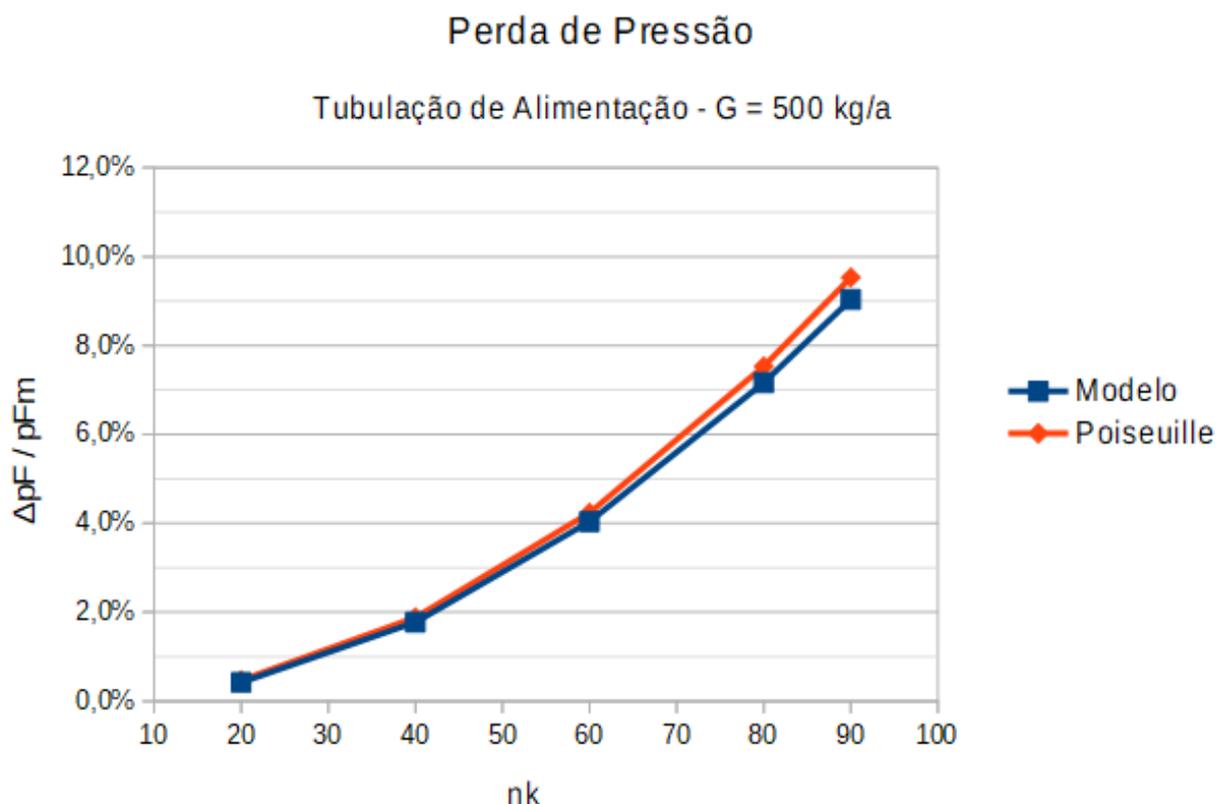


Figura 7.25: Cenário 1 - Perda de carga percentual em função da quantidade de centrífugas num estágio sob escoamento laminar

As condições nominais usadas para a centrífuga modelo e para as variáveis de projeto neste primeiro cenário são apresentadas na tabela 7.6. A vazão G_{nom} e a pressão média pF_m das centrífugas foram escolhidas a partir do comportamento das curvas do Capítulo 4.3. A distância L foi escolhida de forma condizente com o raio da centrífuga de Roma especificado no Anexo I. O diâmetro D escolhido é um valor padrão de tubulações comerciais. A razão P/F foi ajustada para se obter o valor da tabela 7.6.

Percebe-se que as curvas têm o formato de parábola esperado devido à dependência com a segunda potência n_k num escoamento laminar e incompressível.

Tabela 7.6: Cenário 1 - Condições operatórias e variáveis de projeto testadas para um estágio genérico

G_{nom}	pF_{nom}	L	D	T_{amb}	P/F
500 kg/a	10 mbar	0,5 m	1 in	25 °C	0,5

Tabela 7.7: Cenário 2 - Condições operatórias e variáveis de projeto testadas para um estágio genérico

G_{nom}	pF_{nom}	L	D	T_{amb}	P/F
2500 kg/a	10 mbar	0,5 m	1 in	25 °C	0,5

Percebe-se também que a equação 7.10 calcula com boa aproximação a perda de pressão na tubulação em comparação com o modelo de cascata integral. Portanto ela é uma maneira simples de indicar se o estágio projetado provoca uma queda de pressão além do aceitável, sem a necessidade de utilizar o cálculo complexo da cascata integral.

No entanto a equação 7.10 pode apresentar desvios consideráveis em relação ao modelo da cascata integral quando o escoamento deixa de ser laminar na tubulação, como é o caso em um escoamento com as características da tabela 7.7.

A figura 7.26 compara o escoamento para n_k entre 10 e 50 no cenário 2, tabela 7.7. Como ao longo da tubulação o regime de escoamento não é o mesmo, uma vez que nas extremidades ele deixa de ser laminar, a dependência da perda de carga com n_k não pode mais ser dada por uma relação simples. Adicionalmente, quanto mais a pressão varia, mais a vazão de alimentação nas centrífugas varia e, por consequência, a hipótese de progressão aritmética da expressão 7.3 se torna distante da realidade.

Assim, o escoamento pode ser tal que se atinja o dobro da queda de pressão esperada num escoamento laminar, como é o caso do último ponto da curva.

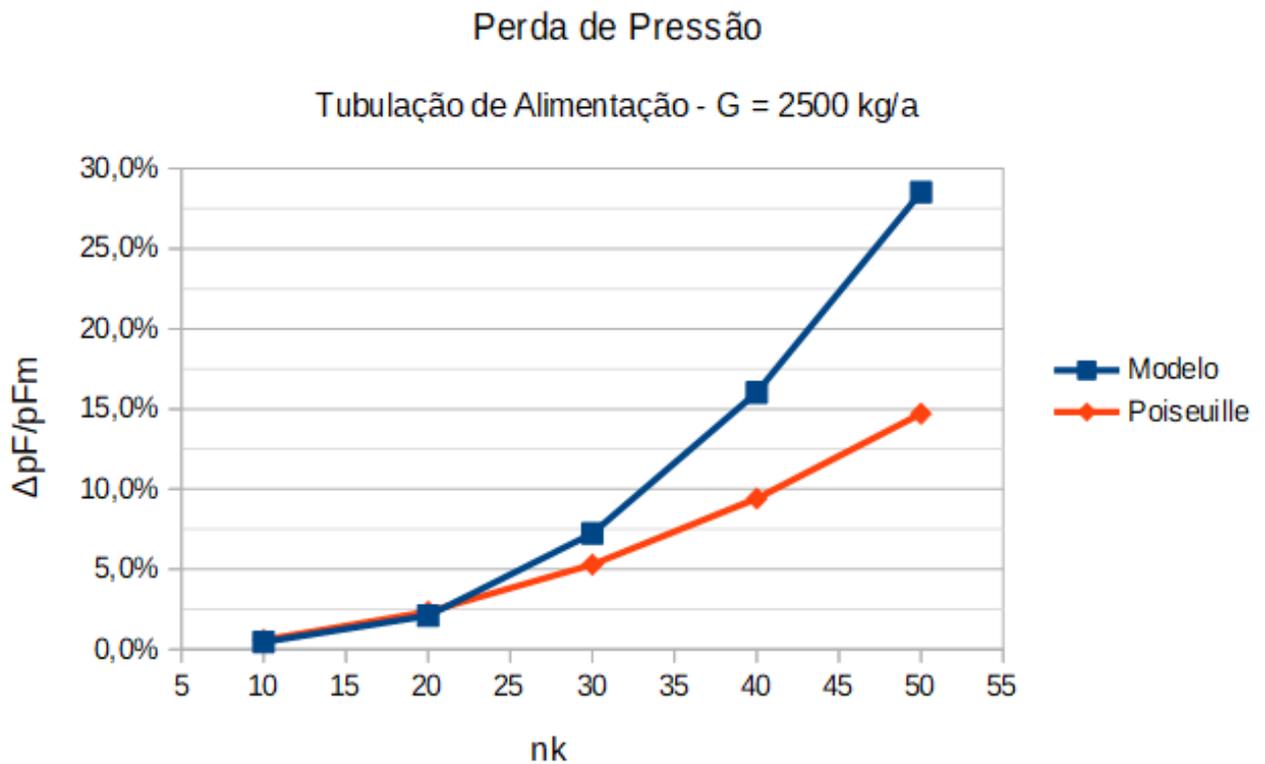


Figura 7.26: Cenário 2 - Perda de carga percentual em função da quantidade de centrífugas num estágio com regime de escoamento variável

Perfil de Pressões em um Estágio

A figura 7.27 mostra o perfil de pressões e Re na tubulação de alimentação para o caso em que $G_{nom} = 2500 \text{ kg/a}$ e $n_k = 40$. Percebe-se que o escoamento é laminar ao centro e de transição nas extremidades, de acordo com o número de Re . Portanto a queda de pressão é mais acentuada nas extremidades.

