

P.I
(043) 621.8
M 334
2023

PROYECTO INTEGRADOR DE LA CARRERA DE
INGENIERÍA MECÁNICA

COMPARACIÓN TEÓRICO-EXPERIMENTAL DE
FLUJOS EN TOBERAS EN RÉGIMEN SUPERSÓNICO

Claudio Javier Mardones

Dr. José Gonzalez
Director

Ing. Leandro Perlo
Co-director

Miembros del Jurado

Dr. Pablo García Martínez (Instituto Balseiro)
Dr. Nicolás Sílín (Instituto Balseiro)

28 de Julio de 2023

Proyecto LASIE – Centro Atómico Bariloche

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

(Biblioteca Leo Falicov CAB-IB)

Inventario 24791
04/08/2023
Biblioteca Leo Falicov

A mi Tata

A mi viejo y familia

A mis amigos

Índice de símbolos

Índice de contenidos

Índice de símbolos	v
Índice de contenidos	vii
Índice de figuras	ix
Índice de tablas	xiii
Resumen	xv
Abstract	xvii
1. Introducción	1
1.1. Motivación	1
1.1.1. Difusión gaseosa	2
1.1.2. Centrifugación gaseosa	3
1.1.3. Separación basada en procesos aerodinámicos	3
1.1.4. Separación por medio de electromagnetismo	4
1.1.5. Separación mediante vapor atómico	4
1.2. Proyecto LASIE	4
1.3. Objetivo	5
2. Caso de estudio	7
2.1. Separación de especies	7
2.2. Flujo axi-simétrico en expansión libre	8
2.3. Número de Knudsen	12
2.4. Modelo numérico	13
2.4.1. Geometría	13
2.4.2. Mallado	15
2.4.3. Propiedades de los fluidos	17
2.4.4. Configuraciones generales	18
2.5. Modelo de difusión binaria	19

2.5.1. Factor de difusión térmica α_T	21
2.5.2. Implementación del modelo de difusión binaria	23
2.6. Cálculo de la concentración media y errores	24
2.7. Criterios de convergencia	25
3. Resultados y Discusión	29
3.1. Resultados fluidodinámicos	29
3.1.1. Simulaciones con condiciones del laboratorio	29
3.1.2. Diseño de las condiciones para los experimentos	32
3.2. Resultados difusivos	37
3.2.1. Análisis de la termofóresis	37
3.2.2. Gas puro $Ne^{22}-Ne^{20}$	38
3.2.3. Mezcla SF_6-He	40
3.3. Análisis de la posición del skimmer	43
3.4. Análisis de perfiles de concentración en flujo libre sin skimmer	52
4. Conclusiones y posibles líneas de trabajos futuros	59
4.1. Sobre los resultados fluidodinámicos	59
4.2. Sobre el diseño de experimento	59
4.3. Sobre el análisis de la termoforesis	60
4.3.1. Gas Ne^{22} 9,25 %- Ne^{20}	60
4.3.2. Mezcla SF_6 5 %- He	61
4.4. Sobre el análisis de la posición axial del skimmer	61
4.5. Sobre el análisis de los perfiles de concentración en una tobera sin divisor de caudales	62
4.6. Posibles líneas de trabajo futuras	63
A. Práctica profesional supervisada y actividades desarrolladas	65
Bibliografía	67
Agradecimientos	69

Índice de figuras

1.1. Esquema del proceso de difusión gaseosa.	2
1.2. Esquema del proceso de centrifugación gaseosa.	3
1.3. Toberas utilizadas en la división de simulaciones fluidodinámicas del proyecto LASIE.	5
2.1. Esquema del concepto de geometría utilizada para la separación de especies.	8
2.2. Esquema de la geometría de un flujo en expansión libre.	9
2.3. Evolución del número de Mach en función del eje de simetría adimensionalizado, según el modelo semiempírico de Pauly 2.7. Las curvas azul, naranja y amarilla, corresponden a un gas monoatómico, diatómico y poliatómico, respectivamente.	11
2.4. Evolución de la temperatura y de la presión en función del eje adimensional, en las curvas azul y naranja, respectivamente, para una presión y temperatura de alta de 660 mBar y 300 K, respectivamente.	11
2.5. Modelos matemáticos para distintos rangos de valores del número de Knudsen [1].	12
2.6. Evolución de la densidad y del número de Knudsen en función de la distancia en el eje adimensional en las curvas azul y naranja, respectivamente, para una presión de alta de 660 mBar.	13
2.7. Geometrías utilizadas.	14
2.8. Mallado de las geometrías utilizadas.	16
2.9. Ampliaciones de la unión entre las regiones 1 y 2 en 2.9(a), y entre las regiones 3 y 4 en 2.9(b).	17
2.10. Dependencia másica del α_T [2].	21
2.11. Dependencia térmica del α_T [2].	22
2.12. Aproximaciones lineales para $\alpha(T)^{SF_6}$, $\alpha(T)^{CO_2}$, $\alpha(T)^{Ne}$, y la recta de referencia de $\alpha(T)^{CFC-12/N_2}$	23
2.13. Gráfico de la evolución típica de los residuos.	26

3.1. Mapa del número de Mach en la cámara de descarga para $P_0 = 50,411$ mBar.	30
3.2. Mapa del número de Mach en la cámara de descarga para $P_0 = 197,79$ mBar.	30
3.3. Comparación entre la evolución del número de Mach obtenido de la simulación en negro y el descrito por el modelo de Pauly en la curva roja. La recta azul indica la posición axial teórica del disco de Mach. . .	31
3.4. Evolución del número de Knudsen obtenido de las simulaciones a lo largo del eje de simetría adimensional.	31
3.5. Presiones de alta en función de la posición del disco de Mach en el eje adimensional para diferentes diámetros de boquilla.	33
3.6. Presiones de baja calculadas en función de la posición del disco de Mach en el eje adimensional para diferentes diámetros de boquilla.	33
3.7. Presiones de alta y de baja calculadas en función de la posición del disco de Mach en el eje adimensional para diferentes diámetros de boquilla. . .	34
3.8. Evolución de los números de Mach y de Knudsen a lo largo del eje adimensional de simetría.	35
3.9. Mapas del número de Mach obtenidos para las cuatro simulaciones realizadas.	36
3.10. Mapas de la temperatura en Kelvin obtenidos para las cuatro simulaciones realizadas.	37
3.11. Mapas del número de Mach y de concentración obtenidos de las simulaciones fluidodinámicas y de difusión, respectivamente.	38
3.12. Perfiles de concentración del Ne^{22} con $\alpha_T = 0,01$, $\alpha_T = -0,01$, y la variación lineal $\alpha_T = m \cdot T + b$	39
3.13. Perfiles de temperatura y de α_T a lo largo del radio para $X_s = 4$ mm y $R_s = 2$ mm.	39
3.14. Perfiles del gradiente de temperatura en las direcciones axial y radial a lo largo de la posición radial para $X_s = 4$ mm.	40
3.15. Mapas del número de Mach y de concentración obtenidos de las simulaciones fluidodinámicas y de difusión, respectivamente.	41
3.16. Perfiles de concentración del SF_6 a lo largo de la posición radial para $X_s = 4$ mm.	42
3.17. Perfiles de temperatura y de α_T a lo largo del radio para $X_s = 4$ mm y $R_s = 2$ mm.	42
3.18. Perfiles del gradiente de temperatura en las direcciones axial y radial a lo largo de la posición radial para $X_s = 4$ mm.	43
3.19. Concentración media en la salida 1 en función de la posición axial del skimmer X_s para $R_s = 1,5$ mm.	44

3.20. Mapa de vectores de velocidad coloreados por escala de concentración.	45
3.21. Mapas del número de Mach para las distintas posiciones axiales del skimmer con un radio $R_s = 1,8$ mm.	46
3.22. Mapas de concentración para las distintas posiciones axiales del skimmer con un radio $R_s = 1,8$ mm.	47
3.23. Mapas del número de Knudsen para las distintas posiciones axiales del skimmer con un radio $R_s = 1,8$ mm.	48
3.24. Ampliaciones de los mapas del número de Knudsen.	49
3.25. Concentración media en la salida 1 en función de la posición axial del skimmer X_s para $R_s = 1,8$ mm.	50
3.26. Mapas del campo del flujo en los que se presentan los cortes realizados por el skimmer.	51
3.27. Corte en cada una de las posiciones axiales X_s para $R_s = 1,8$ mm.	52
3.28. Esquema de las regiones analizadas para un corte radial.	53
3.29. Vectores de velocidad a la salida de la geometría utilizada.	54
3.30. Mapas del número de Mach y de concentración.	54
3.31. Perfiles de concentración para las posiciones $x = 3$ mm, $x = 4$ mm y $x = 5$ mm.	55
3.32. Perfiles de concentración media para las posiciones $x = 3$ mm, $x = 4$ mm y $x = 5$ mm.	56
3.33. Perfiles de velocidad axial para las posiciones $x = 3$ mm, $x = 4$ mm y $x = 5$ mm.	57
3.34. Vectores de velocidad coloreados por magnitud de la velocidad axial para la posición $x = 4$ mm.	58

Índice de tablas

2.1. Coeficientes del modelo de Pauly para distintos valores de γ	10
2.2. Valores de las concentraciones de referencia utilizadas para cada una de las mezclas de gases simuladas	17
2.3. Propiedades termofísicas de los gases utilizados	17
2.4. Coeficientes utilizados para la aproximación polinomial del C_p	18
2.5. Parámetros de los gases para el modelo de Sutherland	18
2.6. Valores de las pendientes y ordenadas al origen de las rectas calculadas para el modelo de dependencia térmica del α_T	23
2.7. Parámetros difusivos para las mezclas de gases.	24
3.1. Condiciones de las mediciones realizadas en el laboratorio del proyecto LASIE con una boquilla de diámetro $D = 0,3$ mm.	29
3.2. Configuraciones de presiones utilizadas para las simulaciones.	34
3.3. Posiciones radial y axial de la punta del skimmer analizadas.	43

Resumen

En este trabajo se analizaron distintos aspectos tanto fluidodinámicos como difusivos de flujos de mezclas binarias de gases en expansión libre supersónica.

Se realizaron simulaciones con condiciones similares a mediciones hechas en el laboratorio del proyecto LASIE, con el objetivo de analizar los procesos físicos que ocurren en el interior de una unidad separativa. Se encontró que para ciertas condiciones de presión, en regiones del dominio simulado no se cumple la hipótesis del continuo, y por ende, no se pueden representar los fenómenos físicos por medio de las ecuaciones de Navier-Stokes, ni por el modelo de gas ideal. El análisis computacional en régimen del continuo es la herramienta principal con la que se cuenta hasta el momento en el proyecto para poder comprender el comportamiento de los parámetros, tanto en los procesos fluidodinámicos como de difusión. Debido a esto, se diseñaron las condiciones de futuros experimentos con presiones de alta que puedan ser reproducidas en el laboratorio de acuerdo a sus capacidades, de modo que se cumpla esta hipótesis. Se obtuvieron las presiones de baja mínimas para diferentes diámetros de garganta con los que se dispone en el laboratorio, y se verificó que en las simulaciones se obtenga un valor de número de Knudsen menor a 0,3 en todo el dominio.

Por otra parte, se realizó un análisis de la influencia de la termoforesis para un gas de $Ne^{22}9, 25\%-Ne^{20}$ y otra mezcla de especies $SF_6 5\%-He$, implementando un modelo detallado para el factor termofórico. Se obtuvo que el aporte de la termoforesis a la difusión global para dichas mezclas no es relevante para las presiones utilizadas.

Luego, se estudió la variación en la concentración media a la salida de una cámara con divisor de caudal en función de la posición axial, para dos posiciones radiales de la punta del mismo, en una mezcla de $CO_2 2,5\%-He$. Para el menor valor de radio, se obtuvo enriquecimiento en las posiciones más cercanas a la boquilla, mientras que en las demás posiciones no se logra apreciar. Para el mayor de los radios, se obtuvo enriquecimiento, el cual varía en función de la posición axial, dado que se realizan cortes en distintas zonas difusivas a través de la onda de choque oblicua, debido a la curvatura de la misma.

Por último, se realizó un análisis de los perfiles de concentración en una tobera sin divisor de caudales. Se concluye que esta geometría resulta una herramienta adecuada para un análisis previo cualitativo de las posiciones óptimas de un skimmer, con el objetivo de enriquecer la especie pesada en la cámara externa.

Palabras clave: MECÁNICA DE FLUIDOS, FLUJO COMPRESIBLE, DIFUSIÓN BINARIA, TRANSFERENCIA DE MASA, EXPANSIÓN SUPERSÓNICA, TOBERA

Abstract

In this work, various fluid dynamic and diffusive aspects of supersonic free expansion binary gas mixtures were analyzed. Simulations were conducted under conditions similar to measurements taken in the LASIE project laboratory, aiming to analyze the physical processes occurring within a separation unit. It was found that for certain pressure conditions, the continuum hypothesis is not fulfilled in certain regions of the simulated domain. As a result, the physical phenomena cannot be represented using the Navier-Stokes equations nor the ideal gas model. Since computational analysis in the continuum regime is currently the only tool available in the project to understand the behavior of both fluid dynamic and diffusion parameters, future experimental conditions were designed with high pressures that can be reproduced in the laboratory according to its capabilities, ensuring the fulfillment of this hypothesis. Minimum low pressures were obtained for different throat diameters available in the laboratory, and it was verified that simulations yield a Knudsen number value less than 0.3 throughout the domain.

Furthermore, an analysis of the thermophoresis influence was performed for a gas mixture of Ne^{22} 9.25%- Ne^{20} and another mixture of SF_6 5%- He , implementing a detailed model for the thermophoretic factor. It was found that the contribution of thermophoresis to overall diffusion in these mixtures is not relevant for the pressures used.

Next, the variation in average concentration at the outlet of a flow divider chamber was studied as a function of axial position, considering two radial positions of the tip. This analysis was conducted using a CO_2 2.5%- He mixture. For the smaller radius, enrichment was observed in positions closer to the nozzle, while no enrichment (unless within the numerical uncertainty) was observed in other positions. For the larger radius, enrichment was observed, varying with the axial position of the skimmer. This is because the skimmer cuts are made in different zones through the oblique shock wave.

Finally, concentration profiles were analyzed in a nozzle without a flow divider. It is concluded that this geometry is a suitable tool for a qualitative preliminary analysis of optimal skimmer positions, aiming to enrich the heavy species in the external chamber.

Keywords: FLUID MECHANICS, COMPRESSIBLE FLUID FLOW, BINARY DIFFUSION, MASS TRANSFER, NOZZLE

Capítulo 1

Introducción

“Para ganar, lo primero que hay que hacer es llegar”

— Juan Manuel Fangio

1.1. Motivación

Como es ampliamente conocido, la materia se encuentra compuesta por átomos, y los mismos están compuestos por un núcleo orbitado por electrones. El núcleo está compuesto por protones, los cuales definen la especie y por ende, las propiedades físico químicas, y por neutrones los cuales definen el isótopo, y por ende, las propiedades nucleares.

En la industria nuclear, es muy importante la composición nuclear de los combustibles, ya que de esta depende la eficiencia en la fisión, y por ende de la obtención de la energía. La especie más abundante es el Uranio 238 (U238), el cual en la naturaleza se encuentra en una proporción del 99,289 %, frente a un 0,711 % de Uranio 235 (U235). Sin embargo, la cantidad de U235 que se utiliza en los combustibles nucleares, es determinante respecto del comportamiento neutrónico y generación de energía, por lo que en general se requiere una proporción superior de este isótopo a la que se encuentra en la naturaleza.

Para poder obtener una mayor proporción de Uranio 235 para poder utilizar en los reactores nucleares de potencia, se utilizan tecnologías de separación, las cuales consisten en separar los isótopos dentro de una misma especie.

En general, estas tecnologías consisten en procesos fluidodinámicos, en los cuales se dispone de la especie en cuestión de forma gaseosa mezclada con otra y se separan las mismas por diferencia de masas. Hoy en día, uno de los procesos de separación más utilizado, es el de centrifugación gaseosa, el cual requiere de tambores que giren a altas revoluciones por minuto. Esto trae complicaciones técnicas, tales como vibraciones y

balanceo de los rotores que contienen el gas, así como su diseño y construcción. Además, esta tecnología posee una baja tasa de enriquecimiento por etapa, haciendo necesaria la implementación de varias etapas en cascada, incrementando el costo. A continuación se listan algunas de las tecnologías utilizadas para la separación isotópica.

- Difusión gaseosa
- Centrifugación gaseosa
- Separación basada en procesos aerodinámicos
- Separación mediante electromagnetismo
- Separación mediante vapor atómico

1.1.1. Difusión gaseosa

Para la tecnología de difusión gaseosa, se utiliza una membrana porosa para separar las especies de una mezcla. El proceso implica inyectar el gas en el cual se encuentran las especies a separar en una primera cámara que se encuentra separada de una segunda cámara por medio de la membrana porosa, permitiendo que la especie más ligera difunda más a través de la misma, mientras que la especie más pesada se acumule en la cámara de origen. Ambas especies son recolectadas de cada cámara, obteniendo enriquecimiento de la especie más liviana en la segunda cámara, mientras se obtiene empobrecimiento de la misma en la cámara de origen. La eficiencia de la separación depende de factores como la diferencia de masa entre las especies y las propiedades de la membrana. En general, esta tecnología se utiliza en cascada, debido a la baja tasa de enriquecimiento por etapa.

En la Figura 1.1 se muestra un esquema del proceso.

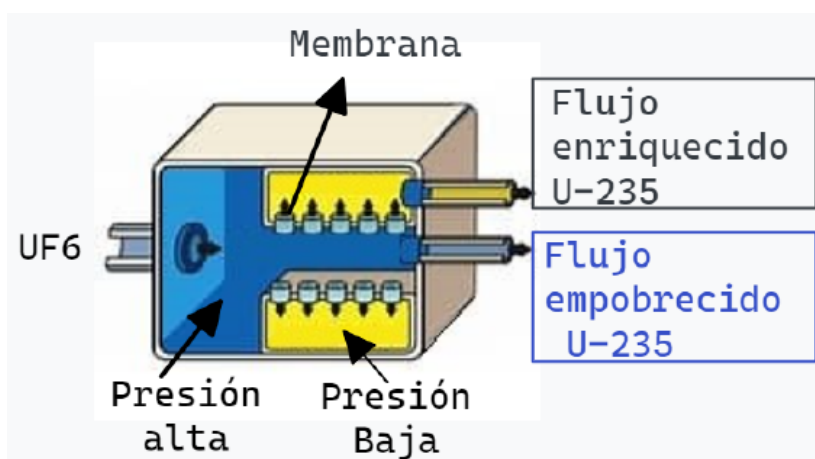


Figura 1.1: Esquema del proceso de difusión gaseosa.

1.1.2. Centrifugación gaseosa

La centrifugación gaseosa, consiste en introducir un gas que contenga los isótopos de interés en un rotor que gira a altas revoluciones por minuto. La especie más pesada se desplaza hacia el extremo exterior del rotor, mientras que la más ligera se concentra en el centro. Así, recolectando el gas resultante en cada una de las regiones en las que se acumula, se logra la separación de los isótopos. En la Figura 1.2 se muestra un esquema del proceso de centrifugación gaseosa.

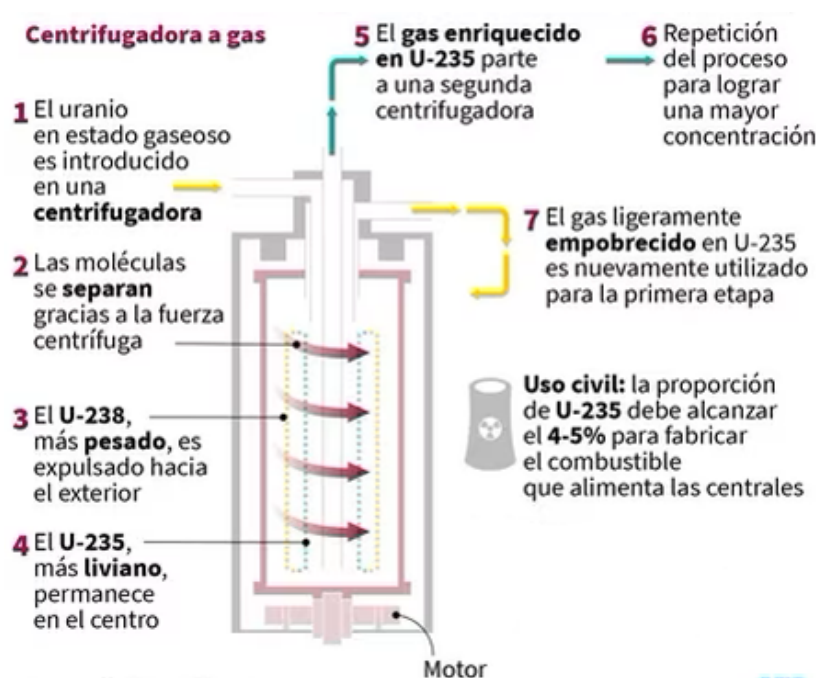


Figura 1.2: Esquema del proceso de centrifugación gaseosa.

1.1.3. Separación basada en procesos aerodinámicos

La tecnología de separación basada en procesos aerodinámicos consiste en generar gradientes de presión y/o de temperatura para favorecer la difusión de especies por medio de la barodifusión y/o la termoforesis. En general, su implementación se basa en el bombeo de un gas a través de una tobera para generar velocidades supersónicas, creando los gradientes de presión y temperatura propicios para la difusión. Ejemplos de esta técnica se encuentran en el Laboratorio Argentino de Separación Isotópica para Enriquecimiento (LASIE), donde se investigan métodos de enriquecimiento basados en procesos aerodinámicos asistidos por láser. Estos procesos utilizan un divisor de caudal para obtener una fracción enriquecida, conocida como "cabeza", y una fracción empobrecida, llamada "cola".

1.1.4. Separación por medio de electromagnetismo

La separación de especies por electromagnetismo se basa en la aplicación de campos magnéticos para aprovechar las propiedades magnéticas de las partículas o componentes a separar. Mediante la interacción de las especies con el campo magnético, se logra la separación de las mismas en función de sus propiedades magnéticas distintivas. Esta técnica tiene diversas aplicaciones, como la separación de minerales magnéticos en la industria minera y la purificación de materiales, entre otras.

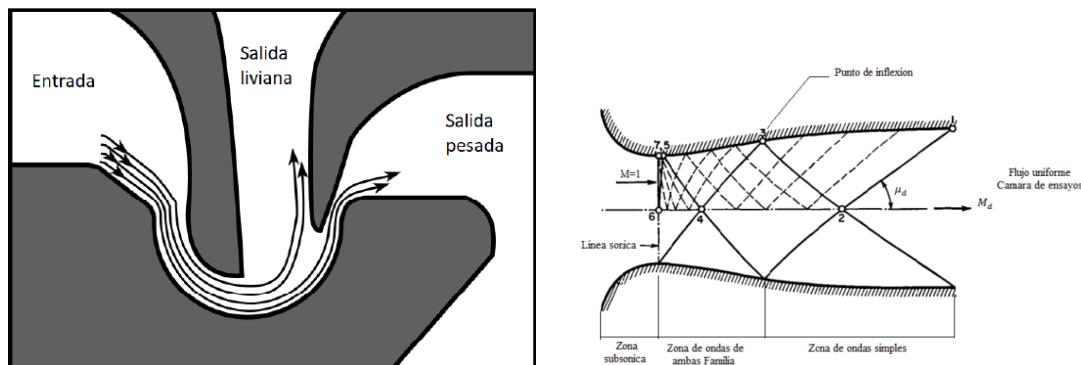
1.1.5. Separación mediante vapor atómico

Se implementa de forma similar a la separación por medio de electromagnetismo, pero se utiliza un láser para excitar de forma selectiva una de las especies para que interactúe con el campo electromagnético.

1.2. Proyecto LASIE

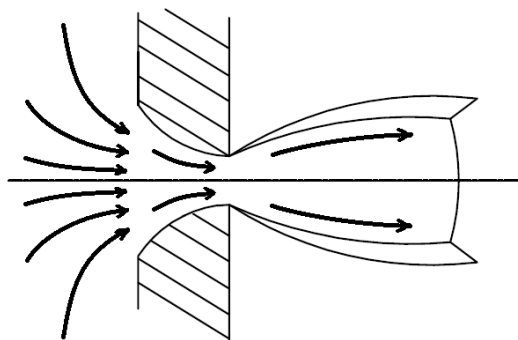
El proyecto LASIE es un proyecto llevado a cabo por la Comisión Nacional de Energía Atómica. En el mismo se desarrollan tecnologías de separación, basadas en procesos aerodinámicos, con el objetivo de mejorar la eficiencia de separación. Los procesos mencionados aprovechan las características termodinámicas de los flujos supersónicos, en los cuales se alcanzan temperaturas bajas que dan lugar al fenómeno de clusterización (o aglomeración) de las moléculas libres del gas, y se da lugar a fuertes gradientes de presión, favoreciendo la barodifusión. Debido a que los procesos de difusión de especies, dependen de la diferencia de masas entre ellas, esto crea una oportunidad para generar una diferencia efectiva de masas aún mayor, mediante la asistencia láser para evitar la aglomeración de moléculas de una de las especies de forma selectiva. Se busca que dichas tecnologías puedan aplicarse para el enriquecimiento de Uranio, Litio e Iterbio, para la industria nuclear, electrónica y medicinal, respectivamente.

Dentro del proyecto LASIE se encuentra la división de simulaciones fluidodinámicas, en la cual se realizó este trabajo. En esta división se llevan a cabo diferentes líneas de trabajo, en las cuales se estudian diferentes geometrías para utilizar en los procesos fluidodinámicos. Dichas geometrías van desde toberas curvas, como la que se muestra de forma esquemática en la Figura 1.3(a), toberas de Laval según la Figura 1.3(b), y toberas tipo expansión libre axi-simétrica, como en la Figura 1.3(c). Cada una de ellas se utiliza para estudiar distintos aspectos, tanto fluidodinámicos como difusivos, tales como los gradientes de presión por aceleración centrífuga, la formación de *clusters* y gradientes de presión por ondas de choque y termoforesis.



(a) Tobera curva con divisor de caudal.

(b) Tobera de Laval



(c) Tobera de expansión libre.

Figura 1.3: Toberas utilizadas en la división de simulaciones fluidodinámicas del proyecto LASIE.

En este trabajo, se utilizó la tobera tipo expansión libre axi-simétrica.

1.3. Objetivo

En este trabajo, se realizaron simulaciones fluidodinámicas de flujos de mezclas de gases en régimen supersónico, para analizar el comportamiento del mismo y los fenómenos físicos que se dan lugar bajo la variación de parámetros geométricos y físicos.

En primer lugar, se realizó un estudio de las características fluidodinámicas de experimentos llevados a cabo en el laboratorio del proyecto LASIE. En este, se buscó analizar la validez de la hipótesis del continuo y de las ecuaciones de Navier-Stokes para describir el proceso llevado a cabo en el laboratorio a bajas presiones.

El análisis computacional es la herramienta principal con la que se cuenta en el proyecto LASIE para poder entender el proceso físico que se lleva a cabo en el laboratorio, ya que brinda información con una resolución espacial que no se encuentra disponible por medio de otros métodos de análisis. Debido a esto, se realizó un diseño de experimento fijando las presiones de trabajo, de manera de poder aplicar razonablemente la hipótesis del continuo, habilitando el uso de las ecuaciones de Navier-Stokes.

Luego, se realizó un análisis de la influencia de la termoforesis y su relevancia en el proceso de difusión global, para distintas mezclas binarias de gases.

Se analizó la variación en la concentración media obtenida en una de las salidas de la geometría utilizada, en función de la posición axial y radial de la punta del divisor de caudal (skimmer), para una mezcla binaria.

Por último, se realizó una simulación de un flujo en una tobera sin divisor de caudal, en la que se realizaron análisis cualitativos de los perfiles de concentración en distintas posiciones axiales del flujo.

Capítulo 2

Caso de estudio

“Nada en la vida es para ser temido, es sólo para ser comprendido. Ahora es el momento de entender más, de modo que podamos temer menos ”

— Marie Curie, (1867 - 1934)

2.1. Separación de especies

La difusión de una especie en la otra se ve favorecida mientras mayores sean los gradientes de presión y de temperatura que existan en el flujo, como se detallará en la Sección 2.5. Por otra parte, en las ondas de choque se da lugar a grandes gradientes de presión y de temperatura como se detallará en 2.2. Debido a esto, se busca aprovechar las características que presenta el flujo en expansión libre axi-simétrica para buscar la separación de especies. En la Figura 2.1 se muestra un esquema del concepto del proceso fluidodinámico llevado a cabo para alcanzar la separación de especies.

En la Figura 2.1, se muestra un skimmer (o cuchilla) que se ubica a una distancia axial de la boquilla y posee un radio dado, con el fin de separar el flujo inicial en dos flujos de salida. La salida enriquecida con la especie más pesada (cabeza), se da lugar en la cara externa de la cuchilla (salida anular), mientras que la salida empobrecida de la especie pesada (cola), se da lugar en la cara interna del skimmer (salida axial), marcada en azul. Este enriquecimiento y empobrecimiento se debe a la separación de las especies que ocurre a través del barril de Mach, el cual refiere al núcleo supersónico envuelto por ondas de choque oblicuas marcadas en líneas punteadas. Para lograr esta condición de flujo supersónico, en expansión libre, se necesita alcanzar la condición sónica ($Ma = 1$) en la garganta de la tobera convergente (sección mínima o crítica). Esto sucede cuando la relación de presiones cumple con la expresión 2.1,

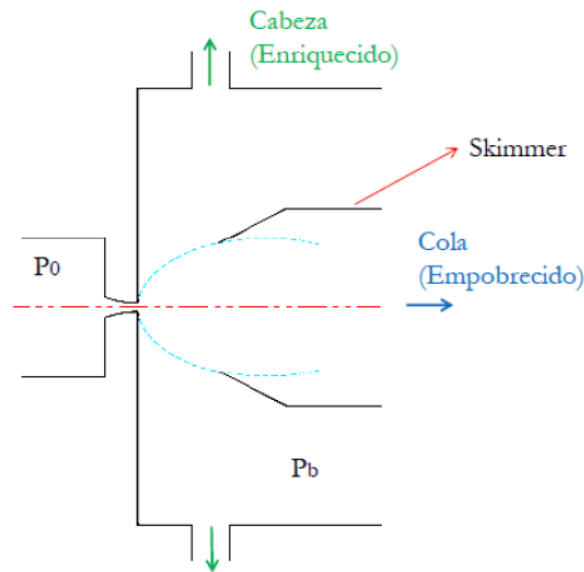


Figura 2.1: Esquema del concepto de geometría utilizada para la separación de especies.

$$\frac{P_0}{P_b} \geq \left(\frac{\gamma + 1}{2} \right)^{\frac{\gamma}{\gamma - 1}} \quad (2.1)$$

en donde γ , P_0 y P_b representan el coeficiente adiabático del gas, la presión de alta y presión de baja, respectivamente. Para relaciones de presión mayores al valor mostrado en 2.1, se obtiene un "choqueo" en la garganta y una expansión brusca en la cámara. El *choqueo* corresponde a un bloqueo en el aumento del flujo másico, es decir, el flujo másico se mantiene constante con un valor dado por la ecuación 2.2 para un flujo isoentrópico,

$$\dot{m}_{max} = \left(\frac{2}{\gamma + 1} \right)^{\frac{\gamma + 1}{2(\gamma - 1)}} A^* P_0 \sqrt{\frac{\gamma}{RT_e}} \quad (2.2)$$

en donde A^* , R , y T_e representan el área de la garganta, la constante particular del gas y la temperatura de estancamiento, respectivamente.

2.2. Flujo axi-simétrico en expansión libre

En este trabajo se analizó el flujo supersónico axisimétrico en expansión libre. Se planteó el flujo a través de una tobera convergente axisimétrica (boquilla), en la cual se alcanza el *choqueo* del flujo; lo que es decir alcanzar un valor de número de Mach unitario ($Ma = 1$) en la sección de área mínima de la boquilla y luego el flujo se expande en un volumen semi-infinito, alcanzando la presión menor P_b . En la Figura 2.2 se muestra un esquema de la geometría de un flujo en expansión libre axi-simétrica (Free Jet) estudiada en [3] y [4].

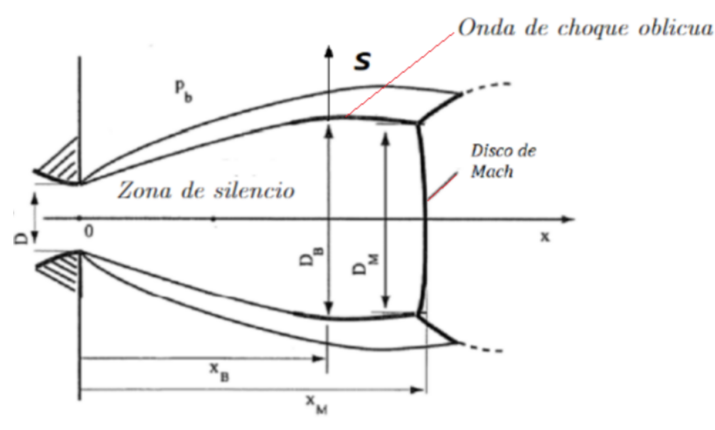


Figura 2.2: Esquema de la geometría de un flujo en expansión libre.

Los parámetros que describen la geometría del Free Jet son:

- D : Diámetro de la boquilla
- X : Eje de simetría
- X_M : Posición axial del disco de Mach (Onda de choque normal)
- X_B : Posición axial del diámetro máximo del Barril de Mach
- D_M : Diámetro del disco de Mach
- D_B : Diámetro máximo del Barril de Mach
- P_0 : Presión de la cámara de alta presión (Presión de estancamiento)
- P_b : Presión de la cámara de descarga

Se puede adimensionalizar al eje de simetría X , normalizándolo por el diámetro de la boquilla D , obteniendo $\bar{X} = \frac{X}{D}$. Por otra parte, los parámetros geométricos del flujo se pueden determinar en función del cociente entre la presión de alta y la de la cámara de descarga (presión de baja), según las Ecuaciones 2.3, 2.4, 2.5, y 2.6.

$$\bar{X}_M = 0,67 \sqrt{\frac{P_0}{P_b}} \quad (2.3)$$

$$\bar{X}_B = 0,63 \bar{X}_M \quad (2.4)$$

$$\bar{D}_M = 0,48 \bar{X}_M \quad (2.5)$$

$$1,19 \bar{D}_M \leq \bar{D}_B \leq 1,26 \bar{D}_M \quad (2.6)$$

La zona de silencio mostrada en la Figura 2.2, que se encuentra rodeada por una onda de choque oblicua, es una región en la que el flujo evoluciona de forma cuasi-isoentrópica. La evolución cuasi-isoentrópica del número de Mach en función de la distancia adimensional en el eje de simetría \bar{X} al origen está dada por la expresión 2.7, según [3].

$$Ma(\bar{X}) = \bar{X}^{\gamma-1} [C_1 + C_2\bar{X}^{-1} + C_3\bar{X}^{-2} + C_4\bar{X}^{-3}] \quad (2.7)$$

La Ecuación 2.7 se la conoce como modelo semi-empírico de Pauly, en donde los los coeficientes C_i dependen del coeficiente adiabático γ del gas y sus valores se presentan en la Tabla 2.1.

γ	C_1	C_2	C_3	C_4
5/3	3.232	-0.75630	0.3937	-0.0729
7/5	3.606	-1.742	0.9226	-0.2069
9/7	3.971	-2.327	1.326	-0.311

Tabla 2.1: Coeficientes del modelo de Pauly para distintos valores de γ

Cabe destacar que el modelo semiempírico de Pauly es válido hasta la posición axial en la cual se da lugar a la formación de una onda de choque normal (Disco de Mach), y el flujo adquiere un salto de entropía. Planteando la conservación de la entalpía de estancamiento para un gas perfecto ($C_p = \text{constante}$) se obtiene la evolución de la temperatura absoluta, en función del número de Mach en el eje de simetría adimensionalizado, según la Ecuación 2.8.

$$\frac{T_0}{T} = 1 + \frac{\gamma-1}{2} Ma(\bar{X})^2 \quad (2.8)$$

Luego, a partir de las relaciones isoentrópicas y la ecuación de estado, se tiene la evolución de la presión 2.9 y de la densidad 2.10, en donde los parámetros con subíndice 0 representan su valor de estancamiento.

$$\frac{P_0}{P} = \left[1 + \frac{\gamma-1}{2} Ma(\bar{X})^2 \right]^{\frac{\gamma}{\gamma-1}} \quad (2.9)$$

$$\frac{\rho_0}{\rho} = \left[1 + \frac{\gamma-1}{2} Ma(\bar{X})^2 \right]^{\frac{1}{\gamma-1}} \quad (2.10)$$

En la Figura 2.3 se muestran las curvas del número de Mach para diferentes valores del coeficiente adiabático.

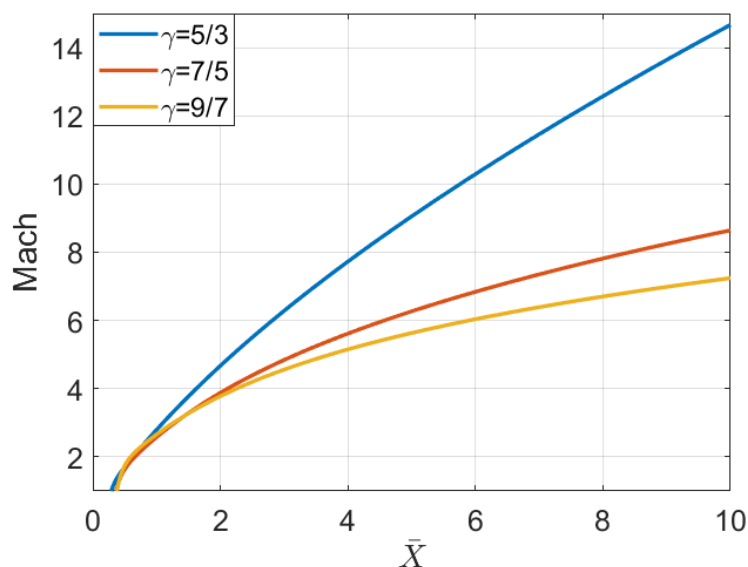


Figura 2.3: Evolución del número de Mach en función del eje de simetría adimensionalizado, según el modelo semiempírico de Pauly 2.7. Las curvas azul, naranja y amarilla, corresponden a un gas monoatómico, diatómico y poliatómico, respectivamente.

Por otra parte, en la Figura 2.4 se muestra la evolución de la temperatura y la presión en función del eje adimensional.

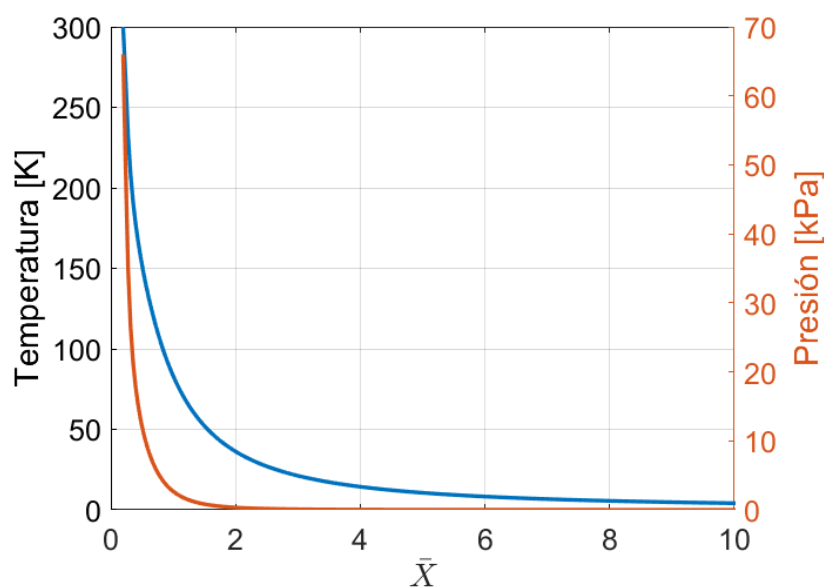


Figura 2.4: Evolución de la temperatura y de la presión en función del eje adimensional, en las curvas azul y naranja, respectivamente, para una presión y temperatura de alta de 660 mBar y 300 K, respectivamente.

Se puede observar de la Figura 2.4, que ambas variables termodinámicas descienden de forma muy abrupta al producirse la expansión supersónica en la cámara. Esto fomenta la formación de *clusters* en la zona del núcleo supersónico del flujo. Además, este descenso abrupto, puede generar condiciones en las cuales la hipótesis del continuo deja de ser válida, como se detalla en la sección 2.3.

2.3. Número de Knudsen

El número de Knudsen, es un parámetro adimensional que se define como el cociente entre el camino libre medio de las moléculas de un gas y alguna longitud característica del caso en estudio. Este parámetro sirve para saber si el flujo se mantiene bajo la hipótesis del continuo, o si se encuentra en otro régimen. En la Figura 2.5 se muestran los distintos modelos utilizados para distintos rangos de valores del número de Knudsen.

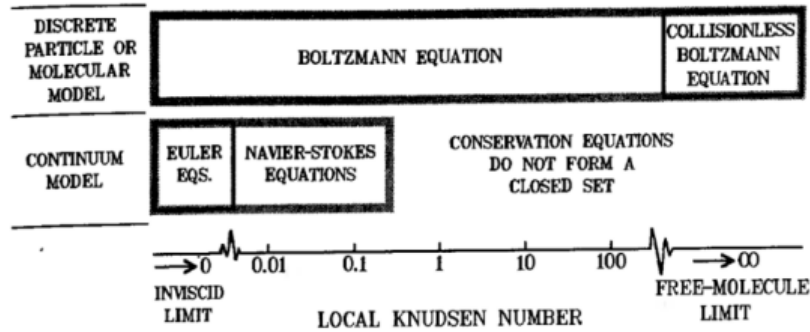


Figura 2.5: Modelos matemáticos para distintos rangos de valores del número de Knudsen [1].