O mesmo perfil pode ser traçado para as tubulações de produto e rejeito, conforme figura 7.28. A figura mostra a razão das pressões locais com a pressão média da tubulação em que se encontra.

Percebe-se que o gradiente de pressão é menor na tubulação de rejeito se comparado com a de produto e alimentação. A tubulação de rejeito opera a uma pressão média aproximadamente 3 vezes maior do que a de produto e alimentação. Como a perda de carga entre dois pontos é inversamente proporcional à pressão média, conforme equação 7.10, é esperado que o perfil nesta tubulação seja mais

Tubulação de Alimentação

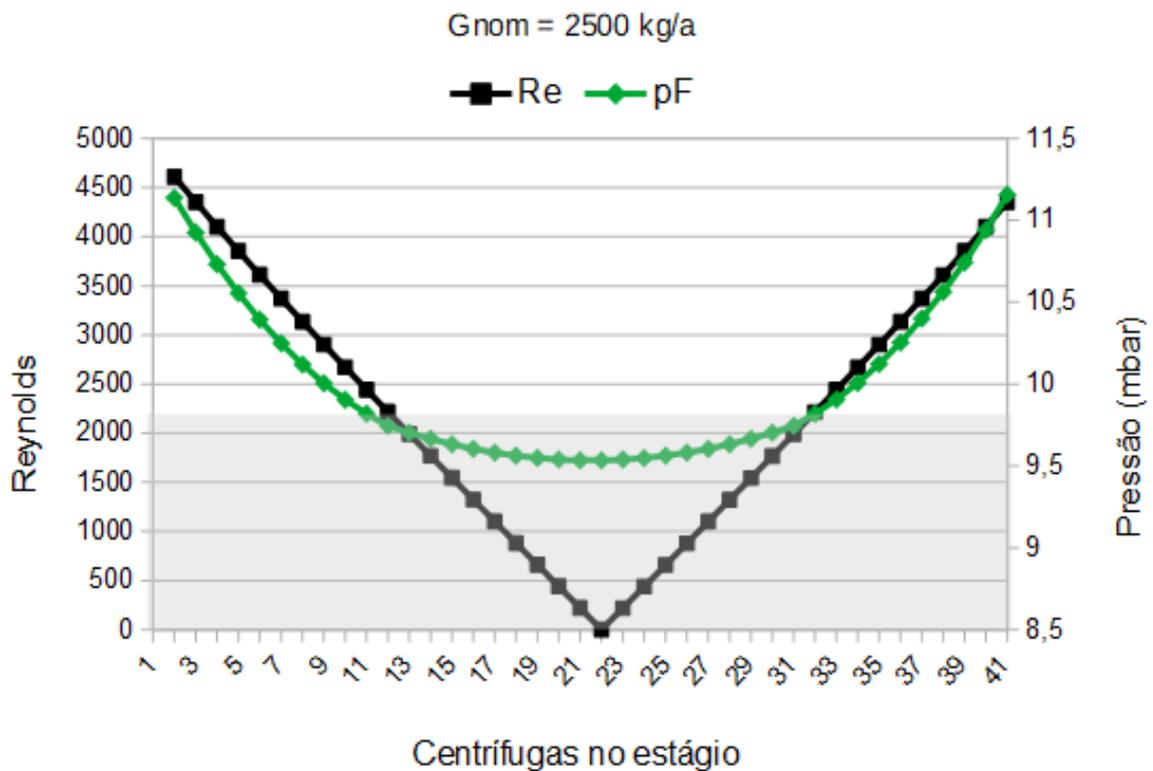


Figura 7.27: Cenário 2 - Pressão e Re na tubulação de alimentação de um estágio com 40 centrífugas e Gnom = 2500 kg/a. A área em cinza determina a região onde o escoamento é laminar.

homogêneo.

A combinação das três pressões locais determina as condições operatórias da centrífuga naquele ponto. Portanto, a centrífuga de número 1 opera em condições significativamente diferentes da centrífuga de número 40. Observa-se que a pressão de produto da primeira é aproximadamente 40% maior que a da última.

Percebe-se que a simplificação adotada pelas teorias de cascata ideal e quase-ideal, em que as centrífugas de um mesmo estágio operam da mesma forma, pode não ser representativa da realidade em casos onde a perda de carga é acentuada.

Conforme equação 7.10, a perda de carga é proporcional ao quadrado de n_k num escoamento laminar. Portanto, o projeto de estágios longos deve ser cuidadoso, uma vez que a perda de pressão resulta em condições de operação muito diferentes

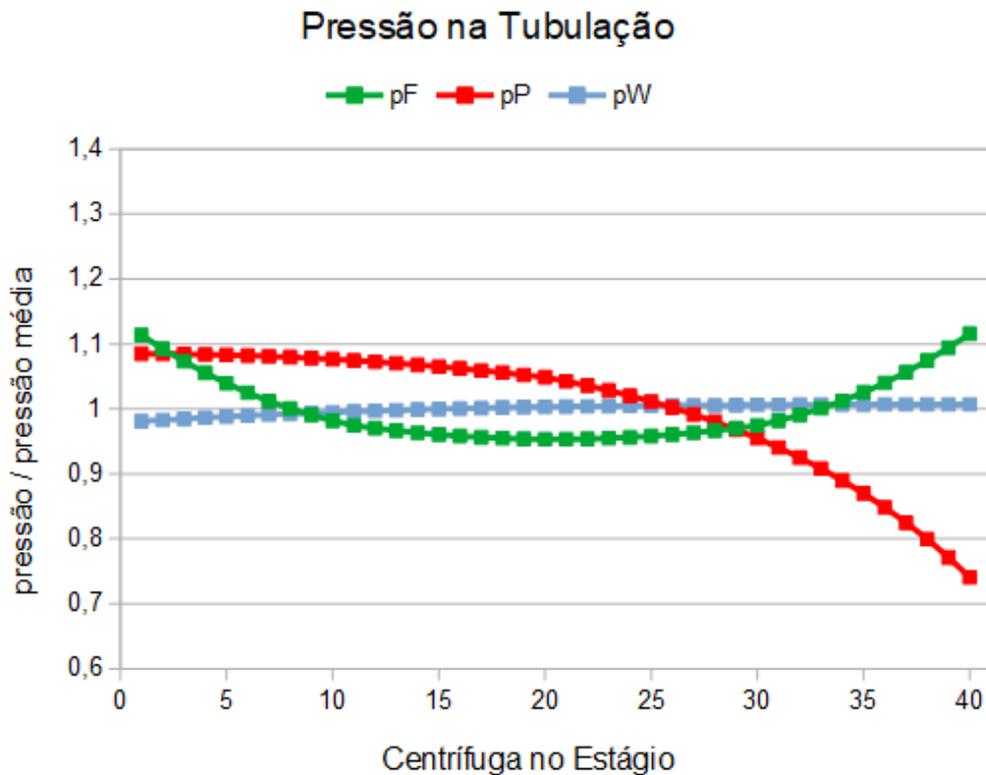


Figura 7.28: Razão da pressão local pela pressão média de alimentação, produto e rejeito num estágio com 40 centrífugas e $G_{nom} = 2500 \text{ kg/a}$. As pressões locais determinam as condições operacionais das centrífugas em cada ponto.

para centrífugas dentro de um mesmo estágio.

7.4 Desempenho Separativo do Estágio

Conforme Capítulo 4.2, o desempenho separativo δU de uma centrífuga é determinado pelas pressões a que ela está submetida dentro de um estágio.

A sensibilidade do δU de um centrífuga com relação à variação de pressões é uma característica particular de cada modelo de centrífuga.