En las Ecuaciones 2.11 y 2.12 se definen el camino libre medio de las moléculas de un gas y el número de Knudsen, respectivamente.

$$\lambda = \frac{k_B T}{\sqrt{2\pi d^2 P}} \quad (2.11)$$

$$Kn = \frac{\lambda}{D} = \frac{k_B T}{\sqrt{2\pi d^2 P}} \cdot \frac{1}{D} = \frac{k_B}{\sqrt{2\pi d^2 R \rho}} \cdot \frac{1}{D} \quad (2.12)$$

A continuación se describen los parámetros:

- D: Diámetro de la boquilla
- λ : Camino libre medio
- k_B : Constante de Boltzmann
- d: Diámetro de Van der Waals
- T: Temperatura
- P: Presión
- R: Constante particular del gas
- ρ : Densidad

Se puede observar de la Ecuación 2.12 que el número de Knudsen es inversamente proporcional a la densidad para un gas ideal. Según [5], la hipótesis del continuo es válida, y por ende, las ecuaciones de Navier-Stokes, cuando el número de Knudsen toma valores menores a 0,1. Sin embargo, en el laboratorio se ha observado que se mantiene la validez de los cálculos aún cuando en algunas zonas del dominio se alcanza valores cercanos a 0,3 [6]. En la Figura 2.6, se muestra la evolución del número de Knudsen, en función de la posición en el eje adimensional.

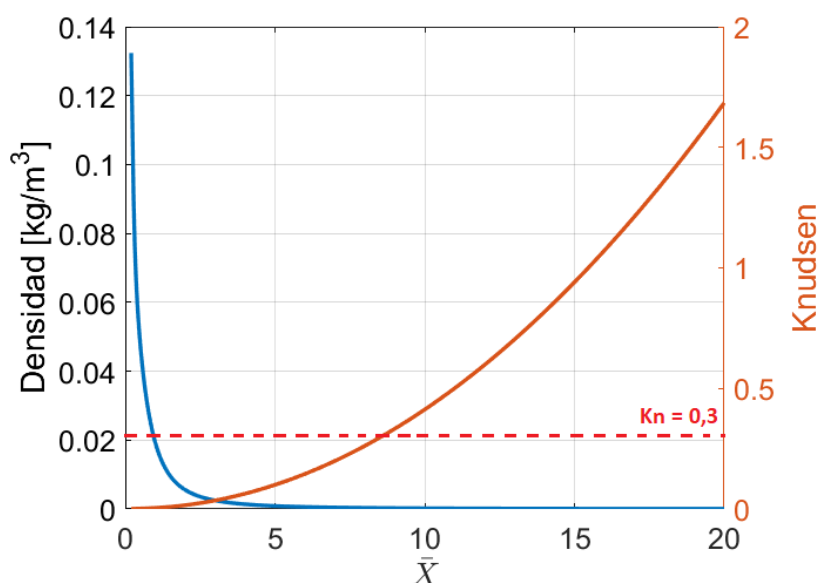


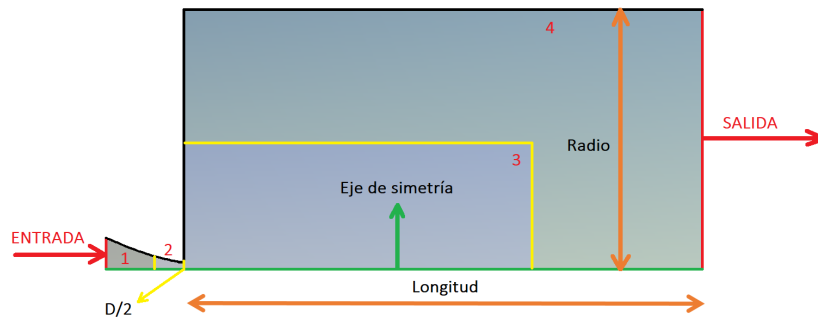
Figura 2.6: Evolución de la densidad y del número de Knudsen en función de la distancia en el eje adimensional en las curvas azul y naranja, respectivamente, para una presión de alta de 660 mBar.

La evolución del número de Knudsen mostrada en la Figura 2.6 es un ejemplo de los valores posibles que puede llegar a tomar cuando la densidad es muy baja, los cuales quedarían por encima del valor 0,3, del cual se mencionó anteriormente.

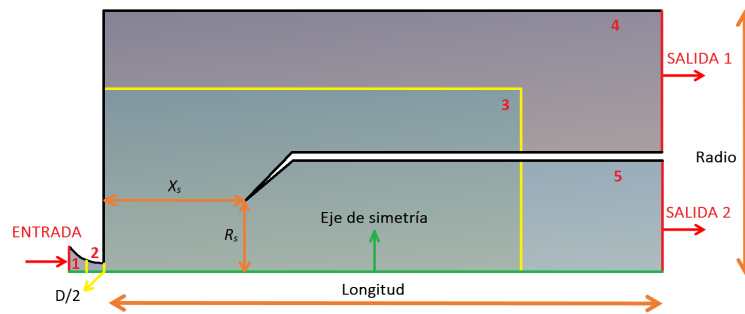
2.4. Modelo numérico

2.4.1. Geometría

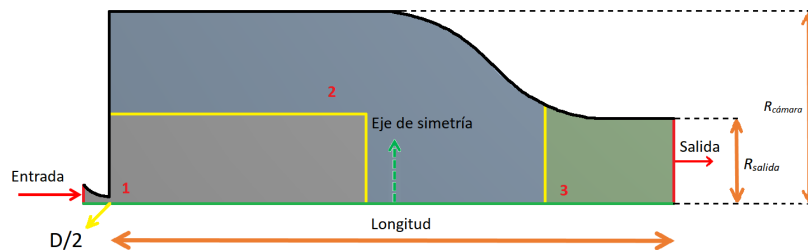
Para lograr una representación lo más fiel posible del caso de estudio, se implementó el uso de tres geometrías distintas para realizar las simulaciones del flujo. En las Figuras 2.7(a), 2.7(b) y 2.7(c) se muestran las geometrías utilizadas en ANSYS-*Fluent* sin skimmer, con skimmer y con sección de salida reducida, respectivamente, a partir de las cuales se realizaron las simulaciones fluidodinámicas.



(a) sin skimmer



(b) con skimmer



(c) Con sección de salida reducida

Figura 2.7: Geometrías utilizadas.

La geometría mostrada en la Figura 2.7(a) se utilizó para analizar la geometría del flujo supersónico, y analizar otros aspectos fluidodinámicos sin analizar la difusión.

La geometría mostrada en la Figura 2.7(b) se utilizó para analizar la separación de especies y el enriquecimiento obtenido en la salida 1. En esta geometría se introducen dos parámetros nuevos X_s y R_s , los cuales representan la posición axial y radial del skimmer, respectivamente.

La geometría mostrada en la Figura 2.7(c) se utilizó para realizar un análisis de perfiles de concentración en diferentes posiciones axiales. Debido a que el cálculo de la concentración no es representativo cuando se obtiene un reingreso del flujo en la sección de salida, se modela esta geometría con reducción de área de salida para evitar este inconveniente.

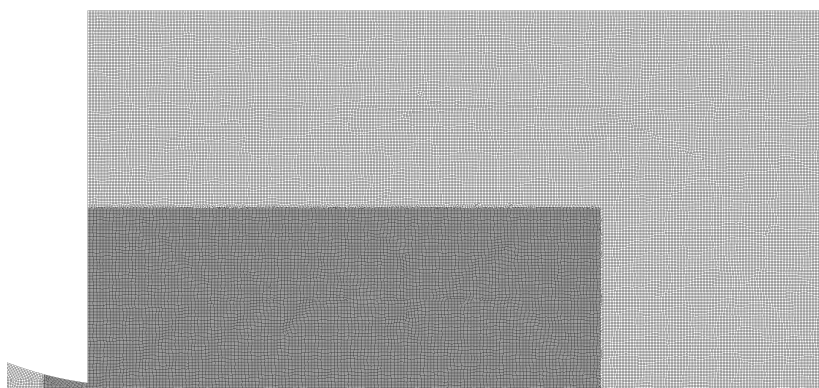
En las tres geometrías, las condiciones de contorno impuestas al *Fluent* para resolver el campo de flujo fueron que las líneas en negro representen una pared, las líneas rojas entrada y salidas del flujo, y la línea verde, el eje de simetría.

El software *Fluent* reconoce los bordes de entrada y salida si se las nombra como *Inlet* y *Outlet*, respectivamente. En el caso de tener más de una salida como en el caso de la Figura 2.7(b), se puede acompañar al nombre *Outlet* con el número de la salida correspondiente. Además, *Fluent* reconoce las paredes y el eje de simetría, llamando a dichos bordes como *Wall* y *Axis*, respectivamente.

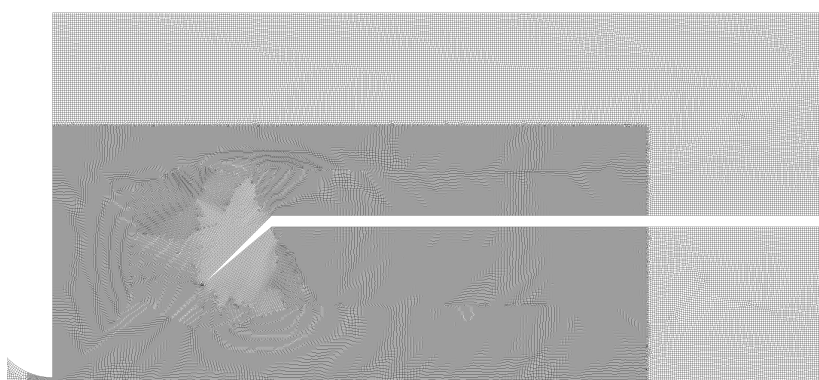
2.4.2. Mallado

Las zonas delimitadas por líneas amarillas en las Figuras 2.7, son las distintas regiones de mallado. En las regiones 1 y 4 de la geometría sin skimmer, se realizó un mallado con un tamaño de celda máximo de $40 \mu\text{m}$, mientras que en las regiones 2 y 3 se utilizó un tamaño de celda máximo de $20 \mu\text{m}$. Por otra parte, en la geometría con skimmer, se realizó el mismo mallado en las regiones 1, 2, 3, y 4; mientras que en la región 5 se realizó el mismo mallado que en la región 4. La relación utilizada para realizar las uniones entre las distintas zonas de mallado se determinó que fuese 2 a 1. Esto se debe a que de esta forma, la información de las celdas menores se transmite de manera más efectiva hacia las celdas de mayor tamaño. En las regiones 2 y 3 se realizó un mallado más fino, debido a que en dicha zona, se generan los mayores gradientes, y por ende, la zona en la que ocurre la difusión.

En las Figuras 2.8 se muestran los mallados utilizados.



(a) sin skimmer



(b) con skimmer

Figura 2.8: Mallado de las geometrías utilizadas.

Se puede observar que en las zonas 2 y 3 el mallado es más fino, como se explicó anteriormente. En total, se generó una cantidad del orden de 190.000 celdas, variando levemente para cada caso.

En la Figura 2.9 se muestran ampliaciones de las uniones entre las distintas zonas de mallado, en donde se puede observar que en las uniones entre cada una de las regiones las celdas pierden calidad ortogonal debido a la necesidad de que se deformen para poder generar el empalme entre las dos regiones.

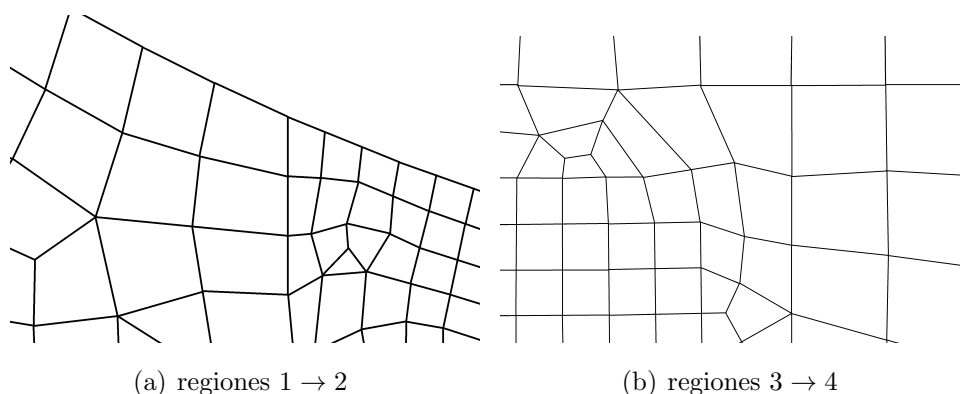


Figura 2.9: Ampliaciones de la unión entre las regiones 1 y 2 en 2.9(a), y entre las regiones 3 y 4 en 2.9(b).

2.4.3. Propiedades de los fluidos

Para las simulaciones fluidodinámicas, se utilizaron distintas mezclas de gases, con distintos valores de concentración de referencia del gas con mayor masa molecular, como se muestran en la Tabla 2.2.

Mezcla	Especie 1	Especie 2
CO_2-He	CO_2 : 2,5 %	He : 97,5 %
Ne	Ne^{22} : 9,25 %	Ne^{20} : 90,75 %
SF_6-He	SF_6 : 5 %	He 95 %

Tabla 2.2: Valores de las concentraciones de referencia utilizadas para cada una de las mezclas de gases simuladas

Los parámetros termofísicos de cada una de las mezclas, tales como la capacidad calorífica a presión constante C_p , la conductividad térmica k y la masa molecular M , se presentan en la Tabla 2.3.

Propiedad	CO_2	He	Ne	SF_6-He
C_p $\left[\frac{J}{kg \cdot K}\right]$	*	5193	1030	2212,5
k $\left[\frac{J}{m \cdot K}\right]$	0,0145	0,152	0,05	0,124
M $\left[\frac{kg}{kmol}\right]$	44,00995	4,0026	20,175	11,1

Tabla 2.3: Propiedades termofísicas de los gases utilizados

Para el C_p del CO_2 , se ha utilizado un modelo llamado "piecewise-polynomial", para considerar los cambios en el valor del mismo en función de la temperatura. Este modelo aproxima el C_p por un polinomio. En este trabajo se utilizó un polinomio como el que se muestra en la Ecuación 2.13.

$$C_p = a_0 + a_1 \cdot T + a_2 \cdot T^2 + a_3 \cdot T^3 + a_4 \cdot T^4 \left[\frac{J}{kg \cdot K} \right] \quad (2.13)$$

En la Tabla 2.4 se muestran los valores utilizados para los coeficientes de la Ecuación 2.13, obtenidos de [7].

a_0	a_1	a_2	a_3	a_4
429,9289	1,874473	-0,001966485	$1,297251 \cdot 10^{-6}$	$-3,999956 \cdot 10^{-10}$

Tabla 2.4: Coeficientes utilizados para la aproximación polinomial del C_p .

Los valores de las propiedades de la mezcla SF_6-He , se calculan a partir de las propiedades individuales de cada gas, pesadas por la masa y la concentración molar de cada una de ellas, según [7].

La viscosidad de cada uno de los gases se determinó mediante el modelo de Sutherland. Este modelo determina la viscosidad según la ecuación 2.14,

$$\mu(T) = \mu_0 \left(\frac{T}{T_0} \right)^{3/2} \cdot \frac{T_0 + S}{T + S} \quad (2.14)$$

en donde T es la temperatura, T_0 y μ_0 son la temperatura y viscosidad de referencia, respectivamente, y S es la temperatura efectiva (Constante de Sutherland).

En la Tabla 2.5 se muestran los valores de dichos parámetros para cada uno de los gases utilizados.

Parámetro	CO_2	He	Ne	SF_6-He
μ_0 [$Pa \cdot s$]	$13,7 \cdot 10^{-6}$	$19,9 \cdot 10^{-6}$	$29,8 \cdot 10^{-6}$	$20,75 \cdot 10^{-6}$
T_0 [K]	273,11	273	276,4	273,1
S [K]	222,22	144,4	144,4	222,1

Tabla 2.5: Parámetros de los gases para el modelo de Sutherland

2.4.4. Configuraciones generales

Para todas las simulaciones realizadas en este trabajo se utilizó el modelo de flujo compresible, laminar y en estado estacionario.

Como condiciones de contorno, se determinó que las paredes de la cámara de descarga y de la boquilla mantengan una temperatura constante de 300 K, que no haya difusión a través de las mismas y que no haya deslizamiento del flujo sobre ellas. Por otra parte, se determinó que la entrada y salida del flujo sean determinadas a partir de presiones, debido a que es la magnitud que se puede regular en el laboratorio. Por último, se utilizó un método de segundo orden tanto para el cálculo fluidodinámico como

para el difusivo, usando 4 núcleos en la máquina, tardando cada caso aproximadamente 2 días.

2.5. Modelo de difusión binaria

En un flujo de una mezcla binaria de gases se da lugar al proceso de difusión entre las especies que conforman la misma. En esta sección se busca dar sustento teórico al proceso de difusión de especies, para un flujo en régimen estacionario ($\frac{\partial}{\partial t} = 0$).

La velocidad de la mezcla \vec{V} en función de las velocidades de las especies \vec{V}_i , la densidad de las mismas ρ_i , y la densidad de la mezcla ρ , se muestra en la Ecuación 2.15,

$$\vec{V} = \frac{\vec{V}_1\rho_1 + \vec{V}_2\rho_2}{\rho} \quad (2.15)$$

en donde $\rho_i = n_i m_i$, con n_i la densidad molar de la especie i , y m_i la masa molecular de la especie i . Por otra parte, las velocidades relativas de cada una de las especies se pueden expresar en función de las velocidades absolutas de cada una de ellas respecto de la velocidad de la mezcla según 2.16 y 2.17,

$$\vec{u}_1 = \vec{V}_1 - \vec{V} \quad (2.16)$$

$$\vec{u}_2 = \vec{V}_2 - \vec{V} \quad (2.17)$$

Paralelamente, se pueden definir las corrientes difusivas másicas de cada especie según las Ecuaciones 2.18, y 2.19,

$$\vec{J}_1^D = \rho_1 (\vec{V}_1 - \vec{V}) = \rho_1 \cdot \vec{u}_1 \quad (2.18)$$

$$\vec{J}_2^D = \rho_2 (\vec{V}_2 - \vec{V}) = \rho_2 \cdot \vec{u}_2 \quad (2.19)$$

La conservación de masa para las corrientes difusivas resulta en la expresión 2.20, de la cual en combinación con 2.18 y 2.19, se obtiene la Ecuación 2.21,

$$\vec{J}_1^D + \vec{J}_2^D = 0 \quad (2.20)$$

$$\vec{J}_1^D = \frac{\rho_1 \cdot \rho_2}{\rho} (\vec{u}_1 - \vec{u}_2) = \frac{n_1 \cdot n_2}{n} \cdot \frac{m_1 \cdot m_2}{m} (\vec{u}_1 - \vec{u}_2) \quad (2.21)$$

en donde n_i , m_i , y m representan la densidad molar de la especie i , la masa molecular de la especie i , y la masa molecular de la mezcla, respectivamente.

La densidad molar n de cada una de las especies se muestra según la Ecuación 2.22,

$$n_i = \frac{C_i \cdot \rho}{C_1 \cdot m_1 + (1 - C_1) m_2} \quad (2.22)$$

en donde C es la concentración molar y el subíndice i indica la especie. Además, para el caso de difusión binaria, se cumple la relación dada por la Ecuación 2.23.

$$C_1 + C_2 = 1 \quad (2.23)$$

La diferencia de velocidades relativas entre las especies, está dada por la Ecuación 2.24, según [8],

$$\vec{u}_1 - \vec{u}_2 = \frac{-n^2}{n_1 \cdot n_2} D_{12} \left[\nabla C_1 - \frac{n_1 \cdot n_2 (m_1 - m_2)}{n \cdot \rho} \frac{\nabla P}{P} + K_T \frac{\nabla T}{T} \right] \quad (2.24)$$

en donde D_{12} , P , T , y K_T representan el coeficiente de difusión de la especie 1 en la especie 2, la presión, la temperatura y el coeficiente de difusión térmica, respectivamente.

De esta forma, reemplazando la ecuación 2.24 en 2.21, se obtiene la expresión de la ecuación 2.25.

$$\vec{J}_1^D = \frac{-m_1 \cdot m_2}{m} n D_{12} \left[\nabla C_1 - \frac{n_1 \cdot n_2 (m_1 - m_2)}{n \cdot \rho} \frac{\nabla P}{P} + K_T \frac{\nabla T}{T} \right] \quad (2.25)$$

El flujo total de la especie 1, se obtiene según 2.26,

$$\vec{J}_1 = \rho_1 \cdot \vec{V}_1 = \vec{J}_1^D + \rho_1 \cdot \vec{V} \quad (2.26)$$

y si se plantea la ecuación de continuidad ($\frac{\partial \rho_1}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J}_1 = 0$), y se considera la hipótesis de régimen estacionario, se tiene 2.27,

$$\nabla \cdot \left\{ \frac{m_2}{C_1(m_1 - m_2) + m_2} n D_{12} \left[\nabla C_1 - \frac{C_1(1 - C_1)(m_1 - m_2)}{C_1(m_1 - m_2) + m_2} \frac{\nabla P}{P} + K_T \frac{\nabla T}{T} \right] - \frac{C_1 \rho \vec{V}}{C_1(m_1 - m_2) + m_2} \right\} = 0 \quad (2.27)$$

en donde se tiene que el producto $n \cdot D_{12}$ y el coeficiente de difusión térmica K_T están dados por las Ecuaciones 2.28 y 2.29, respectivamente.

$$n \cdot D_{12} = \frac{p_0 D_{120}}{\bar{R}} \frac{T^{b-1}}{T_0^b} \frac{\Omega_{D_{120}}}{\Omega_{D_{12}}} \quad (2.28)$$

$$K_T = \alpha_T \cdot C_1 C_2 = \alpha_T \cdot C_1 (1 - C_1) \quad (2.29)$$

De la Ecuación 2.28 se tiene que p_0 , D_{120} , T_0 , y \bar{R} son la presión de referencia a p_0 y T_0 , el coeficiente de difusión de referencia, la temperatura de referencia y la constante

universal de los gases ideales, respectivamente. El exponente b es un parámetro de difusión que será explicado en la Sección 2.5.2 y Ω representa las integrales de colisión, los cuales son parámetros de un modelo que busca determinar con mayor precisión al coeficiente de difusión cuando se produce un cambio grande en la temperatura. Esto fue estudiado en detalle en trabajos previos [9].

El parámetro α_T se lo conoce factor de difusión térmica y se explicará más en detalle en la sección 2.5.1.

Al resolver la ecuación 2.27 para C_1 se puede obtener el perfil de concentración en una dada región, aunque primero es necesario resolver la fluidodinámica. Esta expresión es una ecuación implícita y no lineal, por lo que el software utilizado ANSYS-Fluent la resuelve por métodos numéricos.

2.5.1. Factor de difusión térmica α_T

Como se ha mostrado en la ecuación 2.29, el coeficiente de difusión térmica depende de el factor de difusión térmica α_T y del producto de las concentraciones.

El factor de difusión térmica α_T en una mezcla binaria de gases, es un parámetro que depende tanto de la temperatura como de las masas de las especies involucradas. Dicha dependencia, se representa como el producto entre una función que depende exclusivamente de la temperatura, y otra que depende exclusivamente de las masas, como se muestra en la Ecuación 2.30, según [2].

$$\alpha(T_c, M) = \alpha'_T(T_c) \cdot \frac{m_1 - m_2}{m_1 + m_2} \quad (2.30)$$

En la Figura 2.10 se muestra la dependencia de α_T con las masas de las especies, según [2].

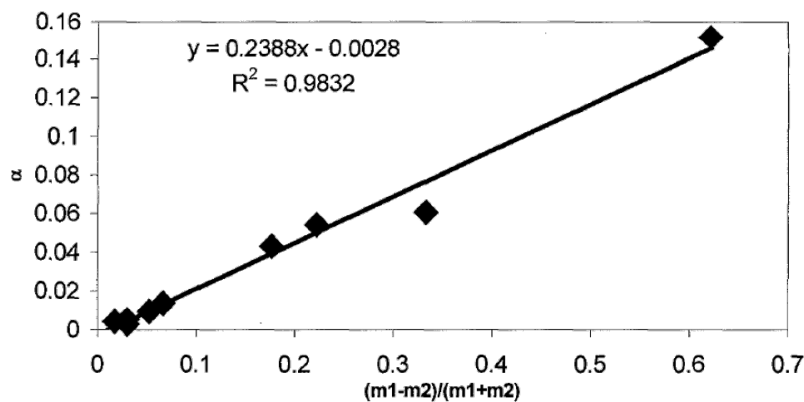


Figura 2.10: Dependencia másica del α_T [2].

Según la Figura 2.10, se puede ver una relación lineal entre el α_T y las masas de las especies. Cabe destacar que el subíndice "1" representa la especie con mayor masa

molecular.

En la Figura 2.11 se muestra la dependencia de α_T con la temperatura de la mezcla, según [2].

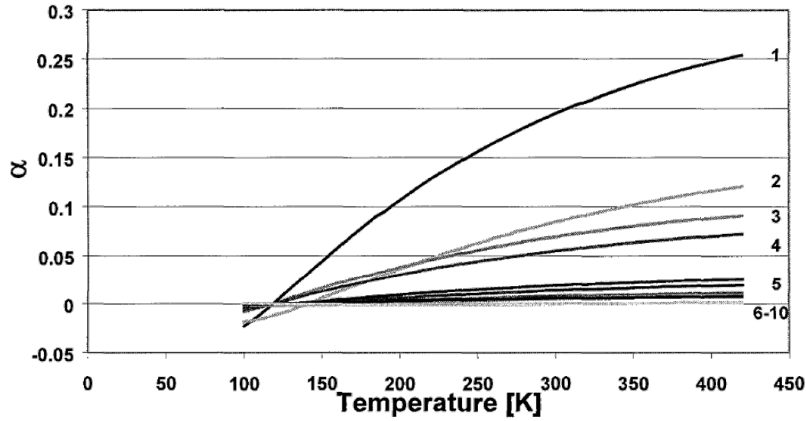


Figura 2.11: Dependencia térmica del α_T [2].

Las curvas presentadas en la Figura 2.11 corresponden a diferentes mezclas binarias de gases con diferencias de masas que van de mayor a menor del 1 al 10. Dichas curvas fueron determinadas a partir del modelo de Lennard-Jones, como se detalla en [2] y [10].

Debido a la complejidad que poseen dichas ecuaciones, en este trabajo se realizó una aproximación lineal a dichas curvas para determinar la variación del α_T respecto de la temperatura. Se seleccionaron dos puntos del α_T y de temperatura a partir del gráfico de la Figura 2.11, y se trazó la recta que los une. Para los casos de $Ne^{22}-Ne^{20}$ y SF_6-He , el primer punto se fijó a una temperatura de 120 K y $\alpha_T = 0$. Para el segundo punto, debido a que el cociente entre la diferencia y la suma de las masas para los gases utilizados en este trabajo queda por fuera del rango analizado en [2], se realizó una extrapolación de los valores del α_T utilizando el ajuste lineal dado en la Figura 2.10. Con esta extrapolación se calcularon los cocientes entre los valores de $\alpha_T(M)$ para las mezclas correspondientes y se multiplicó por dicha relación al valor de α_T del último punto del gráfico de la Figura 2.10, el cual corresponde a una mezcla de $CFC-12/N_2$ a 410 K. Esto se muestra en la Ecuación 2.31.

$$\alpha_T(T)^{CO_2} \Big|_{T=410K} = \frac{\alpha_T(M) \Big|_{CO_2}}{\alpha_T(M) \Big|_{CFC-12/N_2}} \alpha_T(T)^{CFC-12/N_2} \Big|_{T=410K} \quad (2.31)$$

De forma análoga se determinó el valor de $\alpha_T(T)^{SF_6} \Big|_{T=410K}$. Para el α_T^{Ne} se determinó una recta que pase por los puntos $T_1 = 100$ K, $\alpha_{T_1} = -0,01$ y $T_2 = 200$ K, $\alpha_{T_2} = 0,01$. En la Figura 2.12 se muestran las rectas obtenidas.

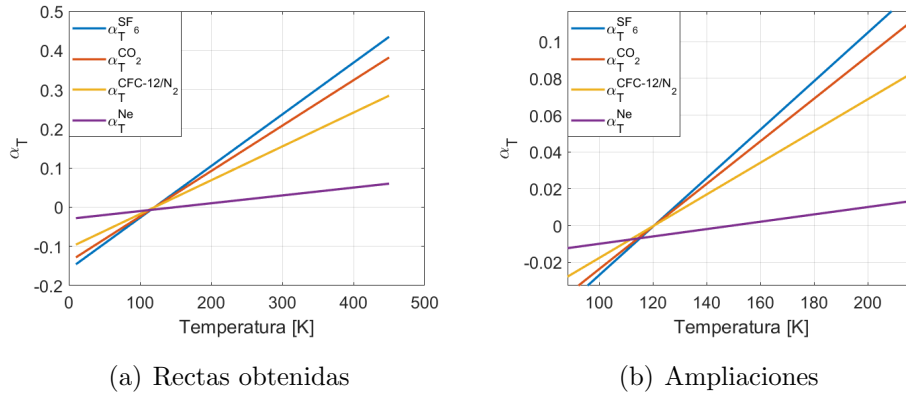


Figura 2.12: Aproximaciones lineales para $\alpha(T)^{SF_6}$, $\alpha(T)^{CO_2}$, $\alpha(T)^{Ne}$, y la recta de referencia de $\alpha(T)^{CFC-12/N_2}$.

En la Tabla 2.6 se muestran los valores obtenidos para las pendientes y ordenadas al origen de las rectas con las que se modeló la variación térmica del α_T .

	<i>Ne</i>	<i>SF₆ - He</i>	<i>CO₂ - He</i>
m [$\frac{1}{K}$]	$2 \cdot 10^{-4}$	0,0013	0,0012
b	-0,03	-0,1590	-0,1397

Tabla 2.6: Valores de las pendientes y ordenadas al origen de las rectas calculadas para el modelo de dependencia térmica del α_T

Por último, se comparó los resultados de difusión utilizando las aproximaciones lineales mencionadas anteriormente contra valores constantes de α_T .

2.5.2. Implementación del modelo de difusión binaria

El software *Fluent* es capaz de resolver ecuaciones como la mostrada en 2.32 para determinar el parámetro β , conociendo $\vec{\psi}$ y Γ . De esta manera, asignando la concentración de la especie 1 al parámetro $\beta = C_1$, y determinando el vector $\vec{\psi}$ y el escalar Γ como se muestra en las Ecuaciones 2.33 y 2.34, respectivamente, se puede determinar la concentración C_1 .

$$\nabla \cdot (\vec{\psi} \cdot \beta - \Gamma \cdot \nabla \beta) = 0 \quad (2.32)$$

$$\vec{\psi} = \frac{1}{C_1(m_1 - m_2) + m_2} \left\{ \frac{m_2 p_0 D_{120}}{RT_0^b} \frac{\Omega_{D_{120}}}{\Omega_{D_{12}}} \frac{(1 - C_1)(m_1 - m_2)}{C_1(m_1 - m_2) + m_2} T^{b-1} \left[\frac{\nabla P}{P} - \alpha_T \frac{\nabla T}{T} \right] + \rho \vec{V} \right\} \quad (2.33)$$

$$\Gamma = \frac{m_2}{C_1(m_1 - m_2) + m_2} \frac{p_0 D_{012}}{R} \frac{\Omega_{D_{120}}}{\Omega_{D_{12}}} \frac{T^{b-1}}{T^b} \quad (2.34)$$

En donde D_{120} representa el coeficiente de difusión de la especie 1 en 2 de referencia a p_0 y T_0 . Estos parámetros $\vec{\psi}$ y Γ se deducen de la Ecuación 2.27 y han sido calculados mediante un código externo en lenguaje C el cual se carga en *Fluent*, una vez alcanzada la convergencia fluidodinámica, debido a que como se puede observar, dependen de los parámetros fluidodinámicos. Las derivadas de la presión y temperatura las calcula internamente *Fluent*, a través de los valores de las variables y el tamaño del mallado. En el mismo código se calcula lo valores de α_T . En la Tabla 2.7 se muestran los valores de los parámetros de difusión de las mezclas de gases utilizadas.

Prop.	CO_2-He	Ne	SF_6-He
$m_1 \left[\frac{g}{mol} \right]$	44,0026	21,99	146
$m_2 \left[\frac{g}{mol} \right]$	4,00995	19,99	4,00995
$D_{120} \left[\frac{m^2}{s} \right]$	$73,9 \cdot 10^{-6}$	$18,1 \cdot 10^{-6}$	$38,96 \cdot 10^{-6}$
$p_0 [Pa]$	101300	101300	101300
$T_0 [K]$	343	343	343
b	1,74	1,823	1,5

Tabla 2.7: Parámetros difusivos para las mezclas de gases.

Los valores utilizados para los parámetros de $\Omega_{D_{120}}$ y $\Omega_{D_{12}}$, han sido tomados de [9].

Cabe destacar que el escalar $\beta = C_1$ es un escalar pasivo, es decir, que se calcula utilizando los valores de los parámetros fluidodinámicos sin alterarlos

2.6. Cálculo de la concentración media y errores

El software *Fluent* proporciona los valores de concentración en cada celda de la malla realizada. A partir de esta, se pueden determinar tanto los caudales molares de la especie 1, como de la mezcla según las Ecuaciones 2.38 y 2.37,

$$n = \frac{\rho}{C_1 \cdot m_1 + (1 - C_1) \cdot m_2} \quad (2.35)$$

$$n_1 = C_1 \cdot n = \frac{C_1 \rho}{C_1 \cdot m_1 + (1 - C_1) \cdot m_2} \quad (2.36)$$

$$\dot{n} = \int_{r_1}^{r_2} n \cdot V_x \, dA \quad (2.37)$$

$$\dot{n}_1 = \int_{r_1}^{r_2} n_1 \cdot V_x \, dA \quad (2.38)$$

en donde V_x , r_1 , r_2 y A son la velocidad axial, radio inicial de integración, radio final de integración y la superficie en la cual se evalúan las cantidades mencionadas, respectivamente. A partir de los caudales molares \dot{n}_1 y \dot{n} , se puede determinar la concentración media en una superficie, como el cociente entre los mismos, según la Ecuación 2.39.

$$\bar{C} = \frac{\dot{n}_1}{\dot{n}} \quad (2.39)$$

Por otra parte, los errores porcentuales en los caudales molares, y en la concentración media se determinan según las Ecuaciones 2.40, 2.41 y 2.42, respectivamente, en donde $\Delta\dot{n}_1 = \dot{n}_1^{in} + \dot{n}_1^{Out1} + \dot{n}_1^{Out2}$, y de forma análoga $\Delta\dot{n}$.

$$\epsilon_{\%}^{n_1} = \frac{\Delta\dot{n}_1}{\dot{n}_1} \quad (2.40)$$

$$\epsilon_{\%}^n = \frac{\Delta\dot{n}}{\dot{n}} \quad (2.41)$$

$$\epsilon_{\%}^{\bar{C}} = \epsilon_{\%}^{n_1} + \epsilon_{\%}^n \quad (2.42)$$

El error absoluto de la concentración media se calcula como se expresa en la Ecuación 2.43.

$$\Delta\bar{C} = \epsilon_{\%} \cdot \bar{C} \quad (2.43)$$

Por último, se define a la cantidad "Corte" = θ , como el cociente entre el flujo másico en la salida 1 y el flujo másico de entrada, según la expresión 2.44

$$\theta = \frac{\dot{m}^{Out1}}{\dot{m}^{In}} \quad (2.44)$$

2.7. Criterios de convergencia

Los criterios de convergencia utilizados son:

1. valores de los residuos por debajo de un valor umbral
2. cierre de caudales másicos
3. cierre de caudales molares

Para el primer criterio, según el manual de *Fluent*, se recomienda tomar como criterio de convergencia, residuos menores a un umbral de 10^{-6} . Debido a que el modelo de difusión implementado es muy sensible a la convergencia fluidodinámica al momento

de cerrar los caudales molares, es necesario determinar un criterio de convergencia más riguroso. Es por esto que se determina como criterio de convergencia cuando los residuos alcanzan valores por debajo del umbral de 10^{-12} . Cuando se utilizan *Solvers* basados en densidad, como es el caso en este trabajo, los residuos R en *Fluent* se determinan mediante la Ecuación 2.45, en donde W representa cualquier variable a ser calculada por *Fluent* [7],

$$R(W) = \frac{R_t(W)}{\max(R_5)} \quad (2.45)$$

en donde $R_t(W)$ se calcula como el valor cuadrático medio de la tasa de variación de la variable W en todas las celdas de la malla, como se indica en la ecuación 2.46. Por otra parte, R_5 representa el conjunto de los residuos de las primeras cinco iteraciones calculados según 2.46, en donde la derivada $\frac{\partial W}{\partial t}$ representa la tasa de cambio de la variable W respecto de la iteración t .

$$R_t(W) = \sqrt{\sum \left(\frac{\partial W}{\partial t} \right)^2} \quad (2.46)$$

En la Figura 2.13, se muestra un ejemplo de la evolución de los residuos.

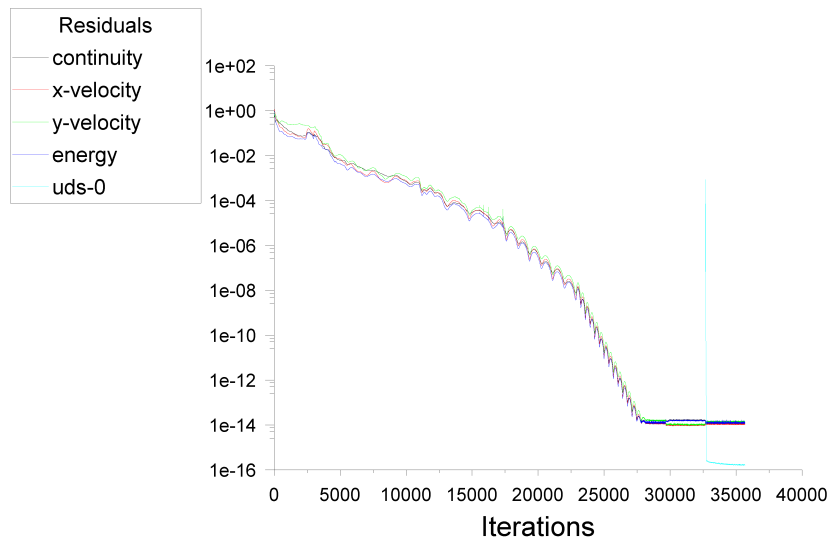


Figura 2.13: Gráfico de la evolución típica de los residuos.

Se puede observar de la Figura 2.13, que una vez alcanzada una buena convergencia de los residuos de las variables fluidodinámicas, se carga el código externo (UDS: User Defined Scalar), y se continúa con las iteraciones de cálculo hasta que los residuos del UDS también alcancen la convergencia.

El criterio de cierre de caudales másicos, consiste en calcular el caudal másico neto entre entrada y salida/s para un dado número de iteraciones, y que el resultado sea al menos cinco órdenes de magnitud por debajo del valor del mínimo de estos caudales

másicos.

Por otra parte, el criterio de cierre de caudales molares, es similar al de cierre de caudales másicos, pero no se logra que el orden de magnitud del resultado de la suma sea tan bajo. Por esto, se calcula el error como se describe en la sección 2.6 y se busca que sea del orden del 10%. Esto se debe a que el cálculo de los caudales molares se realiza mediante una función externa resolviendo una ecuación fuertemente no lineal e implícita, presentando un grado de convergencia diferente al del cálculo de la fluidodinámica.

Capítulo 3

Resultados y Discusión

“Quien no sabe lo que busca, no comprende lo que encuentra”

— Claude Bernard

3.1. Resultados fluidodinámicos

3.1.1. Simulaciones con condiciones del laboratorio

Se realizaron las simulaciones de dos casos de mediciones realizadas en el laboratorio del proyecto LASIE.

Las condiciones de dichas mediciones se presentan en la Tabla 3.1.

Mezcla	P_0 [mBar]	P_b [mBar]	\bar{X}_M
CO_2 2,5%-He	50,411	0,2585	9,3564
CO_2 2,5%-He	197,79	0,5821	12,3503

Tabla 3.1: Condiciones de las mediciones realizadas en el laboratorio del proyecto LASIE con una boquilla de diámetro $D = 0,3$ mm.

A partir de estos valores medidos de presiones de alta y de baja, y configuración de la posición del skimmer, se realizó la simulación del caso.

En las Figuras 3.1 y 3.2 se muestra el mapa del número de Mach obtenido para cada simulación.

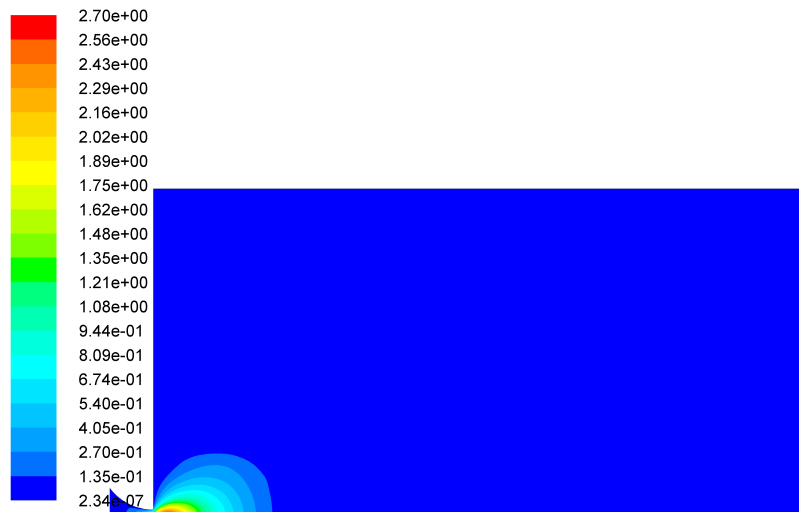


Figura 3.1: Mapa del número de Mach en la cámara de descarga para $P_0 = 50,411$ mBar.