Tomando-se como exemplo estágio composto por 40 centrífugas nas condições da figura 7.28, percebe-se uma variação de aproximadamente 40% na pressão de produto de uma extremidade à outra. A pressão de alimentação varia em torno de 15% entre os pontos máximo e mínimo. A pressão de rejeito não apresenta variações significativas.

O impacto deste perfil de pressões no desempenho das centrífugas pode ser visto na figura 7.29.

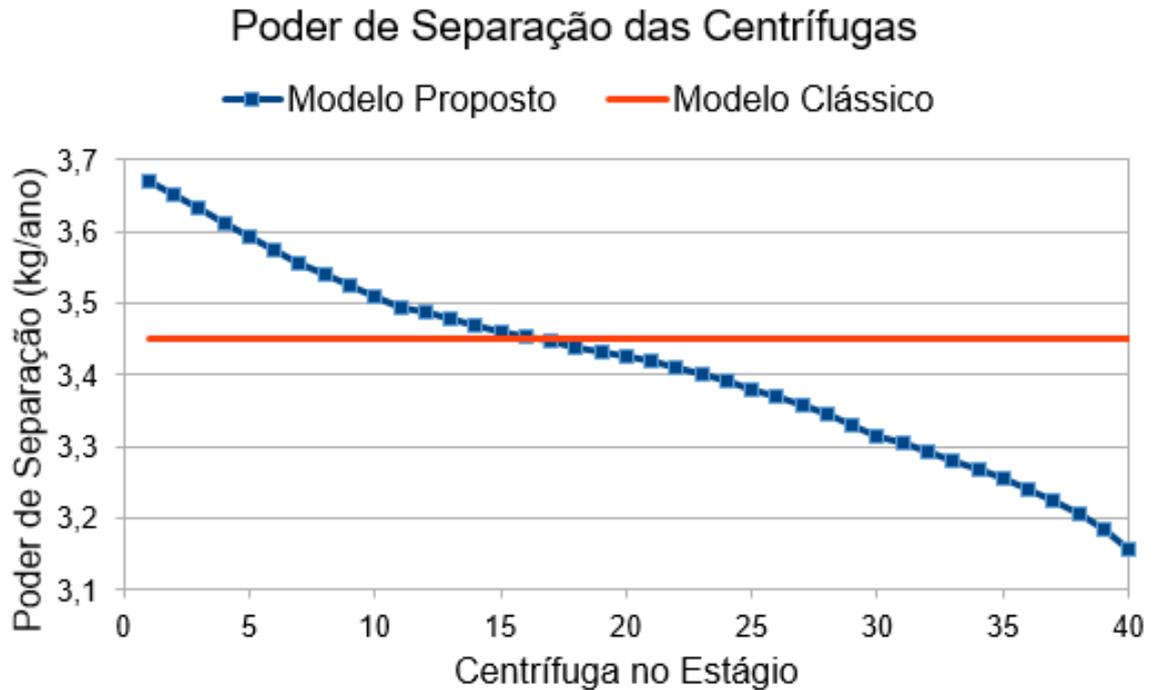


Figura 7.29: Poder separativo individual das centrífugas num estágio com $G_{nom} = 2500$ kg/a. O modelo clássico não faz distinção nas condições de operação de centrífugas num mesmo estágio.

A centrífuga operando na extremidade esquerda apresenta, sob estas condições, ΔU aproximadamente 15% maior do que a centrífuga da extremidade direita. Percebe-se uma diferença clara entre o comportamento exposto pelo modelo proposto nesta tese e o modelo clássico de cálculo de cascatas.

Esta diferença se torna mais significativa à medida que o número de centrífugas em um estágio aumenta, como mostra a figura 7.30. Ela apresenta o δU do estágio calculado através do modelo proposto e do modelo clássico para estágios com diferentes números de centrífugas.

No gráfico da figura 7.30 pode-se observar uma queda brusca no desempenho do estágio entre $n_k = 20$ e $n_k = 30$, que é devida à existência de escoamento de transição em $n_k = 30$, o que não acontece para $n_k \leq 20$ nas condições de operação da centrífuga modelo. Portanto, de forma contraintuitiva, o aumento de n_k num estágio pode significar queda no seu poder separativo total.

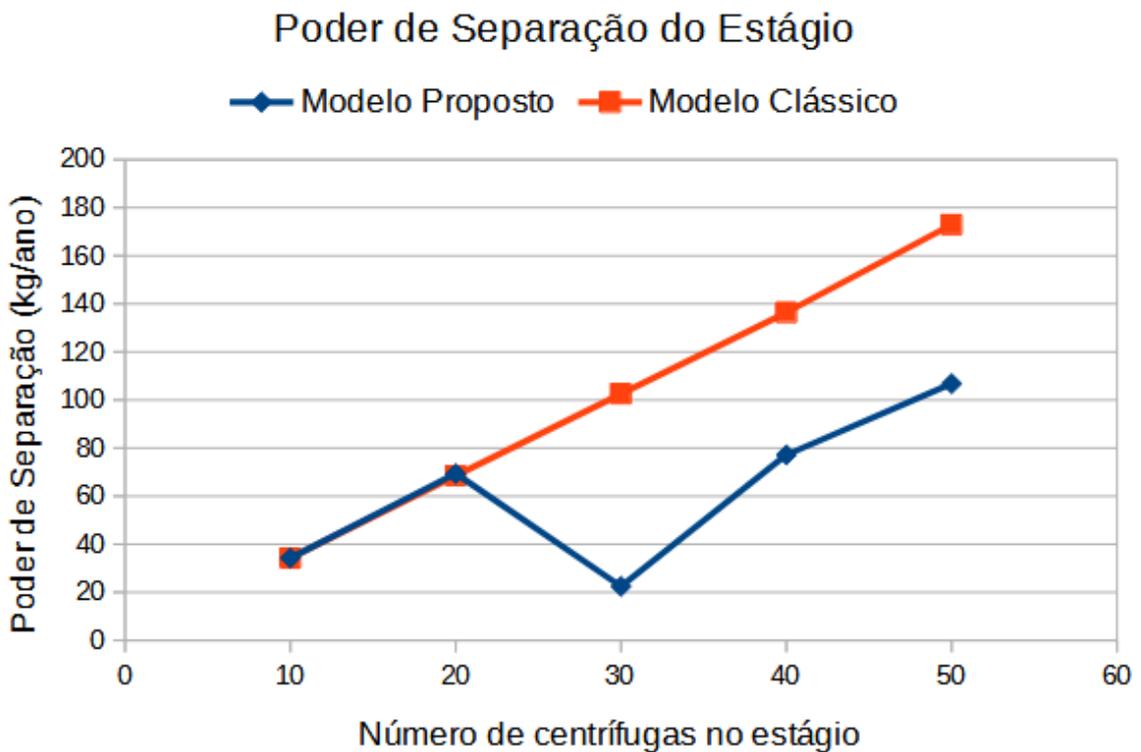


Figura 7.30: Poder separativo individual das centrífugas num estágio com $G_{nom} = 2500 \text{ kg/a}$. O modelo clássico não faz distinção nas condições de operação de centrífugas num mesmo estágio.

Nota-se também que o modelo clássico de cascatas não prevê esta mudança de comportamento, que pode ter um impacto significativo numa cascata que possua estágios com elevado número de centrífugas.

7.5 Desempenho Separativo da Cascata

A tabela 7.4 apresenta a configuração da cascata modelo criada para observar as diferenças entre os resultados do modelo proposto e o clássico. As condições nominais de operação da centrífuga modelo são as mesmas da tabela 7.5 e a vazão e a composição da alimentação da cascata ($F = 24018 \text{ kg/a}$ $z_F = 0,711\%$) são as mesmas do Capítulo 7.2.

As condições de operação desta cascata foram estimadas utilizando tanto o modelo clássico quanto o proposto. Os resultados obtidos são apresentados pela tabela 7.8 e os mapas são apresentados nas figuras 7.1, 7.2 e 7.13.

Nota-se, através do mapa de escoamento, a presença de grandes porções de escoamento de transição na tubulação, indicando queda de pressão significativa. Através do mapa de pressões, pode-se confirmar que as tubulações de produto do maiores estágios apresentam quedas de pressão acima de 15 %.

O impacto destas condições na diferença entre os cálculos dos modelos pode ser observado na tabela 7.8.

Tabela 7.8: Composições e desempenho calculados através do modelo clássico e do proposto

Modelo	P/F	y_P	x_W	ΔU (UTS/a)
Clássico	0,209	1,169 %	0,590 %	722
Proposto	0,205	1,070 %	0,618 %	448
Desvio	1,9%	8,5%	- 4,7%	- 37,9%

Segundo a tabela, existe uma diferença significativa entre as composições (y_P e x_W) e o poder de separação (ΔU) calculados, mesmo obtendo um valor de corte (P/F) semelhante.

Uma análise mais detalhada do comportamento do poder de separação das centrífugas nos estágios pode ser vista nas figuras 7.31 a 7.40.

Pode-se perceber que a queda de pressão ao longo dos estágios impacta visivelmente o desempenho das centrífugas e que o modelo clássico, devido à suas hipóteses, não prevê este comportamento. A somatória destes desvios das condições ideais (*i.e.* pressão constante ao longo do estágio) pode diminuir bruscamente o desempenho total da cascata.

Vale notar que a intensidade da queda de δU está intimamente relacionada com a intensidade das quedas de pressão, bem como com a sensibilidade da centrífuga a elas. Portanto, sob as mesmas condições de operação, um modelo de centrífuga pode ser mais sensível à queda de pressão do que outro.

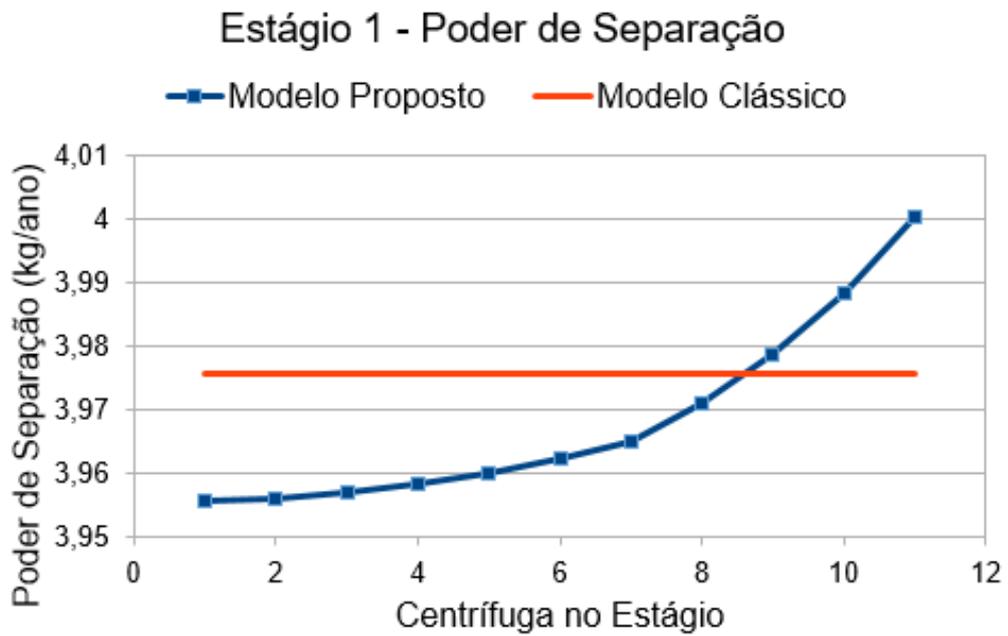


Figura 7.31: Poder separativo individual das centrífugas no estágio 1 da cascata modelo.

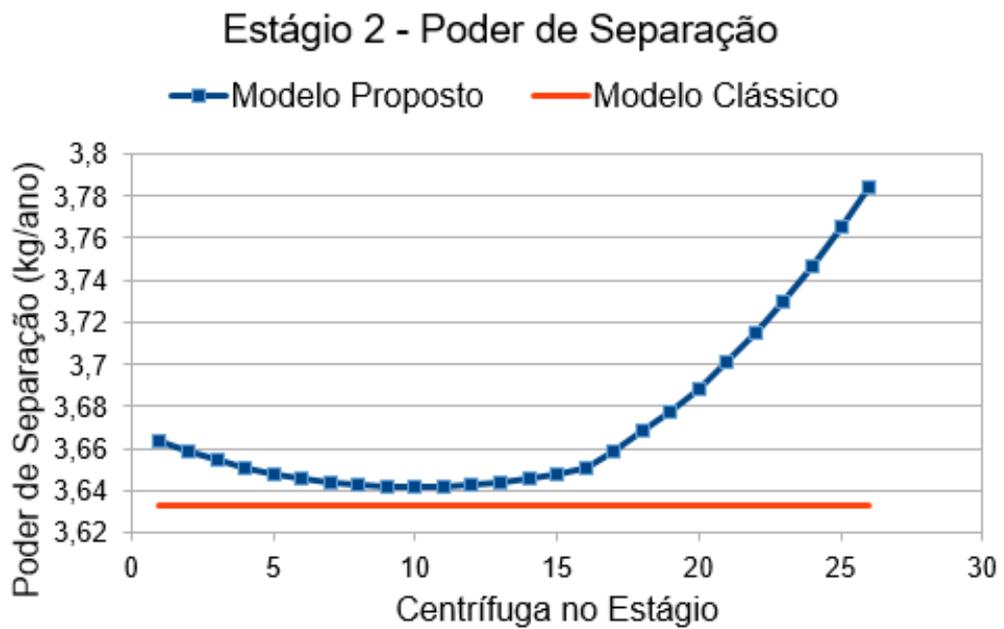


Figura 7.32: Poder separativo individual das centrífugas no estágio 2 da cascata modelo.

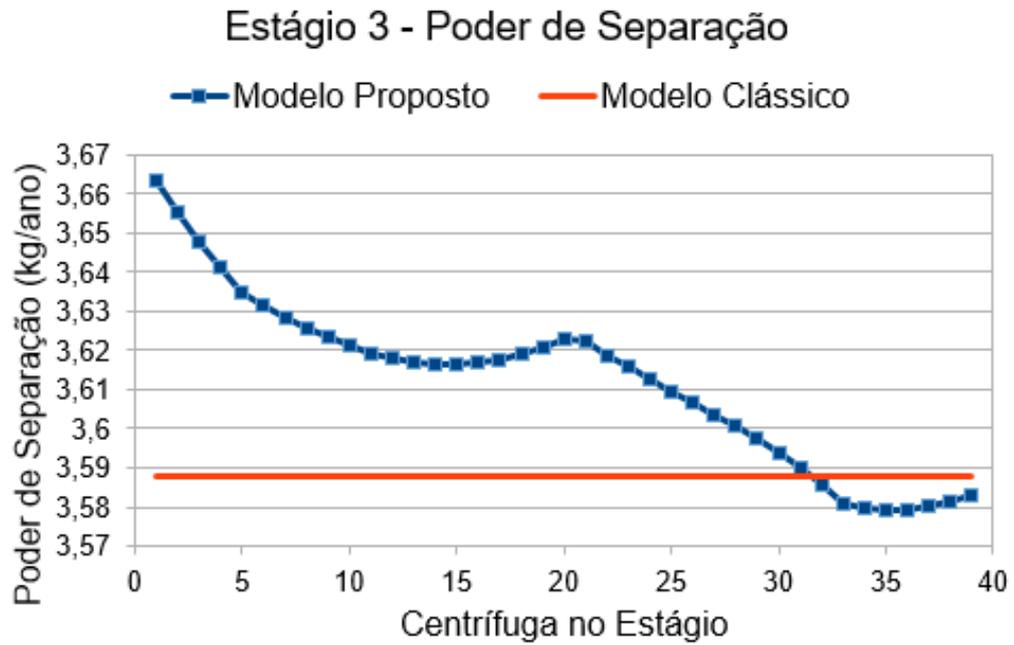


Figura 7.33: Poder separativo individual das centrífugas no estágio 3 da cascata modelo. O estágio 3 é o estágio de alimentação da cascata. Por essa razão existe uma alteração da pressões no meio do estágio, o que resulta na diferença de perfil da curva de δU em relação aos demais estágios.