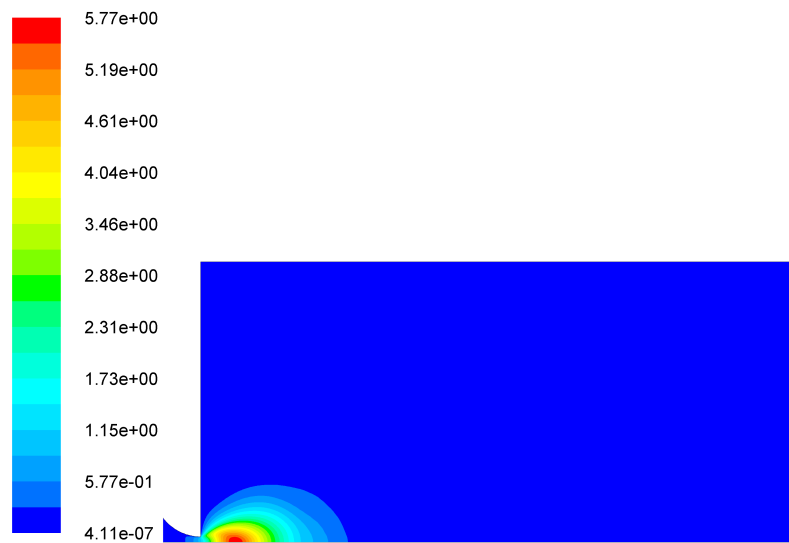


Figura 3.2: Mapa del número de Mach en la cámara de descarga para $P_0 = 197,79$ mBar.

Se puede observar que la geometría del flujo de las Figuras 3.1 y 3.2 no cumplen con la geometría característica de un flujo supersónico en expansión libre axi-simétrica como el descrito en la Figura 2.2.

Debido a esto, se analizó la evolución del número de Mach en el eje de simetría y se lo comparó con la curva del modelo semiempírico de Pauly. Esto se muestra en la Figura 3.3.

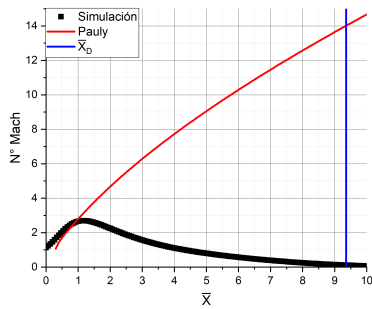
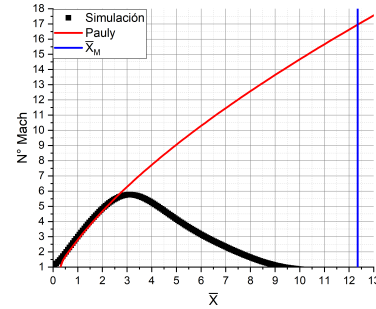
(a) $P_0 = 50,411$ mBar(b) $P_0 = 197,79$ mBar

Figura 3.3: Comparación entre la evolución del número de Mach obtenido de la simulación en negro y el descrito por el modelo de Pauly en la curva roja. La recta azul indica la posición axial teórica del disco de Mach.

Se puede observar que la evolución del número de Mach obtenido de las simulaciones se aparta de la curva del modelo de Pauly mucho antes de alcanzar la posición teórica del disco de Mach, la cual es la posición en donde se termina la condición cuasi-isoentrópica.

En la Figura 3.4 se muestra la evolución del número de Knudsen de ambos casos.

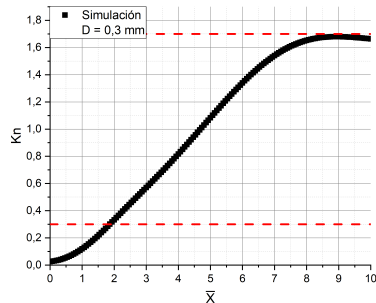
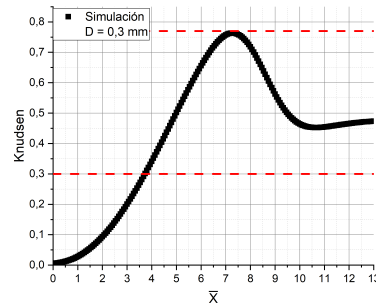
(a) $P_0 = 50,411$ mBar(b) $P_0 = 197,79$ mBar

Figura 3.4: Evolución del número de Knudsen obtenido de las simulaciones a lo largo del eje de simetría adimensional.

En las Figuras 3.4(a) y 3.4(b) se puede observar que el número de Knudsen para ambas simulaciones toma valores por encima de 0,3. Esto indica que los casos bajo estudio no cumplen con la validez de la hipótesis del continuo. El fenómeno físico que se da lugar en estos casos, queda fuera del rango de validez de las ecuaciones de Navier-Stokes, lo cual se refleja en el hecho de no poder reproducir con el cálculo la forma geométrica de las ondas de choque, y la evolución del número de Mach en el eje, y por lo tanto, los parámetros fluidodinámicos.

Cabe destacar que el software *Fluent* está configurado para realizar los cálculos a partir de las ecuaciones de Navier-Stokes, sin discriminar si estas son válidas o no en

el caso en estudio. Debido a esto, a pesar de que el número de Knudsen salga fuera del rango de validez de las ecuaciones de Navier-Stokes, el software continúa realizando el cálculo celda a celda de dichas ecuaciones, por lo que el resultado obtenido, no es una representación fiel del proceso físico que se da lugar en los experimentos analizados en el laboratorio.

Debido a esto, se procedió a diseñar los valores de las condiciones de contorno para los experimentos de laboratorio, en los cuales se cumpla con la hipótesis del continuo, y que los resultados obtenidos se puedan analizar mediante las ecuaciones de Navier-Stokes, para poder estudiar dicho proceso bajo esta teoría.

El hecho de poder calcular con buena precisión la fluidodinámica de un determinado caso, resulta de vital importancia dado que la herramienta computacional es la única disponible hasta el momento para saber lo que ocurre en la cámara de separación. Por lo tanto, constituye una herramienta muy importante para la realimentación con el laboratorio, orientada fundamentalmente a diseños futuros.

3.1.2. Diseño de las condiciones para los experimentos

Además de las simulaciones realizadas con las condiciones de contorno de los experimentos, también se hicieron simulaciones con otras condiciones en las que se buscó analizar la difusión para la separación de especies. Sin embargo, dichos resultados difusivos no coincidían con las mediciones experimentales, debido a que en las simulaciones no se obtenía la geometría característica del Barril de Mach, por lo que se buscó la explicación desde la parte fluidodinámica, haciendo foco en la validez de la hipótesis del continuo.

Para que los resultados obtenidos en el laboratorio del proyecto LASIE puedan ser analizados bajo la hipótesis del continuo, y por ende, mediante las ecuaciones de Navier-Stokes, se planteó determinar las presiones de baja mínima, para la cual se cumple dicha hipótesis para distintas presiones de alta con las que puedan realizarse experimentos en el laboratorio según las capacidades instaladas en el mismo.

Esto se realizó tomando como criterio que el número de Knudsen máximo alcanzado en la zona más crítica del flujo (inmediatamente aguas arriba del disco de Mach), sea 0,3. Como el flujo se expande de forma cuasi-isoentrópica en la zona de silencio, las peores condiciones del mismo para la validez de las ecuaciones de Navier-Stokes, se dan cuando este alcanza los valores mínimos de densidad. Así, se busca tener la condición de $Kn \leq 0,3$ en todo el campo del flujo.

Se seleccionaron distintos valores para la presión de alta y de diámetros de garganta, de acuerdo con las capacidades disponibles en el laboratorio, a partir de los cuales se calcularon los valores mínimos para la presión de baja correspondiente para obtener un número de Knudsen máximo de 0,3. Esto se realizó utilizando las ecuaciones 2.12,

2.10, 2.7, y 2.3. Con el número de Knudsen límite determinado, se calculó el valor de la posición en el eje adimensional en el que se alcanza dicho valor. Luego, se estableció que dicha posición sea la del Disco de Mach, y mediante la ecuación 2.3 se obtuvo el valor de la presión mínima que debe establecerse en la cámara de descarga para que se cumpla la hipótesis del continuo.

En la Figura 3.5, se muestran las presiones de alta seleccionadas, en función de la posición axial adimensional del disco de Mach en la que se obtiene $Kn = 0,3$, para distintos diámetros de boquilla considerando la expansión cuasi-isoentrópica.

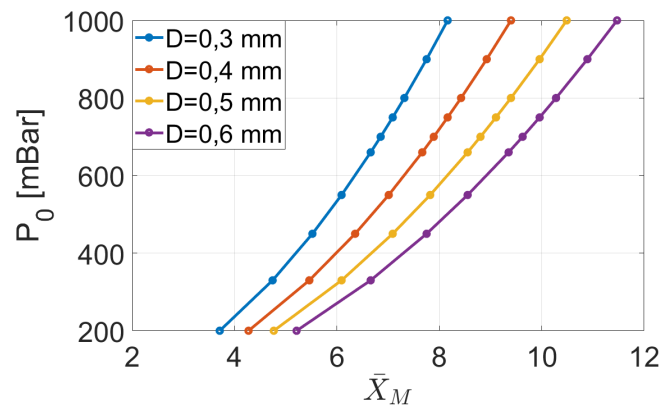


Figura 3.5: Presiones de alta en función de la posición del disco de Mach en el eje adimensional para diferentes diámetros de boquilla.

Se puede observar de la Figura 3.5 que a medida que se incrementa el diámetro de la boquilla, la posición teórica del disco de Mach se desplaza alejándose de la misma.

En la Figura 3.6 se muestran las presiones de baja obtenidas para las posiciones del disco de Mach obtenidas a partir de la Figura 3.5.

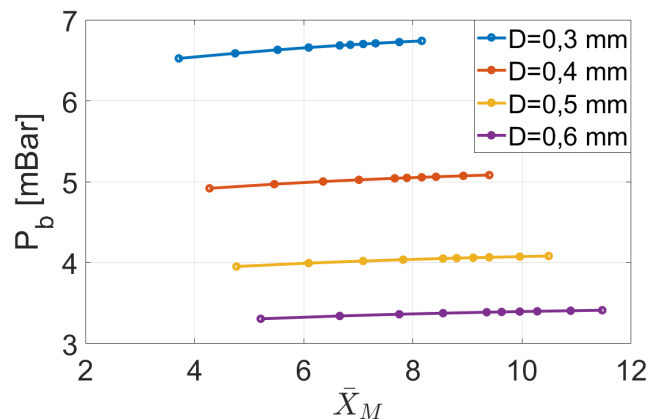


Figura 3.6: Presiones de baja calculadas en función de la posición del disco de Mach en el eje adimensional para diferentes diámetros de boquilla.

De la Figura 3.6 se puede observar que a medida que el diámetro de la boquilla aumenta, el valor mínimo de la presión de baja es cada vez menor para una dada

presión de alta y posición del disco de Mach.

En el gráfico de la Figura 3.7 se resumen los dos gráficos anteriores para poder determinar la presión de baja mínima que se debería configurar en el experimento dada una presión de alta, para garantizar la validez de la hipótesis del continuo.

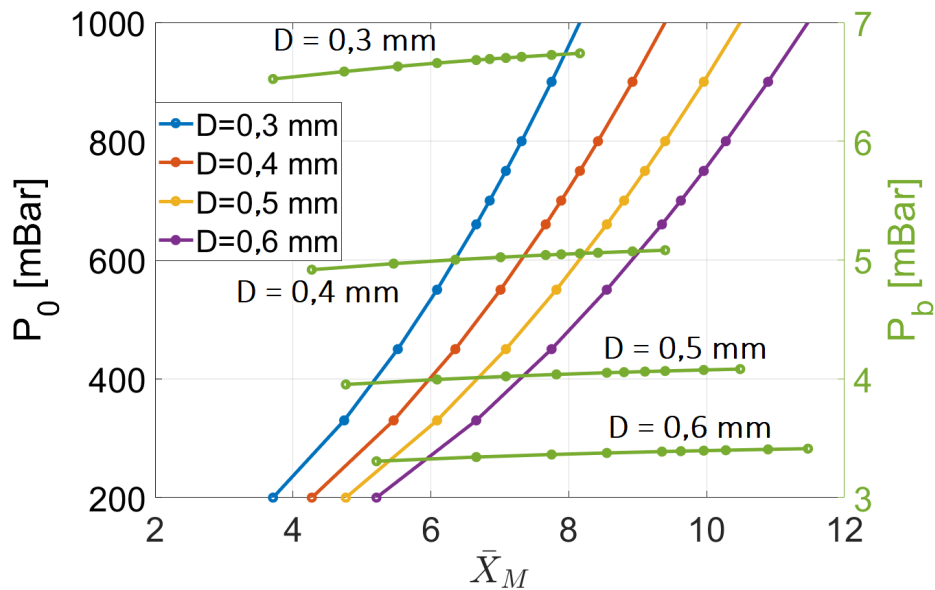


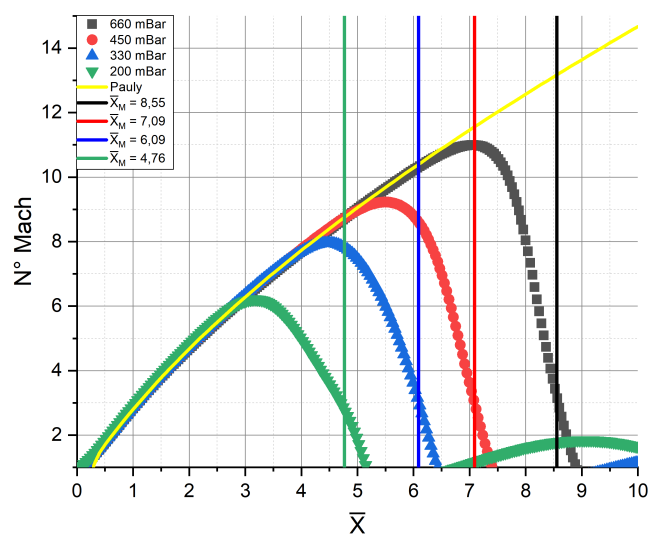
Figura 3.7: Presiones de alta y de baja calculadas en función de la posición del disco de Mach en el eje adimensional para diferentes diámetros de boquilla.

A partir de los datos obtenidos mostrados en la Figura 3.7, se realizaron simulaciones fluidodinámicas para una boquilla de diámetro 0,5 mm. La configuración de presiones que se utilizaron se muestran en la Tabla 3.2.

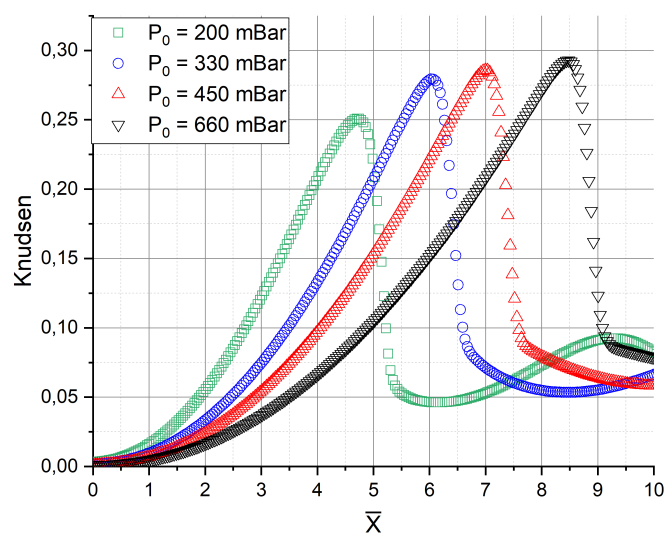
P_0 [mBar]	200	330	450	660
P_b [mBar]	3,9526	3,9947	4,0206	4,0514
\bar{X}_M	4,7659	6,0896	7,0882	8,5515

Tabla 3.2: Configuraciones de presiones utilizadas para las simulaciones.

En la Figura 3.8 se muestran la evolución del número de Mach y del número de Knudsen en el eje de simetría obtenidas de las simulaciones.



(a) Número de Mach



(b) Número de Knudsen

Figura 3.8: Evolución de los números de Mach y de Knudsen a lo largo del eje adimensional de simetría.

Las rectas verticales de la Figura 3.8(a) representan las posiciones teóricas del disco de Mach correspondientes a cada una de las configuraciones de presiones. Se puede observar que en los cuatro casos, la evolución del número de Mach coincide con la curva del modelo de Pauly representada en amarillo. Sin embargo, se observa que mientras menor es la relación de presiones, la evolución del número de Mach se aparta de forma más temprana del modelo de Pauly; mientras que a mayor relación

de presiones se aparta en una posición más cercana al disco de Mach, el cual es una onda de choque plana estacionaria que tiene un espesor no nulo, como se puede ver en la Figura 3.8(b).

Por otra parte, se puede observar de la Figura 3.8(b), que el número de Knudsen se mantiene por debajo del valor de diseño 0,3 en todo el campo del flujo, por lo que se considera que estos casos cumplen con la validez de la hipótesis del continuo.

Cabe destacar, que las presiones de baja calculadas, son las presiones mínimas que se deben considerar para la validez del continuo, por lo que sería mejor utilizar presiones por encima de los valores calculados.

En la Figura 3.9 se muestran los mapas del número de Mach obtenidos para las cuatro simulaciones realizadas.

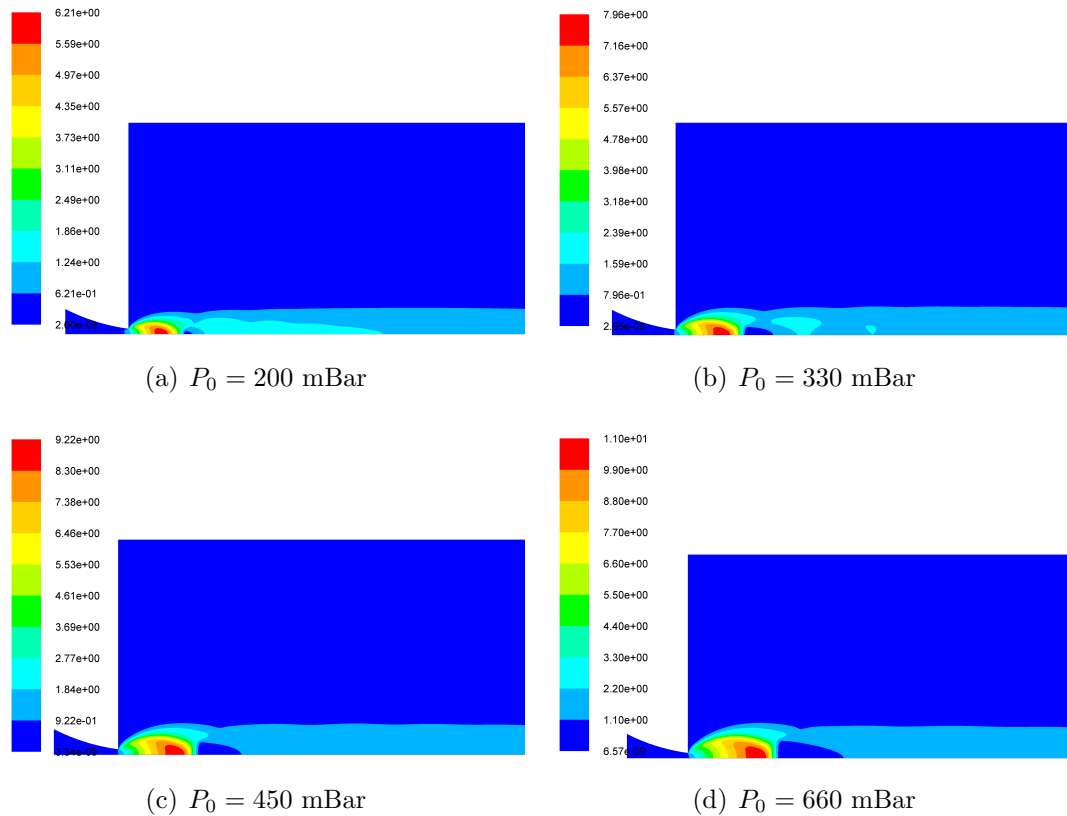


Figura 3.9: Mapas del número de Mach obtenidos para las cuatro simulaciones realizadas.

Se puede observar de la Figura 3.9, que a mayor relación de presiones, mayores son las dimensiones del barril de Mach, como es de esperarse según las Ecuaciones 2.3, 2.4, 2.5, 2.6.

En la Figura 3.10, se muestran los mapas de la temperatura en Kelvin obtenidos para las cuatro simulaciones realizadas.

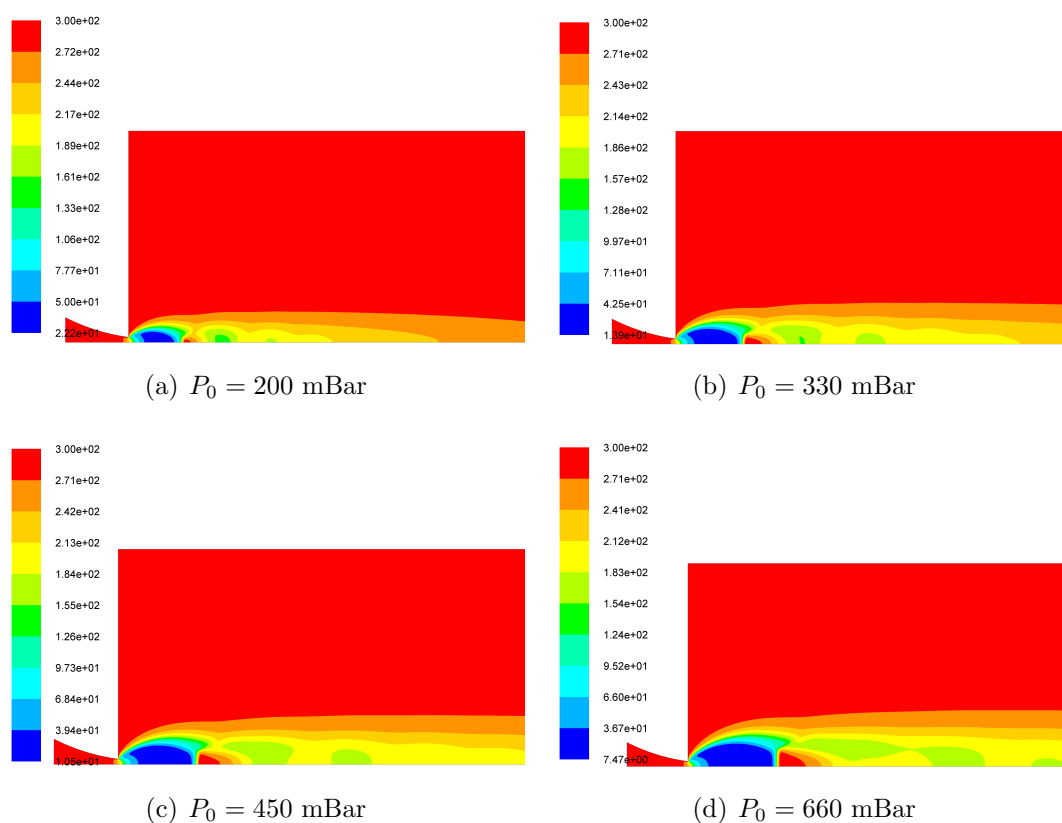


Figura 3.10: Mapas de la temperatura en Kelvin obtenidos para las cuatro simulaciones realizadas.

Se puede observar de la Figura 3.10, que la zona que alcanza los menores valores de temperatura se encuentran en el núcleo supersónico. Es por esto que el barril de Mach sería la zona propicia para provocar la clusterización de las moléculas del gas, y por lo tanto, para realizar la iluminación láser para aumentar la efectividad de la separación de especies por medio del aumento de la diferencia de masas de las mismas.

3.2. Resultados difusivos

3.2.1. Análisis de la termofóresis

En esta sección se muestran los resultados obtenidos del análisis de la influencia del factor de difusión térmica α_T en el modelo de difusión binaria. Las mezclas de gases que se utilizaron para este análisis fueron:

- Ne^{22} 9,25 %- Ne^{20}
- SF_6 5 %- He

3.2.2. Gas puro $Ne^{22}-Ne^{20}$

Se implementó el cálculo del α_T en el código externo en C, según las rectas de la Figura 2.12 para calcular los perfiles de concentración utilizando tres valores del α_T , como se muestra a continuación:

- $\alpha_T = 0,01$
- $\alpha_T = -0,01$
- $\alpha_T = m \cdot T + b$ (variación lineal con la temperatura) 2.6

Las presiones de alta y de baja determinadas para este análisis fueron de $P_0 = 1200$ mBar y $P_b = 4$ mBar, con la idea de obtener los mismos resultados fluidodinámicos obtenidos en [6].

En la Figura 3.11 se muestran los mapas del número de Mach y de concentración, obtenidos de las simulaciones fluidodinámicas y de difusión, respectivamente.

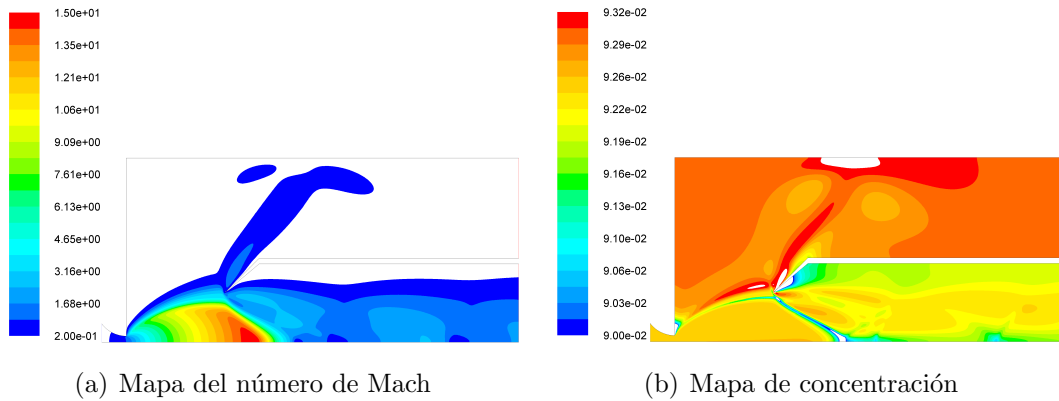


Figura 3.11: Mapas del número de Mach y de concentración obtenidos de las simulaciones fluidodinámicas y de difusión, respectivamente.

Se puede observar de la Figura 3.11(a), que la introducción del skimmer induce una variación de la geometría típica de un flujo en expansión libre supersónica como el mostrado en la Figura 2.2.

Por otra parte, se puede observar de la Figura 3.11(b), que en la zona en las cuales se encuentran las ondas de choque, se produce una variación en la concentración molar.

En la Figura 3.12 se muestran los perfiles de concentración a lo largo del radio de la cámara, obtenidos para una concentración molar natural de (9,25 % del isótopo Ne^{22}), evaluada en la posición axial de la punta del skimmer.

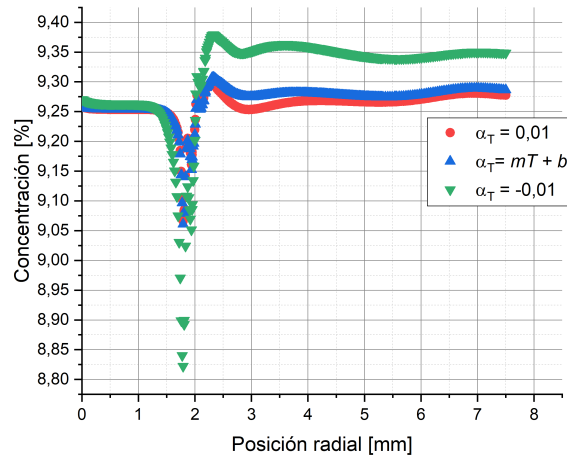


Figura 3.12: Perfiles de concentración del Ne^{22} con $\alpha_T = 0,01$, $\alpha_T = -0,01$, y la variación lineal $\alpha_T = m \cdot T + b$.

En la Figura 3.13 se muestran los perfiles de temperatura y de α_T en función de la posición radial evaluado en la posición axial de la punta del skimmer $X_s = 4$ mm.

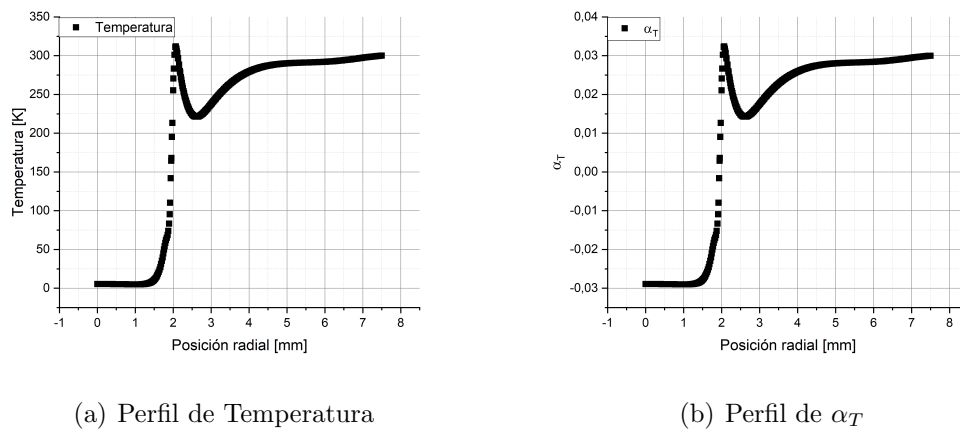


Figura 3.13: Perfiles de temperatura y de α_T a lo largo del radio para $X_s = 4$ mm y $R_s = 2$ mm.

Se puede observar de la Figura 3.13 que la evolución del α_T es proporcional a la evolución de la temperatura a lo largo de la dirección radial, como era de esperarse debido a su dependencia lineal propuesta.

También cabe destacar, que los valores extremos que toma α_T son $\pm 0,03$. El cambio de signo que sufre el α_T a medida que varía con la temperatura, invierte la dirección de la difusión por gradiente de temperatura, algo que con valores constantes no se capta. A pesar de esto, se observa que el perfil de concentración obtenido con la propuesta de la variación lineal del α_T se encuentra entremedio de los perfiles de concentración para valores constantes de $\alpha_T = \pm 0,01$.

Según la Figura 3.13(b), el α_T posee valores del orden de $-0,03$ antes de la posición radial de la punta del skimmer. Sin analizar otros parámetros que influyen en la difusión total, esto indicaría que debería darse lugar a una mayor difusión antes del skimmer, es decir, en el núcleo supersónico. Sin embargo, esto no sucede debido a que el gradiente de temperatura en dicha zona es prácticamente nulo, ya que la temperatura se mantiene aproximadamente uniforme en cada sección radial. Según la ecuación 2.27, el término de la termofóresis depende directamente del gradiente de temperatura, por lo que al mantenerse aproximadamente uniforme radialmente, no se da lugar a una gran difusión por temperatura.

Por otra parte, en los lugares en donde se tiene mayores gradientes de temperatura, es decir, en la proximidad de la onda de choque oblicua, el α_T toma valores cercanos a cero, por lo que en este caso tampoco se ve favorecida la difusión por temperatura.

En la Figura 3.14 se muestran los perfiles del gradiente de temperatura en las direcciones axial x y radial r divididos por la temperatura y multiplicados por $\alpha_T \cdot C_1 C_2$ a lo largo de la posición radial para $X_s = 4$ mm.

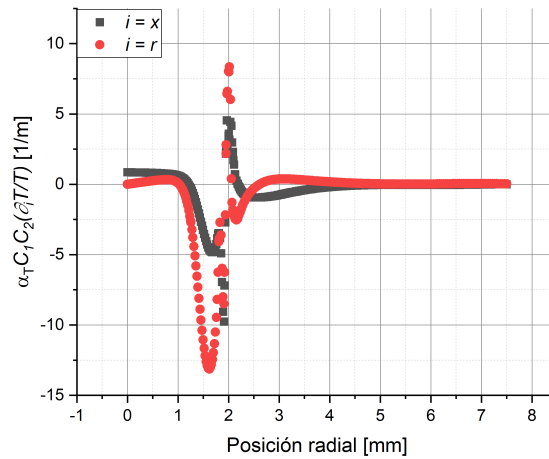


Figura 3.14: Perfiles del gradiente de temperatura en las direcciones axial y radial a lo largo de la posición radial para $X_s = 4$ mm.

Según la Figura 3.14, se puede observar que tanto el factor $\alpha_T \cdot C_1 C_2 \frac{1}{T} \frac{\partial T}{\partial x} = K_T \frac{1}{T} \frac{\partial T}{\partial x}$, como $\alpha_T \cdot C_1 C_2 \frac{1}{T} \frac{\partial T}{\partial y} = K_T \frac{1}{T} \frac{\partial T}{\partial y}$ se mantienen prácticamente nulos a lo largo de la posición radial evaluada, con un gran salto en la posición radial R_s de la punta del skimmer, haciendo $K_T \cdot \frac{\nabla T}{T} \approx 0$.

3.2.3. Mezcla SF_6 - He

Se implementó el cálculo del α_T en el código externo en C, según las rectas de la Figura 2.12 para calcular los perfiles de concentración utilizando tres valores del α_T , como se muestra a continuación:

- $\alpha_T = 0,01$
- $\alpha_T = -0,01$
- $\alpha_T = m \cdot T + b$ (variación lineal con la temperatura) 2.6

Al igual que en 3.2.2, las presiones de alta y de baja determinadas para este análisis fueron de $P_0 = 1200$ mBar y $P_b = 4$ mBar, con la idea de obtener los mismos resultados fluidodinámicos obtenidos en [6].

En la Figura 3.15, se muestran los mapas del número de Mach y de concentración obtenidos de las simulaciones fluidodinámicas y de difusión, respectivamente.

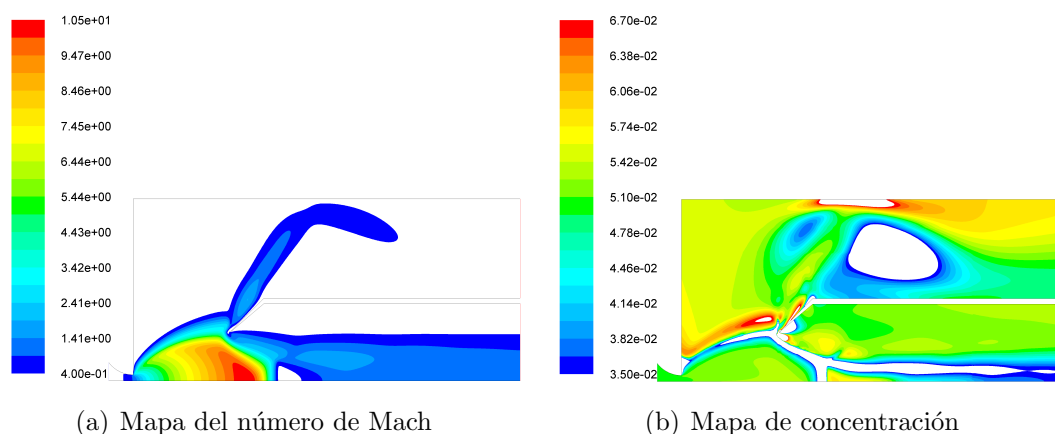
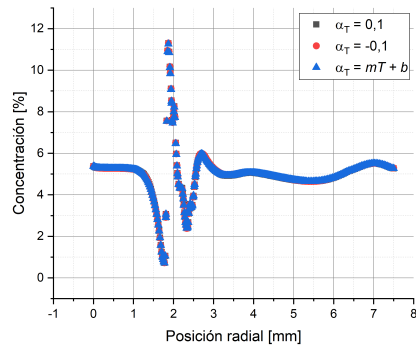


Figura 3.15: Mapas del número de Mach y de concentración obtenidos de las simulaciones fluidodinámicas y de difusión, respectivamente.

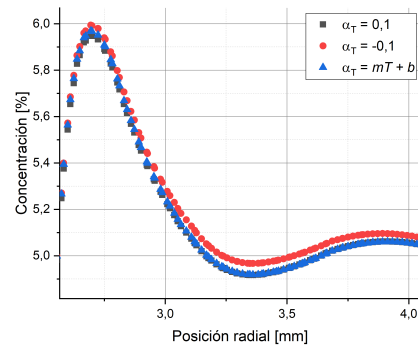
Nuevamente, como se mencionó en la sección 3.2.2, se puede observar de la Figura 3.11(a), que la introducción del skimmer induce una variación de la geometría típica de un flujo en expansión libre supersónica como el mostrado en la Figura 2.2.

Asimismo, como en lo analizado en 3.2.2, se puede observar de la Figura 3.11(b), que en la zona en las cuales se encuentran las ondas de choque, se produce una variación en la concentración molar.

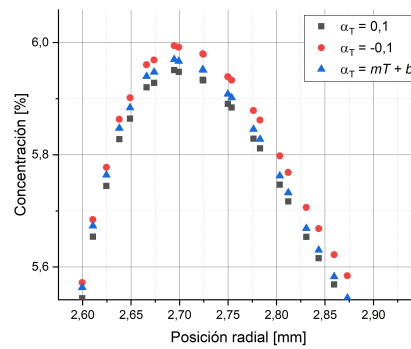
En la Figura 3.16 se muestran los perfiles de concentración a lo largo del radio de la cámara, obtenidos para una concentración molar inicial de 9,25 %, evaluada en la posición axial de la punta del skimmer.



(a) Perfiles de concentración



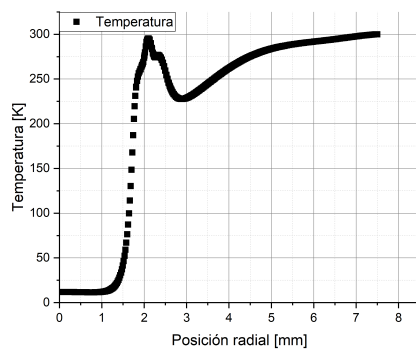
(b) Ampliación de los perfiles de concentración



(c) Ampliación de los perfiles de concentración

Figura 3.16: Perfiles de concentración del SF_6 a lo largo de la posición radial para $X_s = 4$ mm.

En la Figura 3.17 se muestran los perfiles de temperatura y de α_T en función de la posición radial evaluado en la posición axial de la punta del skimmer $X_s = 4$ mm.



(a) Perfil de Temperatura

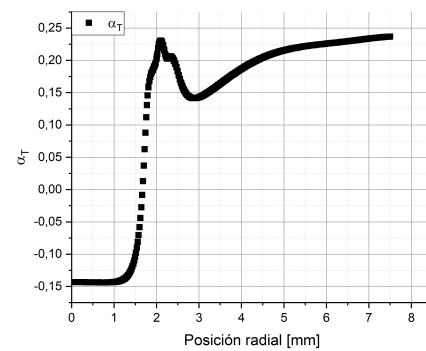
(b) Perfil de α_T

Figura 3.17: Perfiles de temperatura y de α_T a lo largo del radio para $X_s = 4$ mm y $R_s = 2$ mm.

Como era de esperarse, el perfil de α_T es proporcional al perfil de temperatura, como puede observarse de la Figura 3.17.

En la Figura 3.18 se muestran los perfiles del gradiente de temperatura en las direcciones axial x y radial r divididos por la temperatura y multiplicados por $\alpha_T \cdot C_1 C_2$ a lo largo de la posición radial para $X_s = 4$ mm.

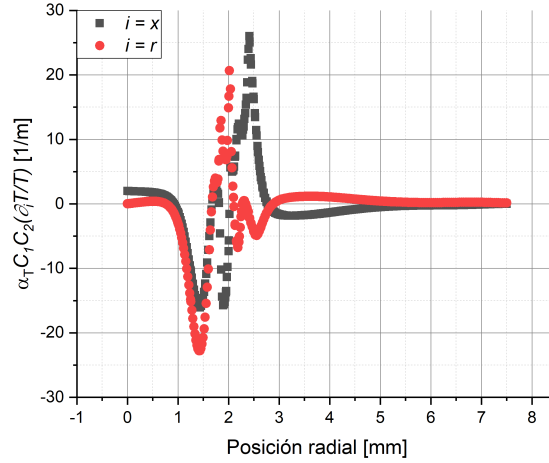


Figura 3.18: Perfiles del gradiente de temperatura en las direcciones axial y radial a lo largo de la posición radial para $X_s = 4$ mm.

3.3. Análisis de la posición del skimmer

En esta sección se presenta el trabajo en el que se analizó la variación en la concentración a la salida de la cámara de descarga en función de la posición axial de la punta del skimmer. Para esto, se realizaron simulaciones de una mezcla de CO_2 - He , como la utilizada en la sección 3.1.2, y se implementó el modelo de variación lineal del factor de difusión térmica α_T como se presentó en la sección 2.5.1. Se generaron cada una de las geometrías con skimmer, variando la posición axial de la punta del mismo, y realizando el correspondiente mallado de cada una de las mismas. En la Tabla 3.3 se presentan las distintas posiciones del skimmer analizadas, para una boquilla de diámetro $D = 0,5$ mm.

R_s [mm]	X_s [mm]				
1,5	2	3	4	5	
1,8	2	3	4	5	6

Tabla 3.3: Posiciones radial y axial de la punta del skimmer analizadas.

Primero, se corrió la fluidodinámica hasta obtener una buena convergencia de la misma para cada una de las posiciones.

La configuración de presiones utilizadas, fue de $P_0 = 1000$ mBar y $P_b = 4$ mBar, obteniendo una relación de presiones de $\frac{P_0}{P_b} = 250$. Esta configuración, fue seleccionada a partir del análisis de diseño realizado en la sección 3.1.2. A pesar de que la presión de baja mínima calculada para que se cumpla la validez de la hipótesis del continuo para una presión de alta de $P_0 = 1000$ mBar, fue de 4,082184 mBar, se decidió utilizar una presión de $P_b = 4$ mBar para maximizar la relación de presiones, manteniendo un valor cercano al de diseño. Debido a que la diferencia es de un 2,01 % respecto del valor de diseño, se considera que se cumple la hipótesis del continuo salvo en una pequeña zona crítica del flujo, es decir, cerca de la onda de choque normal.

Se realizó el cálculo de la concentración media en la salida 1, como se detalla en la sección 2.6.

En la Figura 3.19, se muestra la concentración media en la salida 1, en función de la posición axial de la punta del skimmer, para un radio de skimmer de $R_s = 1,5$ mm.