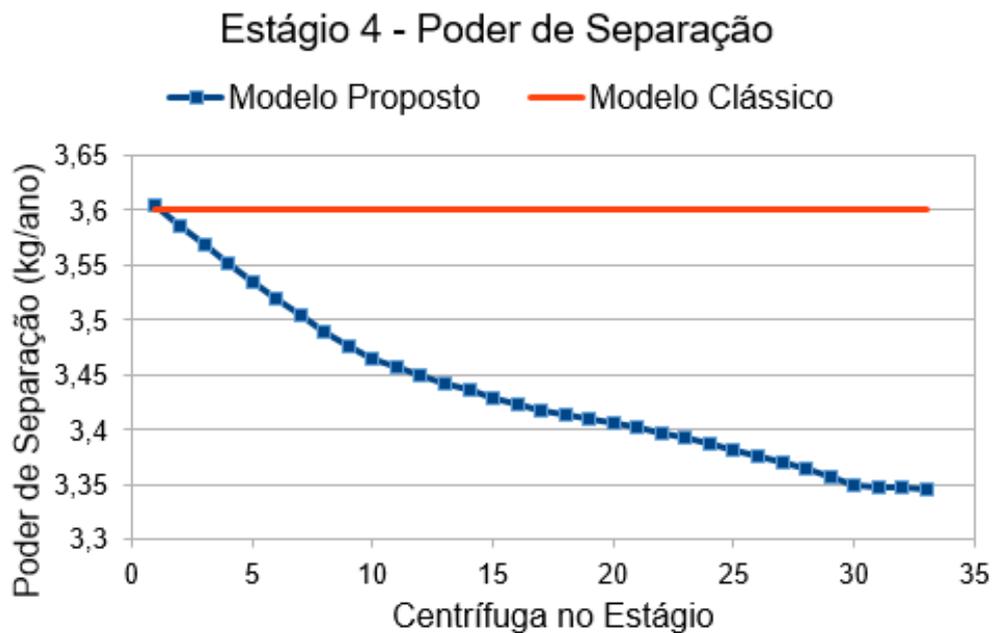


Figura 7.34: Poder separativo individual das centrífugas no estágio 4 da cascata modelo.

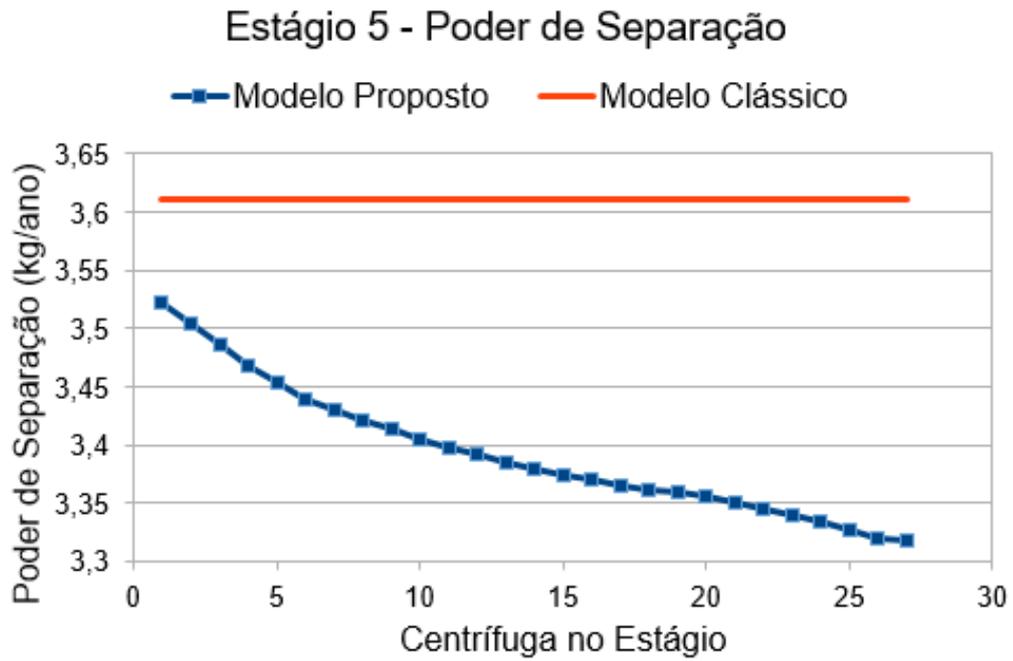


Figura 7.35: Poder separativo individual das centrífugas no estágio 5 da cascata modelo.

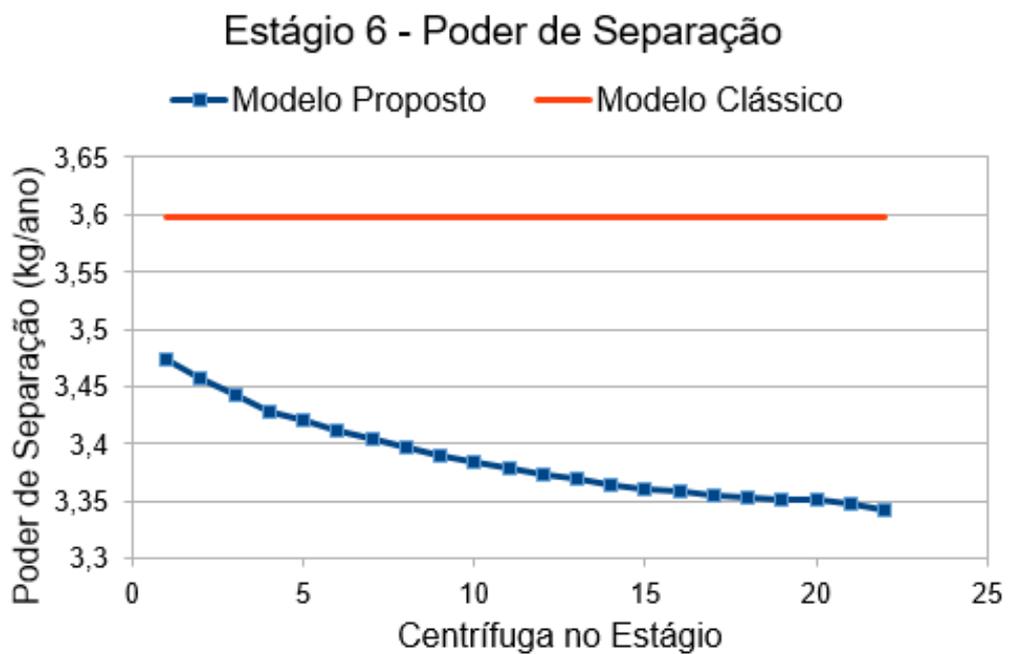


Figura 7.36: Poder separativo individual das centrífugas no estágio 6 da cascata modelo.

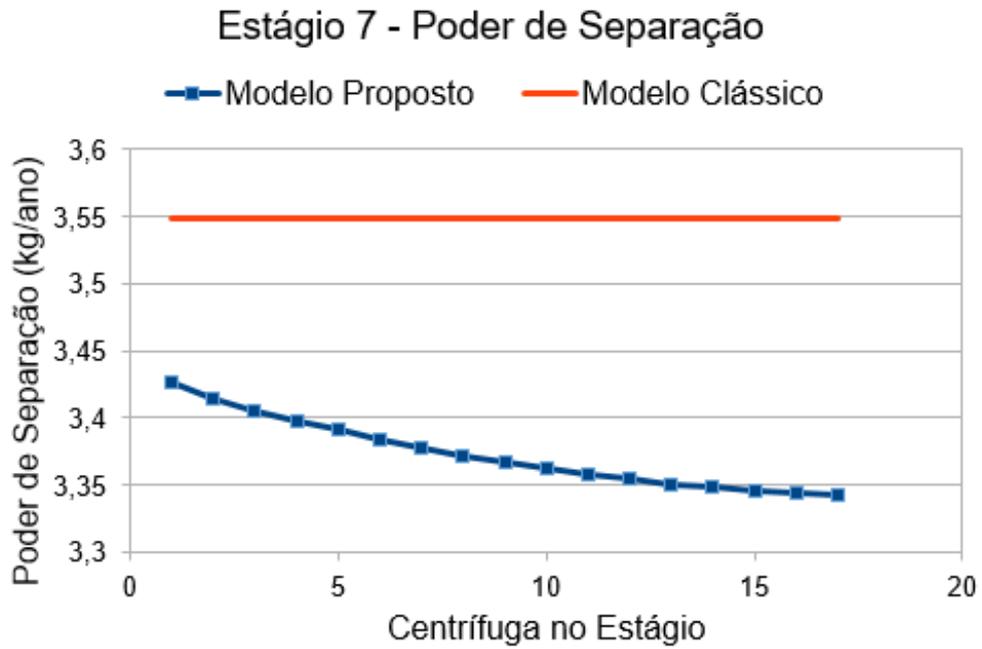


Figura 7.37: Poder separativo individual das centrífugas no estágio 7 da cascata modelo.