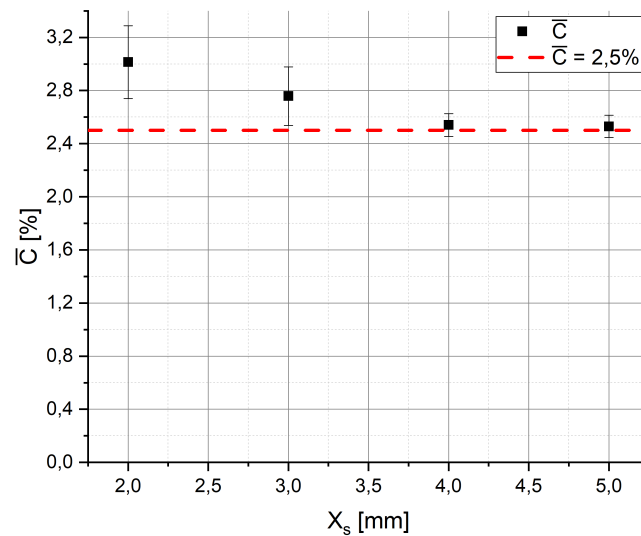


Figura 3.19: Concentración media en la salida 1 en función de la posición axial del skimmer X_s para $R_s = 1,5$ mm.

Se puede observar de la Figura 3.19, que para la primera posición axial analizada, la concentración media en la salida 1 es de $(3,01 \pm 0,27)$ %, y luego decae a valores cercanos a los de la concentración de entrada.

Esto se debe a que a medida que el skimmer se aleja de la boquilla, el mismo ingresa dentro del núcleo supersónico debido a la curvatura del mismo. De esta forma, al no cortar la punta del skimmer a la onda de choque en las posiciones más alejadas de la boquilla, no se genera enriquecimiento y la concentración en la rama externa cae al valor de referencia. Esto se muestra en la Figura 3.20.

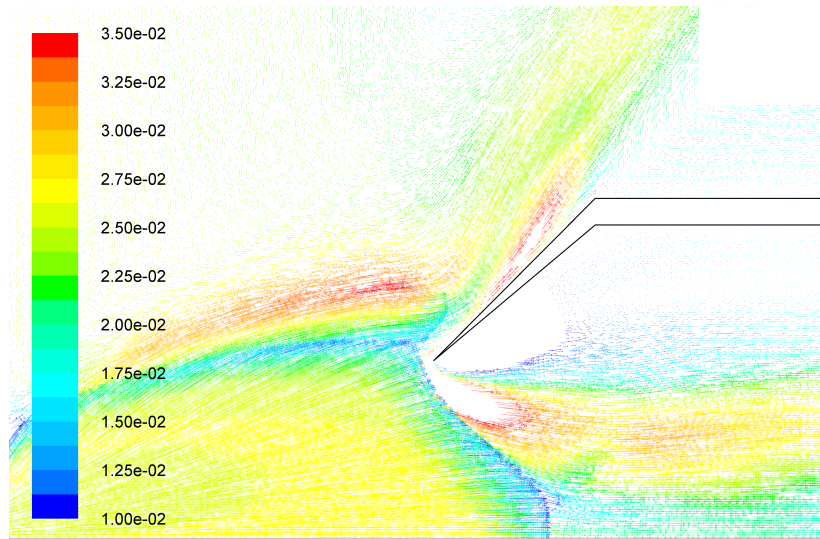


Figura 3.20: Mapa de vectores de velocidad coloreados por escala de concentración.

Se puede observar de la Figura 3.20 que la punta del skimmer para el caso $X_s = 4$ mm y $R_s = 1,5$ mm, se encuentra ubicado dentro del barril de Mach. Por más que ocurra el proceso de difusión a lo largo de la onda de choque oblicua, debido a que el skimmer separa el flujo dentro del barril de Mach, éste se vuelve a mezclar en la salida 1.

Debido a esto, se decidió realizar una segunda corrida de simulaciones, elevando la punta del skimmer. Según la relación 2.6 el diámetro máximo del barril de Mach varía entre un 19 % y un 26 % por encima del valor del diámetro del disco de Mach, el cual tiene un valor teórico de 2,5 mm según 2.5. Si se considera que el diámetro máximo del barril de Mach es un 26 % mayor que el del disco de Mach, se obtiene un valor de $D_B = 3,2035$ mm, con lo que el skimmer se debería unificar a un radio $R_s = 1,6018$ mm. Debido a que las ondas de choque poseen un espesor, se tomó un valor de $R_s = 1,8$ para la posición radial de la punta del skimmer.

Se generaron las geometrías correspondientes con sus respectivos mallados, y se realizaron las simulaciones fluidodinámicas para luego hacer las simulaciones de difusión.

En la Figura 3.21, se muestran los mapas de Mach, para las distintas posiciones mencionadas anteriormente para $R_s = 1,8$ mm.

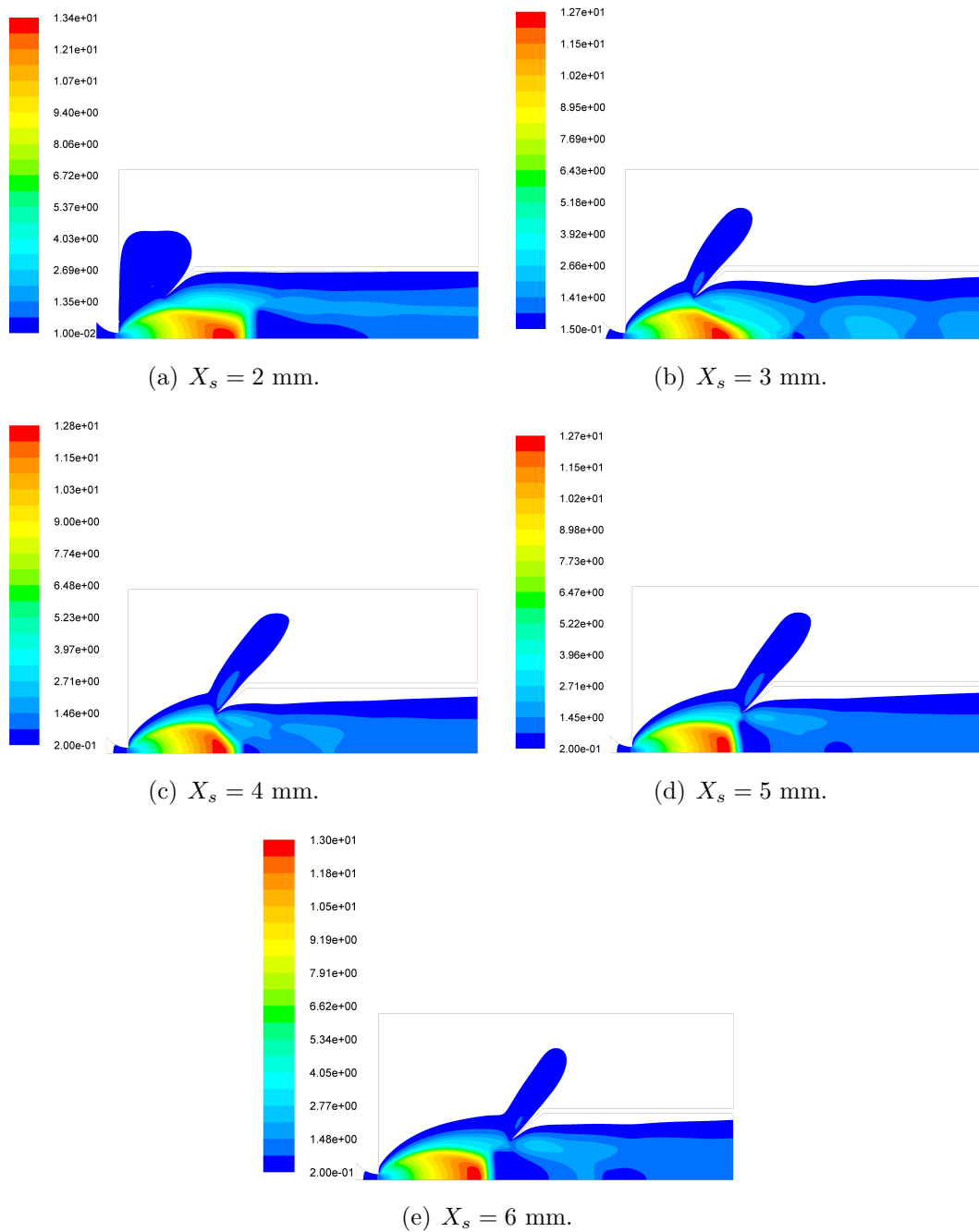


Figura 3.21: Mapas del número de Mach para las distintas posiciones axiales del skimmer con un radio $R_s = 1,8$ mm.

Se puede observar de la Figura 3.21, cómo la influencia del skimmer modifica el barril en cada una de las posiciones analizadas. Cabe destacar, que se observa que a medida que se varía la posición axial de la punta del skimmer, esta misma va cortando al barril de Mach en distintas secciones.

En la Figura 3.22, se muestran los mapas de concentración para las distintas posiciones analizadas.

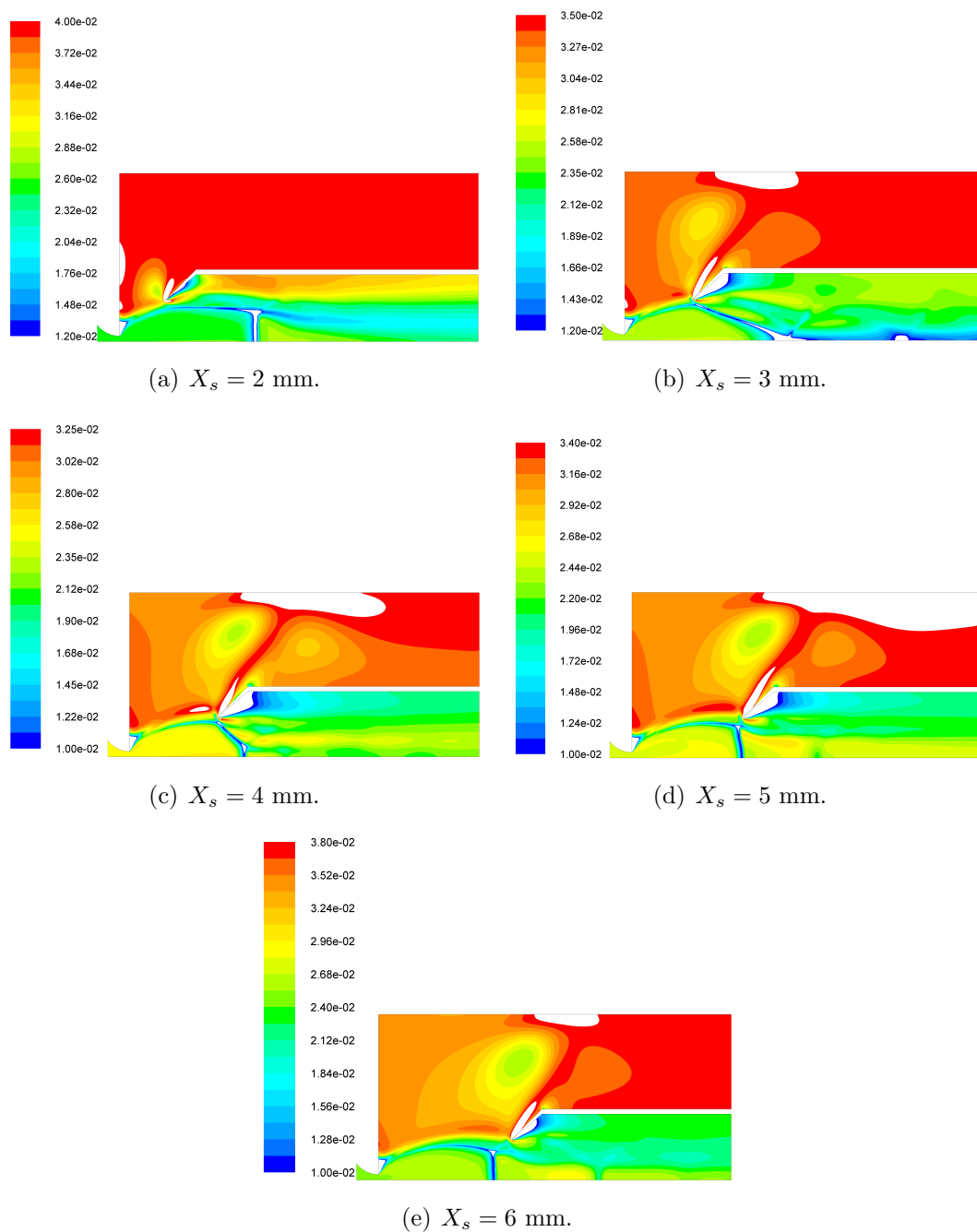


Figura 3.22: Mapas de concentración para las distintas posiciones axiales del skimmer con un radio $R_s = 1,8$ mm.

Se puede observar de la Figura 3.22 cómo se da lugar al proceso de difusión en las zonas en las que se encuentran las ondas de choque, y como luego de que el flujo las atraviese, se homogeneiza.

Por último, en la Figura 3.23 se muestran los mapas del número de Knudsen para cada una de las posiciones bajo estudio.

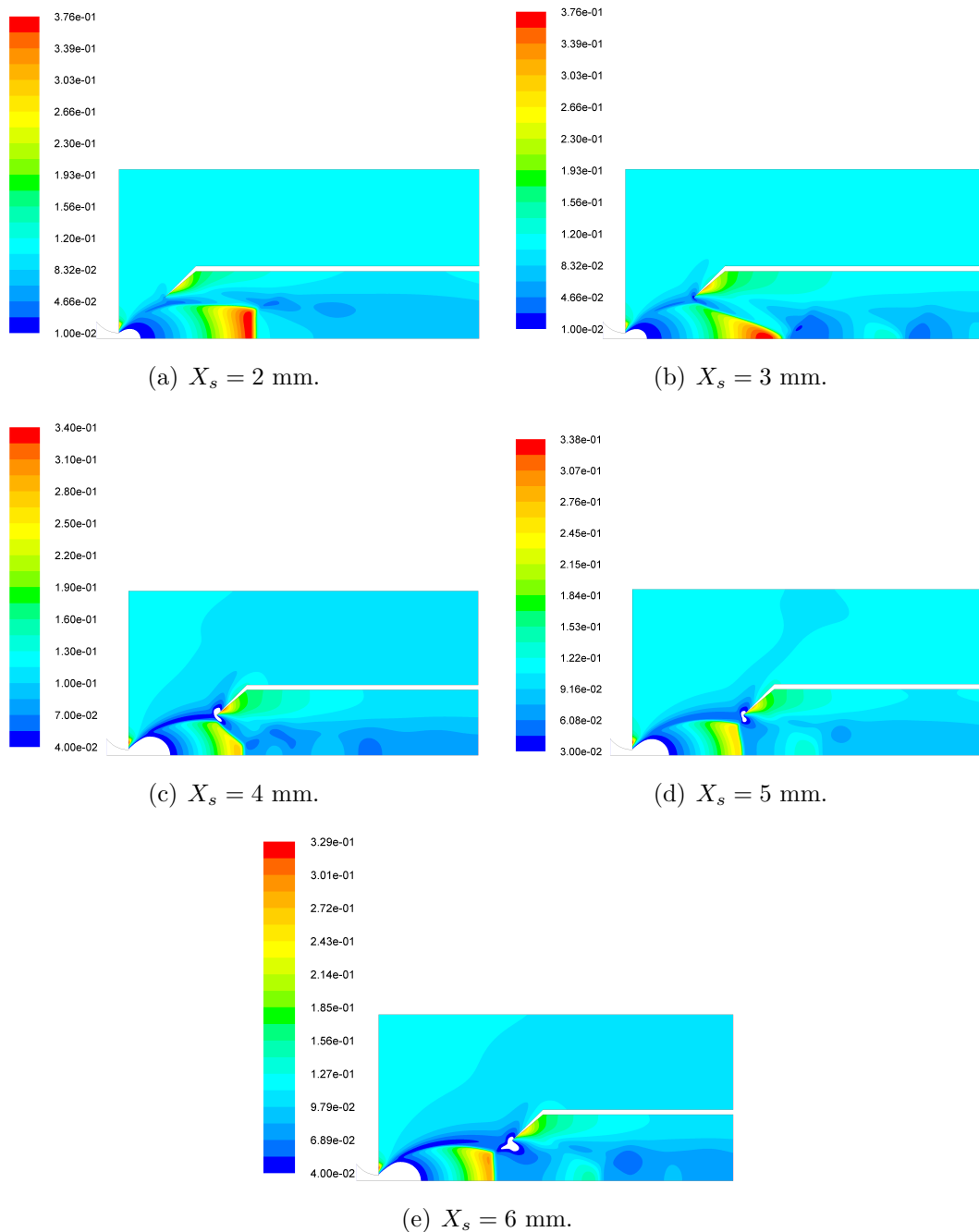


Figura 3.23: Mapas del número de Knudsen para las distintas posiciones axiales del skimmer con un radio $R_s = 1,8$ mm.

Se puede observar de la Figura 3.23, que el mayor número de Knudsen alcanzado en todo el campo del flujo es de $Kn = 0,376$, un 25,33% mayor al valor establecido como límite para la validez del continuo. A pesar de esto, dicho valor para el número de Knudsen se alcanza en las zonas "aguas abajo" de la punta del skimmer para las posiciones $X_s \leq 3$ mm. Debido a que en la posición de la punta del skimmer se da la separación del flujo y se cumple $Kn \leq 0,3$, el hecho de que se alcance un $Kn \geq 0,3$ "aguas abajo" no es influyente en el cálculo de las concentraciones medias en cada rama, ya que para el cálculo de estas, si se cumple el continuo antes que se de la separación

de caudales.

Para las posiciones $X_s = 4$ mm, $X_s = 5$ mm y $X_s = 6$ mm se puede observar de la Figura 3.23(d), que el número de Knudsen se encuentra cercano al valor límite en la zona del corte del skimmer.

En la Figura 3.24 se muestran ampliaciones de los mapas del número de Knudsen para las posiciones $X_s = 4$ mm, $X_s = 5$ mm y $X_s = 6$ mm.

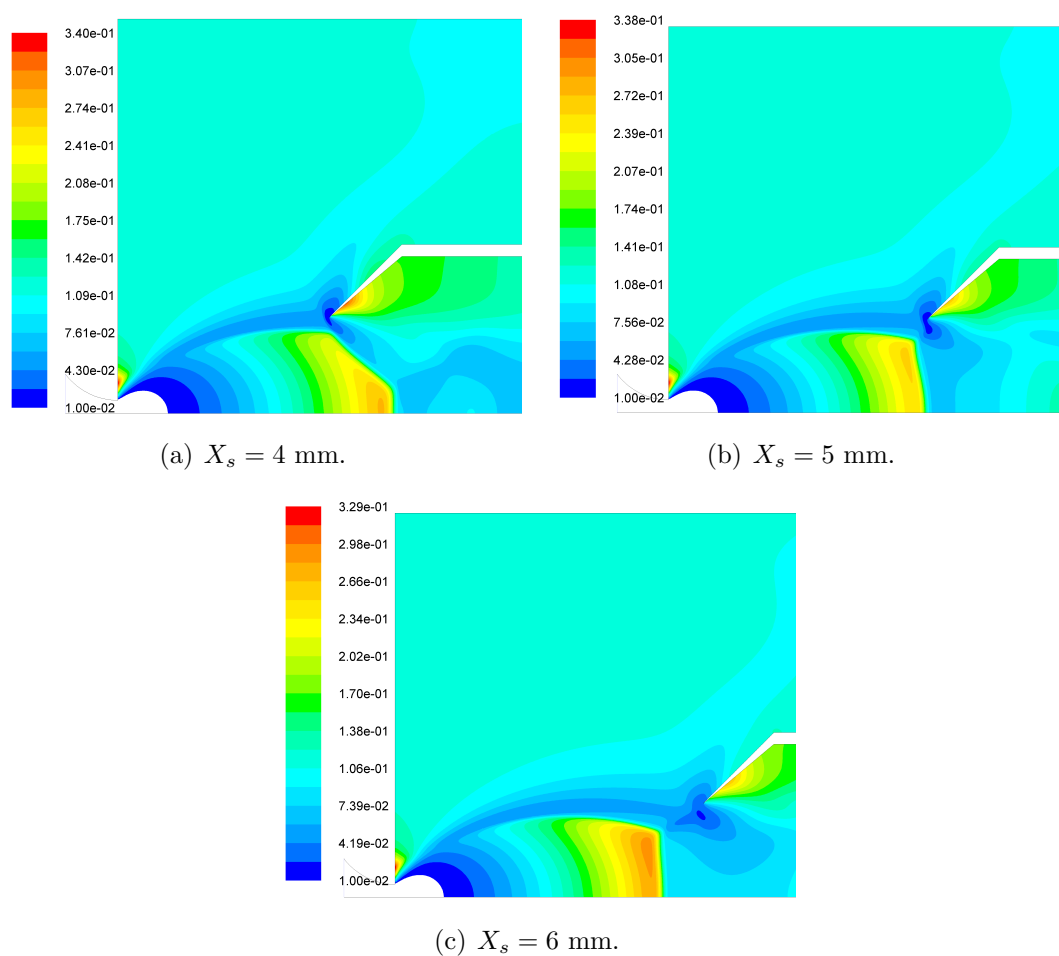


Figura 3.24: Ampliaciones de los mapas del número de Knudsen.

Se puede observar que en la zona inmediatamente anterior a alcanzar la onda de choque normal, el número de Knudsen alcanza un valor menor a 0,3, y si bien es cercano, se cumple la hipótesis del continuo.