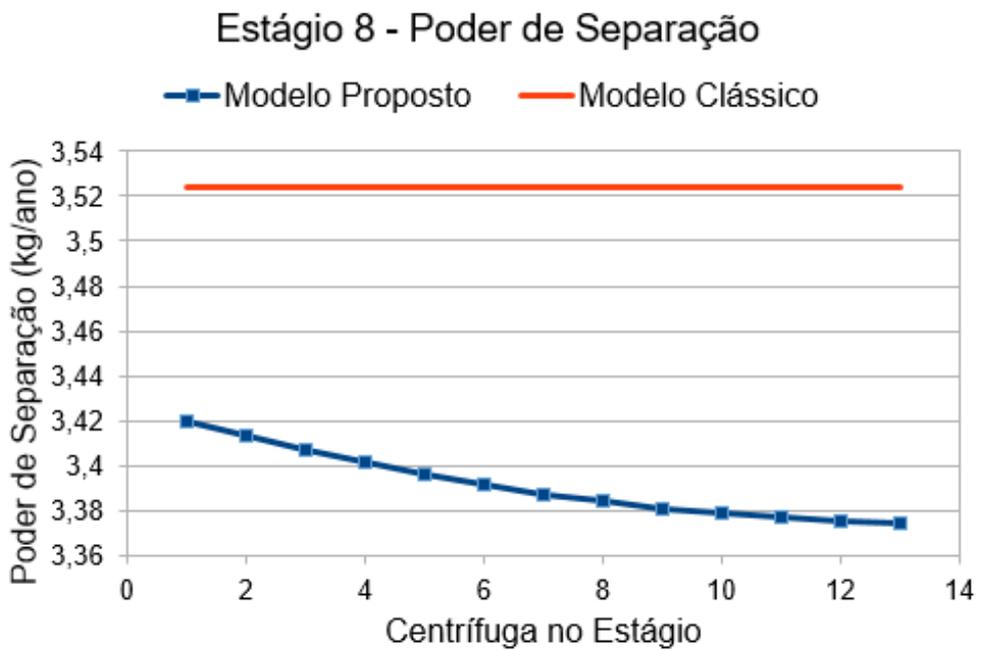


Figura 7.38: Poder separativo individual das centrífugas no estágio 8 da cascata modelo.

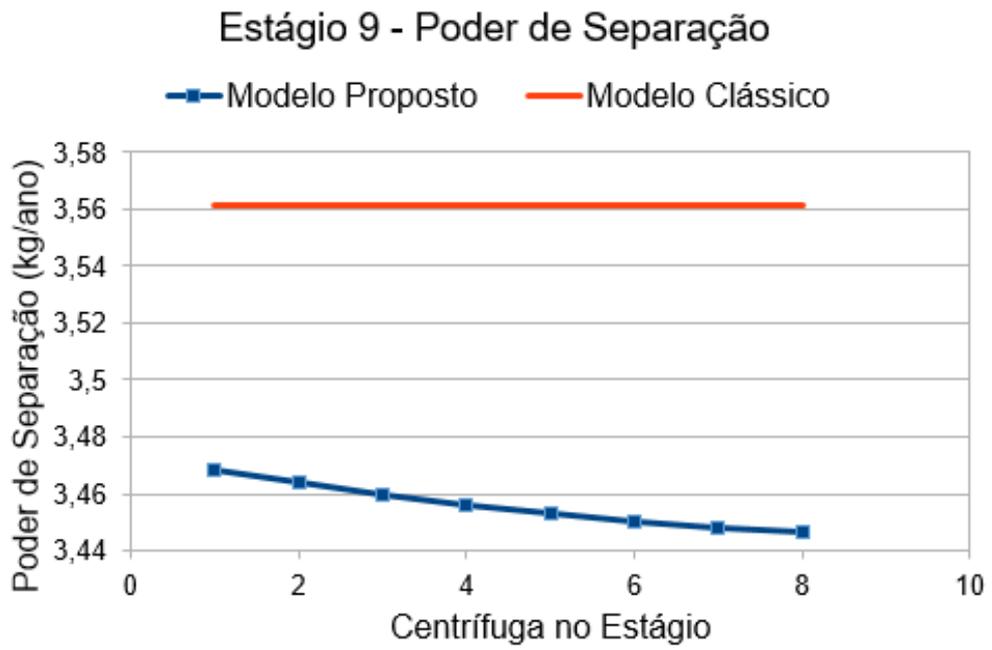


Figura 7.39: Poder separativo individual das centrífugas no estágio 9 da cascata modelo.

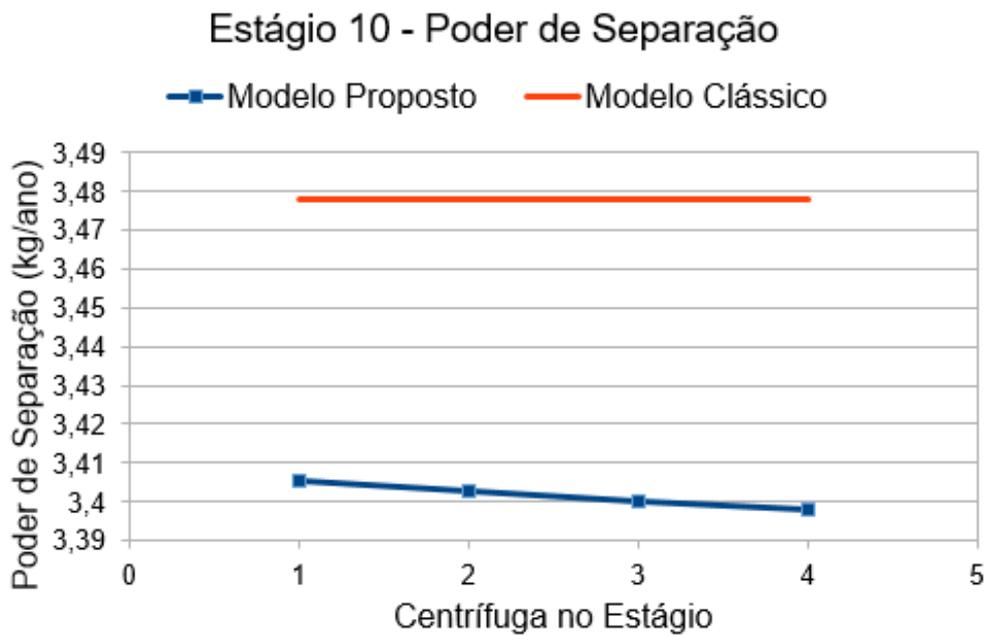


Figura 7.40: Poder separativo individual das centrífugas no estágio 10 da cascata modelo.

8 Conclusões

O modelo proposto para simulação integral de cascatas, que inclui cálculos de perda de carga ao longo da tubulação dos estágios, foi capaz de alcançar resultados mais completos do que o modelo clássico.

Ele permite obter um mapa completo do funcionamento das cascatas e de cada centrífuga individualmente através dos mapas de escoamento, de pressões e de operação das centrífugas.

O maior número de informações torna possível escolher melhores condições operatórias e até mesmo adaptar um projeto de cascatas de forma a submeter as centrífugas a condições locais mais adequadas e eliminar regiões de escoamento de transição ou turbulento.

Entretanto, como o número de variáveis a serem calculadas aumenta várias ordens de grandeza em relação ao modelo clássico, o sistema a ser resolvido é mais complexo e altamente não-linear. Por essa razão ele é altamente dependente dos dados de inicialização. Uma inicialização muito distante da solução pode causar divergência nos cálculos.

Ainda assim, o modelo possui aplicabilidade clara na avaliação de situações de operação de cascatas e aumenta o número de informações disponíveis sem o custo de sensores adicionais de medição.

A aplicação do modelo proposto também permitiu a análise de um estágio individual e tornou possível constatar que a queda de pressão ao longo da tubulação depende do quadrado no número de centrífugas (n_k^2) num estágio com escoamento laminar.

Em casos de escoamento misto dentro da tubulação, o modelo proposto mostrou que a dependência da queda de pressão com n_k é ainda maior do que a potência de 2.

A análise do desempenho do estágio composto por centrífugas modelo mostrou diferença significativa entre o poder de separação de centrífugas em extremidades

opostas. Portanto, dependendo das condições de operação e do tipo de centrífuga, o aumento de n_k em um estágio pode, de forma contraintuitiva, significar queda do poder separativo total do estágio.

Na comparação entre o modelo clássico e o modelo proposto para o cálculo de uma cascata, notou-se divergência de mais de 5% nas composições das correntes de produto e rejeito e de aproximadamente 38 % de queda do ΔU total. Estes resultados reforçam a análise feita em um estágio individual e evidenciam a importância de se conhecer as diferenças nas condições de operação de centrífugas integralmente, especialmente em cascatas que possuem estágios longos.

Por fim, acredita-se que o modelo de cascata integral é um avanço significativo no campo de enriquecimento de urânio por cascatas e possibilita um entendimento do processo de forma mais profunda do que os modelos clássicos permitiam até o momento.

Bibliografia

- [1] Em: *3rd International Workshop on Separation Phenomena in Liquids and Gases*. Rome, Italy, 1979.
- [2] M. An et al. “Numerical Study of the Hydraulic Characteristics of the Bi-directionally Connected Gas Centrifuge”. Em: *15th International Workshop on Separation Phenomena in Liquids and Gases*. 2019.
- [3] M. C. Andrade, C. A. Nascimento e S. C. Migliavacca. “Detection of Outliers in a Gas Centrifuge Experimental Data”. Em: *Brazilian Journal of Chemical Engineering* 22.3 (2005), pp. 389–400.
- [4] A. A. Artyukhov et al. “Centrifugal Enrichment of Cadmium Isotopes as the Basis for Further Experiments on Physics of Weak Interactions”. Em: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research* (1997), pp. 281–288.
- [5] A. Axelsson, D. M. Fischer e M. v. Penkin. “Use of Data from Environmental Sampling for IAEA Safeguards. Case Study: Uranium with Near-Natural ²³⁵U Abundance”. Em: *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry* (2009).
- [6] M. Ayub et al. “A Review of Acoustic Absorption Mechanisms of Nanoscopic Fibres”. Em: *Acoustics* (2011).
- [7] B. M. Barata. *Tecnologia de enriquecimento de urânio une INB e Marinha*. Disponível em www.aben.com.br/revista-brasil-nuclear. 2019.
- [8] M. Benedict, T. H. Pigford e H. W. Levi. *Nuclear Chemical Engineering*. 1981.
- [9] Beta Analytic Testing Laboratory. *How Does Carbon Dating Work*. Disponível em www.radiocarbon.com/about-carbon-dating.htm. 2018.
- [10] R. B. Bird, W. E. Stewart e E. N. Lightfoot. *Transport Phenomena*. John Wiley & Sons, Inc., 2002.
- [11] S. V. Bogovalov et al. “Effect of the Momentum Flux Through Holes in a Water Baffle on the Separative Power of a Gas Centrifuge for Isotope Separation”. Em: *12th International Workshop on Separation Phenomena in Liquids and Gases*. 2012, pp. 113–120.

- [12] V. D Borman et al. “The computer simulation of 3d gas dynamics in a gas centrifuge”. Em: *Journal of Physics: Conference Series* 751 (2016).
- [13] V. Butov et al. “Hydraulic and Separation Characteristics of an Industrial Gas Centrifuge Calculated with Neural Networks”. Em: *American Institute of Physics*. 2018.
- [14] Y. Cao et al. “Study of a Nonstationary Separation Method with Gas Centrifuge Cascade”. Em: *Separation Science and Technology* 39.14 (2004), pp. 3405–3429.
- [15] Centrus. *Gas Centrifuge*. Disponível em <https://www.centrusenergy.com/learn-more/uranium-enrichment/gas-centrifuge/>. 2020.
- [16] K. Cohen. *The Theory of Isotope Separation as Applied to Large Scale Production of ²³⁵U*. Mc Graw Hill, 1951.
- [17] J. A. Fay. *Introduction to Fluid Mechanics*. MIT Press, 1994.
- [18] R. W. Fox e A. T. McDonald. *Introdução à Mecânica dos Fluidos*. LTC - Livros Técnicos e Científicos Editora S.A., 1998.
- [19] W. Fuss. *Laser Isotope Separation and Proliferation Risks*. 2015.
- [20] A. de la Garza, G. A. Garret e J. E. Murphy. “Multi-component isotope separation in cascades”. Em: *Chem. Eng. Sci.* (1961), pp. 188–209.
- [21] A. Glaser. “Characteristics of the Gas Centrifuge for Uranium Enrichment and Their Relevance for Nuclear Weapon Proliferation”. Em: *Science and Global Security* 16 (2008), pp. 1–25.
- [22] T. Graham. “A Short Account of Experimental Researches on the Diffusion of Gases Through Each Other and their Separation by Mechanical Means”. Em: *Quart. J. Sci.* 2 (1829), pp. 74–83.
- [23] Z. Gu, D. Jiang e S. Zeng. “Numerical Study on Decay of Endcap Drive in a Rotating Cylinder”. Em: *14th International Workshop on Separation Phenomena in Liquids and Gases*. 2018, pp. 157–171.
- [24] A. Guthrie. *Vacuum Equipment and Technique*. Mc Graw Hill, 1949.
- [25] D. I. Heriot. *UR 11486 - Uranium Enrichment by Gas Centrifuge*. Luxembourg: Office for the Official Publication of the European Communities, 1988.

- [26] I. Hore-Lacy. *Uranium for Nuclear Power: Resources, Mining and Transformation to Fuel*. Woodhead Publishing, 2016.
- [27] D. J. Jiang e S. Zeng. “Numerical Analysis of Strongly Rotating Flow-Field Using a Coupled Method”. Em: *12th International Workshop on Separation Phenomena in Liquids and Gases*. 2012, pp. 121–127.
- [28] V. C. Jones. *Manhattan: The Army and the Atomic Bomb*. Washington D.C.: Center of Military History - United States Army. 1985.
- [29] I. Jordan. *Cascatas de Separação Isotópica do Urânio*. Apostila da matéria RNC740. 1992.
- [30] J. C. Kayser e R. L. Shambaugh. “Discharge Coefficients for Compressible Flow Through Small-Diameter Orifices and Convergent Nozzles”. Em: *Chemical Engineering Science* 46.7 (1991), pp. 1697–1711.
- [31] K. S. Krane. *Introductory Nuclear Physics*. Wiley, 2016.
- [32] R.Y. Kucherov e V.P. Minenko. “Theory of cascades for separating multi-component isotope mixtures”. Em: *At Energy* 19 (1965), 1290–1300.
- [33] Laferty e Dushmann. *Vacuum Science*. Van Nostrand, 1948.
- [34] N. I. Laguntsov. “Calculation of Ideal Cascades with Arbitrary Enrichment per Stage”. Em: *Atomnaya Énergiya* 35.3 (1973), pp. 205–207.
- [35] L. Landau e E. M. Lifshitz. *Fluid Mechanics*. Oxford: Pergamon Press, 1987.
- [36] F. A. Lindemann e M. A. Aston. “The Possibility of Separating Isotopes”. Em: *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science* 37.221 (1919), pp. 523–534.
- [37] P. Maier-Komor. “Uranium Isotope Separation from 1941 to the Present”. Em: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*.613 (2010), pp. 465–472.
- [38] P. Mathi et al. “Laser Isotope Separation: Science and Technology”. Em: *The National Academy of Sciences* (2015).
- [39] S. C. Migliavacca. “Modelagem do Comportamento Separativo de Ultracentrífugas Via Rede Neural”. Tese de dout. Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, 1999.

- [40] S. C. Migliavacca. *Processos de Separação Isotópica do Urânio*. Apostila de aula da matéria TNM5777. 2017.
- [41] S. C. Migliavacca, C. Rodrigues e C. A. Nascimento. “Analysis and Optimization of Gas-centrifugal Separation of Uranium Isotopes by Neural Networks”. Em: *Brazilian Journal of Chemical Engineering* 19.3 (2002), pp. 299–306.
- [42] P. Migliorini. “Modeling and Simulation of Gas Centrifuge Cascades for Enhancing the Efficiency of IAEA Safeguards”. Tese de dout. University of Virginia, 2013.
- [43] National Isotope Development Center. *National Isotope Development Center*. Disponível em www.isotopes.gov. 2018.
- [44] D. R. Olander. “The Theory of Uranium Enrichment by the Gas Centrifuge”. Em: *Progress in Nuclear Energy* 8 (1981), pp. 1–33.
- [45] A. Orlov, A. Ushakov e V. Sovach. “Mathematical Modeling of Nonstationary Separation Processes in Gas Centrifuge Cascade for Separation of Multicomponent Isotope Mixtures”. Em: *MATEC Web of Conferences* 72 (2016).
- [46] A. A. Orlov, A. A. Ushakov e V. P. Sovach. “Mathematical Modeling of Nonstationary Separation Processes in Gas Centrifuge Cascade for Separation of Tungsten Isotopes”. Em: *Journal of Engineering Physics and Thermophysics* 91.3 (2018).
- [47] V. A. Palkin. “Optimization of a Centrifuge Cascade for Separating a Multicomponent Mixture of Isotopes”. Em: *Atomic Energy* 115.5 (2013).
- [48] V.A. Palkin, N.A. Sbitnev e E.S. Frolov. “Calculation of the optimal parameters of a cascade for separating a multicomponent mixture of isotopes”. Em: *Atomic Energy* 92.2 (2002), pp. 141–146. DOI: 10.1023/A:1015826722765.
- [49] C. C. Portoghese. “Modelagem Matemática do Comportamento Estático e Dinâmico dos Parâmetros Operacionais de Cascatas de Separação Isotópica por Ultracentrifugação”. Tese de dout. Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, 2002.
- [50] H. R. Pratt. “Countercurrent Separation Processes”. Em: *Elsevier* (1967).
- [51] M. Ragheb. *Isotopic Separation and Enrichment*. 2007.

- [52] E. Ratz. “An Analytical Solution for the Separative Power of Gas Centrifuges”. Em: *Fifth Workshop on Gases in Strong Rotation*. 1983.
- [53] Revista Mineração e Sustentabilidade. *Recarga da Usina Nuclear Angra 2 Bate Recorde*. <https://revistamineracao.com.br/2017/12/12/recarga-da-usina-nuclear-angra-2-bate-recorde/>. 2021.
- [54] A. Rossi. *BBC*. Disponível em <https://www.bbc.com/portuguese/brasil-48683942>. 2019.
- [55] A. Y. Smirnov e G. A. Sulaberidze. “Features of Mass Transfer of Intermediate Components in Squares Gas Centrifuge Cascade for Separating Multicomponent Mixtures”. Em: *Theoretical Foundations of Chemical Engineering* 48.5 (2014), pp. 629–636.
- [56] A. Y. Smirnov et al. “Enrichment of Regenerated Uranium in a Gas Centrifuge Cascade with Simultaneous Dilution of ^{232}U , ^{236}U by Waste and Low-Enrichment Uranium”. Em: *Atomic Energy* 122.5 (2017).
- [57] R. Snyder. “A Proliferation Assessment of Third Generation Laser Uranium Enrichment Technology”. Em: *Science & Global Security* 24.2 (2016), pp. 68–91.
- [58] J. Solomon. *Numerical Algorithms*. CRC Press, 2015, p. 150.
- [59] T. Song et al. “Comparative study of the model and optimum cascades for multicomponent isotope separation”. Em: *Separation Science and Technology* 45.14 (2010), pp. 2113–2118. DOI: 10.1080/01496391003793884.
- [60] G. A. Sulaberidze et al. “Classification of Model Cascades for Separation of Multicomponent Isotope Mixtures”. Em: *Separation Science and Technology* (2020).
- [61] G.A. Sulaberidze e V.D. Borisevich. “Cascades for separation of multicomponent isotope mixtures”. Em: *Separation Science and Technology* 36.8-9 (2001), pp. 1769–1817. DOI: 10.1081/SS-100104761.
- [62] A. J. Szady. “Enrichment of Chromium Isotopes by Gas Centrifugation”. Em: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research* (1989), pp. 277–280.
- [63] A. V. Tikhomirov. “Development of Centrifugal Technologies of Stable Isotopes Separation in Russia and Progress of Neutrino Physics”. Em: *11th International Workshop on Separation Phenomena in Liquids and Gases*. 2011, pp. 32–37.

- [64] U.S. Department of Energy. *Gas Centrifuge Cascade*. https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Gas_centrifuge_cascade.jpg. 2021.
- [65] C. M. Van Atta. *Vacuum Science Engineering*. McGraw-Hill, 1965.
- [66] S. Villani. *Uranium Enrichment*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1979.
- [67] E. von Halle. "Multicomponent Isotope Separation in Matched Abundance Ratio Cascades Composed of Stages with Large Separation Factors". Em: *Proc. 1st Workshop on Separation Phenomena in Liquids and Gases* (1987), p. 325.
- [68] J. Wisniak. "Thomas Graham. II. Contributions to Diffusion of Gases and Liquids, Colloids, Dialysis, and Osmosis". Em: *Educ. Quim.* (2013), pp. 506–515.
- [69] *World Nuclear Association*. <https://www.world-nuclear.org/information-library/nuclear-fuel-cycle/conversion-enrichment-and-fabrication/uranium-enrichment.aspx\#ECSArticleLink0>. Acessado em 23-05-2020. 2020.

Anexo I

Cálculo de δU de Ratz

As equações a seguir podem ser encontradas no estudo de Glaser (2008).

$$\delta U_{ratz} = \frac{1}{2} G \Theta (1 - \Theta) \left(\frac{\Delta M}{2RT} v_a^2 \right)^2 \left(\frac{r_2}{a} \right)^4 \left(1 - \left(\frac{r_1}{r_2} \right)^2 \right)^2 \quad (8.1)$$

$$\left(\left(\frac{1 + \frac{L}{G}}{\Theta} \right) (1 - \exp -A_p Z_p) + \frac{\frac{L}{G}}{1 - \Theta} (1 - \exp -A_w (Z - Z_p)) \right)^2$$

Onde:

$$A_p = \frac{2\pi D\rho}{\ln \frac{r_2}{r_1}} \frac{\Theta}{g(1 + \frac{L}{G})(1 - \Theta + \frac{L}{G})} \quad (8.2)$$

$$A_w = \frac{2\pi D\rho}{\ln \frac{r_2}{r_1}} \frac{\Theta}{L(1 - \Theta + \frac{L}{G})} \quad (8.3)$$

$$Z_p = \frac{1}{2} Z \quad (8.4)$$

$$D\rho = 2,2 \cdot 10^{-5} \frac{kg}{ms} \quad (8.5)$$

Os parâmetros geométricos e de velocidade são dados para a centrífuga de Roma (Glaser, 2008).

Variável	Valores
v_a (m/s)	600
Z (cm)	200
a (cm)	10
r_1/r_2	0,843

Dois outros parâmetros foram estimados:

$$\frac{r_2}{a} = 0,9 \quad (8.6)$$

$$k = \frac{L}{G} = 200 \frac{pP \text{ [mbar]}}{G \text{ [kg/ano]}} \quad (8.7)$$

Anexo II

Equivalência entre a Lei de Poiseuille e Bernoulli

A lei de Poiseuille e a equação de Bernoulli se tornam iguais no cálculo de perda de carga sob as seguintes condições:

1. Tubo com seção transversal constante;
2. Mesma cota de altura;
3. Escoamento laminar;
4. Fluido incompressível.

Demonstração:

$$p_1 - p_2 = \frac{\rho \cdot \left(\frac{4\dot{m}}{\rho\pi D^2} \right)^2 \cdot L \cdot 2f}{D}$$

$$p_1 - p_2 = \frac{\rho \cdot \left(\frac{4\dot{m}}{\rho\pi D^2} \right)^2 \cdot L \cdot 2 \frac{16}{Re}}{D}$$

$$p_1 - p_2 = \frac{\rho \cdot \left(\frac{4\dot{m}}{\rho\pi D^2} \right)^2 \cdot L \cdot 2 \frac{16\mu}{\rho v D}}{D}$$

$$p_1 - p_2 = \frac{16\dot{m}^2}{\rho\pi^2 D^4} \cdot L \cdot 2 \cdot \frac{4 \cdot 4 \cdot \mu}{\rho v D^2}$$

$$p_1 - p_2 = \frac{16\dot{m}^2}{\rho\pi D^4} \cdot L \cdot 2 \cdot \frac{4 \cdot \mu}{\rho v \frac{\pi D^2}{4}}$$

$$p_1 - p_2 = \frac{16\dot{m}^2}{\rho\pi D^4} \cdot L \cdot 2 \cdot \frac{4 \cdot \mu}{\dot{m}}$$

$$p_1 - p_2 = \frac{128 \cdot \dot{m} \cdot L \cdot \mu}{\rho\pi D^4}$$

Aplicando a lei dos gases ideais:

$$p_1 - p_2 = \frac{128 \cdot \dot{m} \cdot L \cdot \mu}{\frac{p_{media} \cdot M}{R \cdot T} \pi D^4}$$

$$p_1 - p_2 = \frac{128 \cdot \dot{m} / M \cdot L \cdot \mu \cdot R \cdot T}{p_{media} \pi D^4}$$

$$p_1 - p_2 = \frac{128 \cdot \dot{m} / M \cdot L \cdot \mu \cdot R \cdot T}{(p_1 + p_2) / 2 \pi D^4}$$

$$p_1^2 - p_2^2 = \frac{256 \cdot \dot{m} / M \cdot L \cdot \mu \cdot R \cdot T}{\pi D^4}$$