Se realizó el cálculo de la concentración media en la salida 1 según se detalla en la sección 2.6, y se obtuvo el valor de la misma en función de la posición axial X_s de la punta del skimmer, como se muestra en la Figura 3.25.

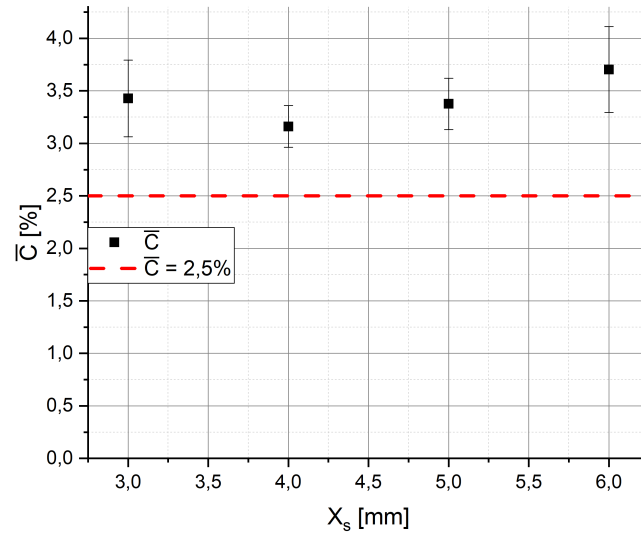


Figura 3.25: Concentración media en la salida 1 en función de la posición axial del skimmer X_s para $R_s = 1,8$ mm.

El valor de la concentración media obtenida para la posición $X_s = 2$ mm fue de $\bar{C}|_{X_s=2\text{ mm}} = (3,9257 \pm 11,35)\%$, y no se incluyó en el gráfico debido al gran error porcentual que presenta ($\epsilon\% = 189,02\%$).

El gran error que presenta el cálculo de $\bar{C}|_{X_s=2\text{ mm}}$, se debe al corte que se obtiene en esta posición. El caudal másico que circula por la salida 1 para $X_s = 2$ mm, es de un 1,22% del caudal másico que ingresa, mientras que el caudal molar que fluye por la salida 1 es un 1,11% del caudal molar que ingresa por la superficie de entrada. Por cómo se determina el error según se detalla en la sección 2.6, se obtiene un gran error en la determinación de la concentración.

Por otra parte, se observa de la Figura 3.25, que para la posición $X_s = 4$ mm, la concentración a la salida 1, disminuye respecto a los puntos adyacentes. Esto marca un comportamiento diferente a lo analizado en trabajos previos según [11]. Esto se puede deber a que la ubicación de la punta del skimmer para la posición mencionada, no se encuentra cortando de forma óptima al flujo. Esto se muestra en la Figura 3.26.

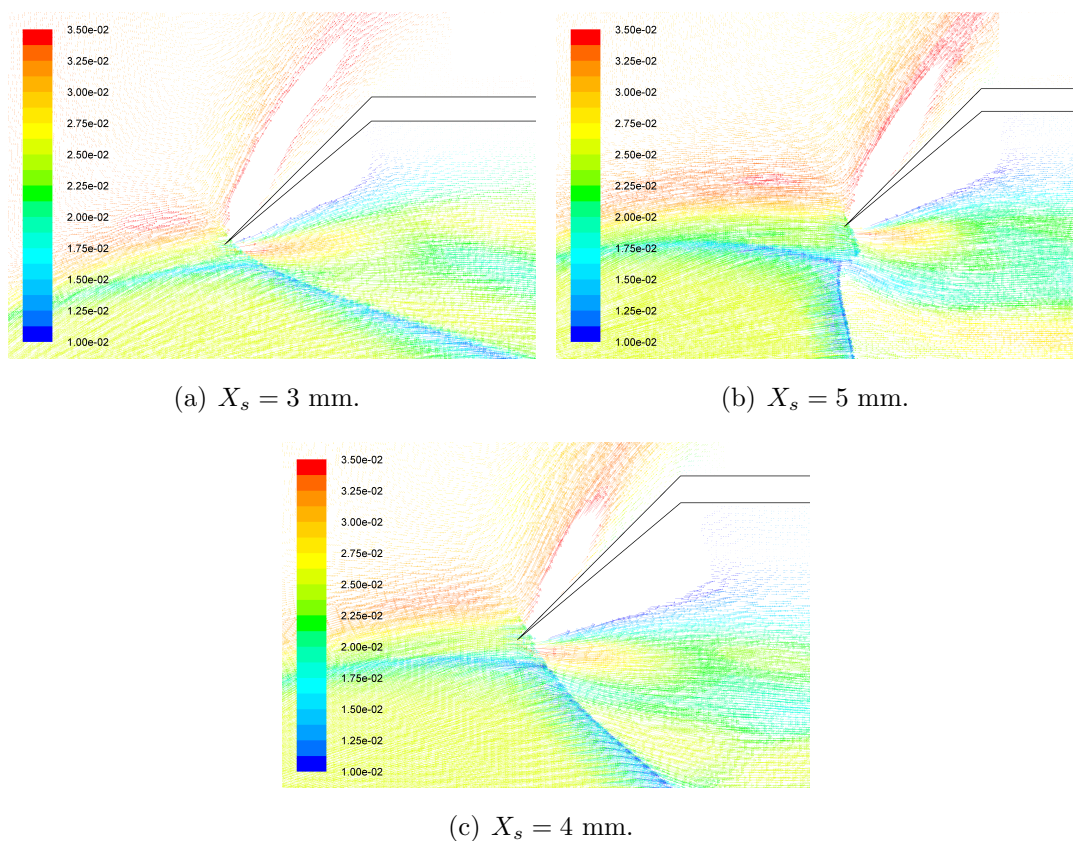


Figura 3.26: Mapas del campo del flujo en los que se presentan los cortes realizados por el skimmer.

Se puede observar de la Figura 3.26, que para las posiciones $X_s = 3$ mm y $X_s = 5$ mm, la punta del skimmer se encuentra en el empalme entre la zona roja y verde, separando ambos flujos, y obteniendo así, un mayor enriquecimiento. Por otra parte, para la posición $X_s = 4$ mm, se observa que la punta del skimmer se encuentra levemente inmersa en la zona verde, mezclando a la salida una leve cantidad de gas empobrecido.

Debido a esto, si bien se obtiene enriquecimiento en todas las posiciones axiales analizadas, la posición $X_s = 4$ mm presenta un menor enriquecimiento debido al análisis mencionado.

En la Figura 3.27 se muestran los cortes para cada una de las posiciones axiales.

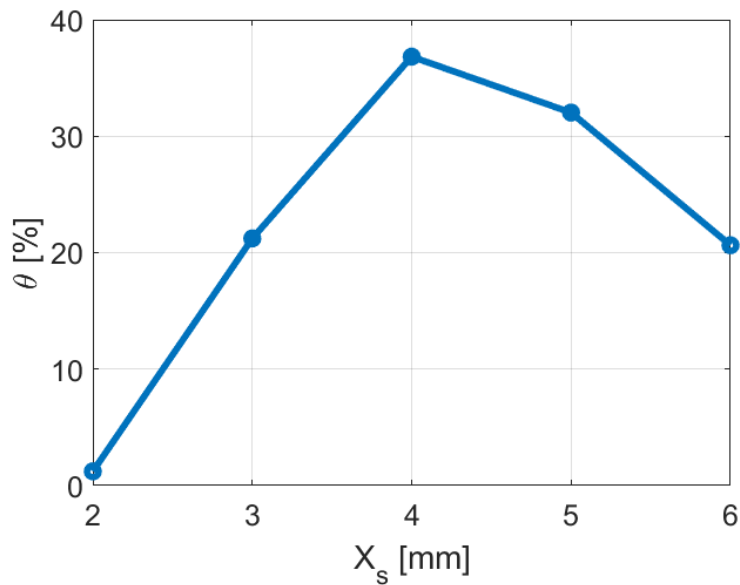


Figura 3.27: Corte en cada una de las posiciones axiales X_s para $R_s = 1,8$ mm.

Se puede observar de la Figura 3.27, que en la posición $X_s = 4$ mm, se tiene el mayor corte, es decir, el mayor caudal másico.

Debido a que la concentración media y el caudal másico se relacionan de manera inversa, este es en conjunto con la posición del skimmer, causante de la disminución de la concentración media en $X_s = 4$ mm, es el valor máximo de corte que se obtiene en esta posición.

3.4. Análisis de perfiles de concentración en flujo libre sin skimmer

Debido al costo computacional que conlleva realizar muchas simulaciones, se intentó con una sola simulación, estimar la concentración media de la especie pesada en el lado externo, para compararlas con las mediciones experimentales.

En la Figura 3.28 se muestra un esquema de un corte radial en el que se detallan las zonas de interés.

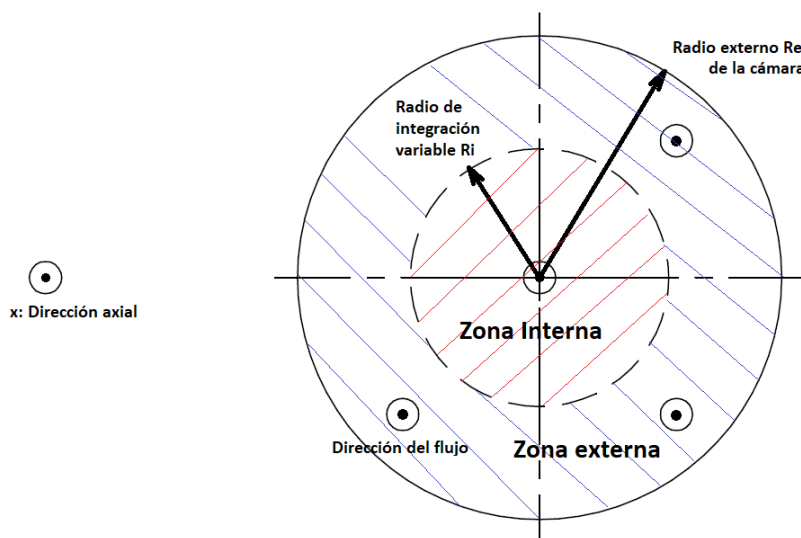


Figura 3.28: Esquema de las regiones analizadas para un corte radial.

En esta sección, se muestran los resultados del análisis cualitativo de los perfiles de concentración en distintas posiciones axiales del flujo.

Si se utilizara una geometría como la mostrada en la Figura 2.7(a) se obtendría un reingreso del flujo en la zona cercana al radio externo de la cámara en la superficie de salida. Esto ocurriría por conservación de momento, debido a que en la zona del eje de simetría se tienen velocidades muy altas en dirección saliente. El hecho de que exista un reingreso de flujo en la salida generaría que se arrastre un error en el cálculo de la concentración, lo cual fue analizado en trabajos previos [11]. Debido a esto, se utilizó la geometría como la mostrada en la Figura 2.7(c), la cual posee una restricción en el área de salida, para evitar que desde la parte fluidodinámica, se tenga este reingreso del flujo.

La configuración de presiones utilizadas para este caso fue de $P_0 = 1000$ mBar, $P_b = 4$ mBar, para una mezcla de CO_2 2,5% - He .

En la Figura 3.29 se muestran los vectores de velocidad en la salida de la geometría, y se observa que se logra no obtener reingreso de flujo en la salida.

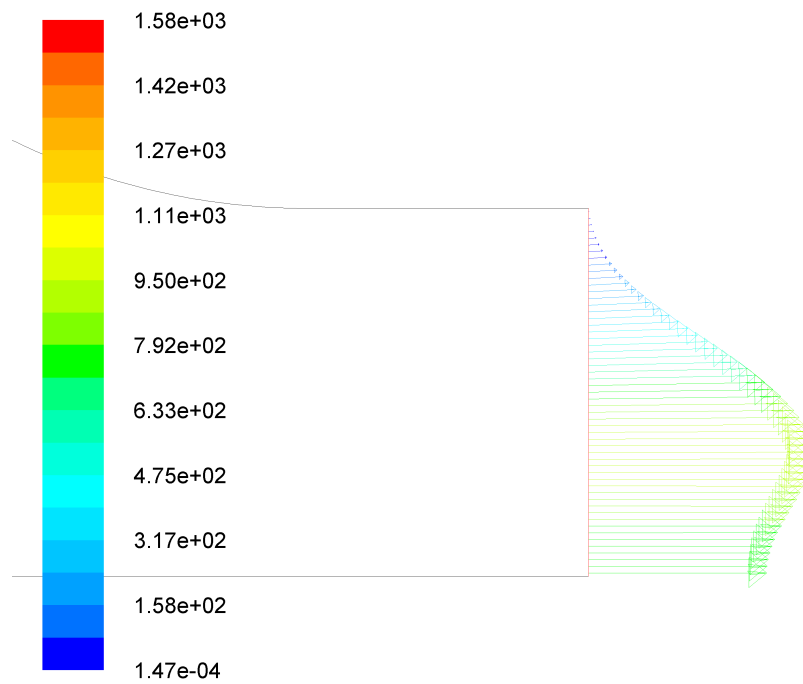


Figura 3.29: Vectores de velocidad a la salida de la geometría utilizada.

En la Figura 3.30, se muestran los mapas del número de Mach y de concentración obtenidos.

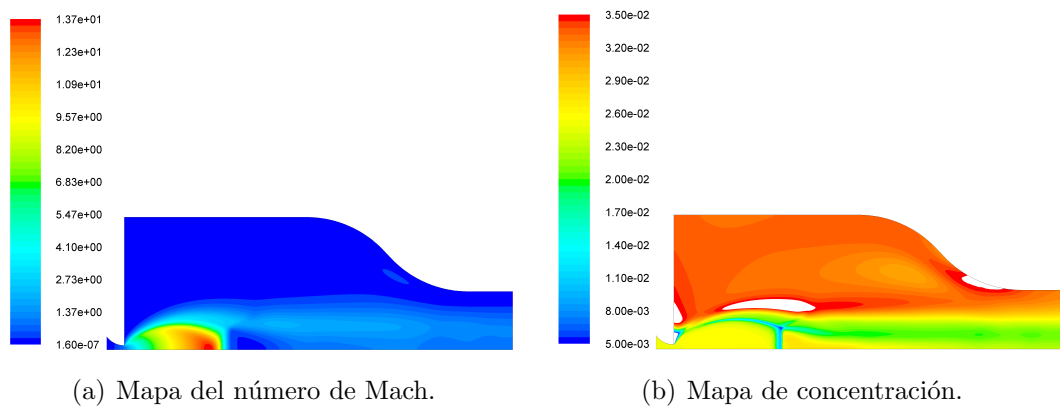
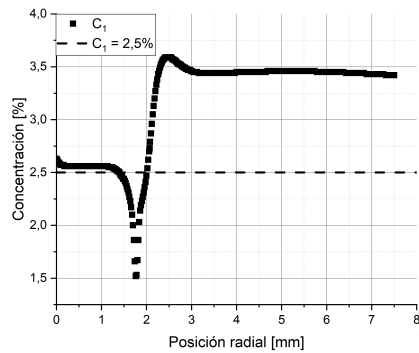
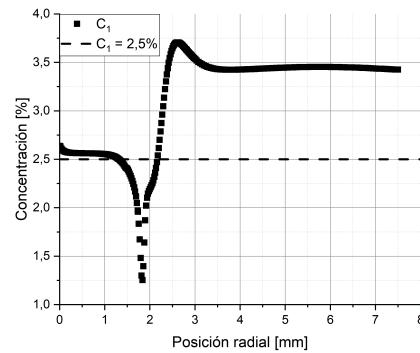
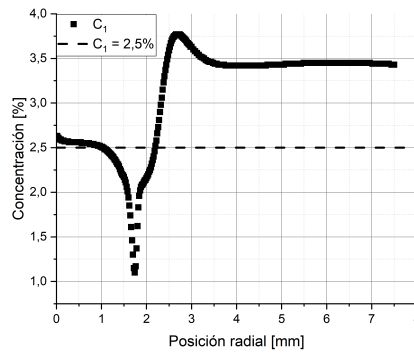


Figura 3.30: Mapas del número de Mach y de concentración.

Las posiciones axiales analizadas fueron $x = 3$ mm, $x = 4$ mm y $x = 5$ mm.

En la Figura 3.31, se muestran los perfiles de concentración obtenidos.

(a) $x = 3$ mm.(b) $x = 4$ mm.(c) $x = 5$ mm.**Figura 3.31:** Perfiles de concentración para las posiciones $x = 3$ mm, $x = 4$ mm y $x = 5$ mm.

Se planteó la posición ficticia de la punta de un divisor de caudales (*skimmer virtual*) con la misma ubicada a la altura del radio interno de integración R_i que se muestra en la Figura 3.28. De esta forma, se calcula mediante integración desde un radio nulo hasta R_i , como se detalla en la sección 2.6, la concentración media interna \bar{C}_i .

En la Figura 3.32 se muestran los perfiles de concentración media calculadas en función de la posición radial, que sería la ubicación de la punta del skimmer virtual.

Se puede observar de la Figura 3.31, que para las tres posiciones analizadas, el perfil de concentración se mantiene aproximadamente constante en un valor del orden del 3,5 % para valores radiales mayores a 2 mm.

Esto puede dar un indicio de que la concentración media en la región externa, la cual está pesada con el campo de velocidades de acuerdo con lo detallado en la sección 2.6, puede rondar este valor (3,5 %)

Si la velocidad axial sufre un cambio de signo (recirculación, Figura 3.33) esto afecta directamente al cálculo de los caudales molares, y por ende, al de la concentración media, dificultando la determinación de la misma en la zona externa debido al cambio de signo.

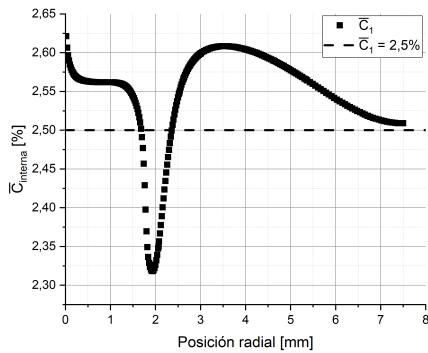
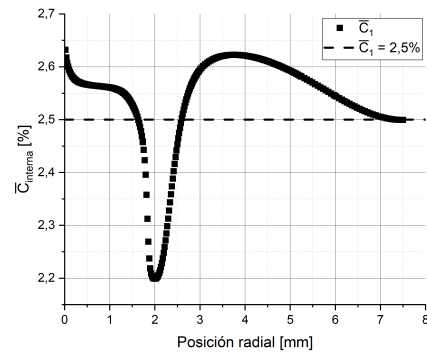
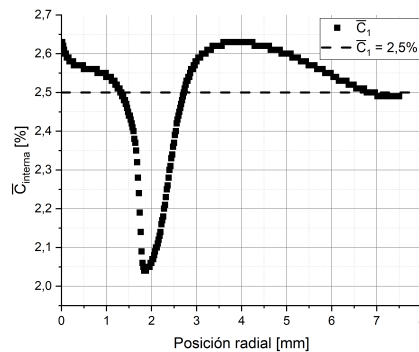
(a) $x = 3$ mm.(b) $x = 4$ mm.(c) $x = 5$ mm.

Figura 3.32: Perfiles de concentración media para las posiciones $x = 3$ mm, $x = 4$ mm y $x = 5$ mm.

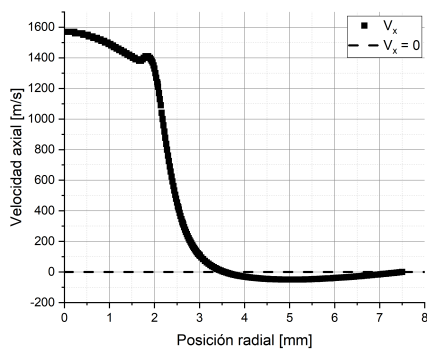
Esta recirculación interna no se presenta en los casos en los que se modela explícitamente el skimmer como se muestra en la sección 3.3, y por lo tanto esto no representa una dificultad para el cálculo de las concentraciones medias del lado externo, como si ocurre en el modelado de la cámara abierta sin skimmer. Por esto, calcular la concentración media externa en la geometría sin skimmer, no daría valores representativos para la geometría con skimmer.

Sin embargo, el cálculo de las concentraciones medias del lado interno, en las que intervienen las velocidades axiales del núcleo supersónico, las cuales son todas positivas, puede realizarse sin dificultad, tal como muestra en la figura 3.32. En la misma, puede observarse un mínimo de la concentración de la especie pesada por el lado interno cuando la punta del skimmer virtual se sitúa a un radio del orden de 2 mm. Esto por conservación de especies, puede indicar que para un skimmer colocado en dicha posición del lado externo, se podría tener un máximo en la concentración media de la especie pesada que es lo que se busca.

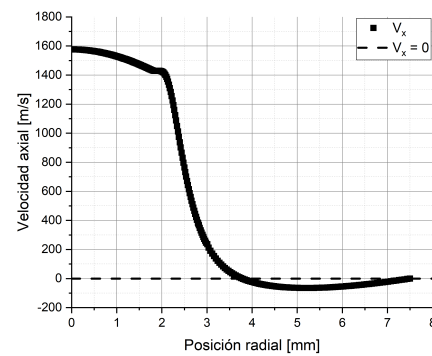
Por lo tanto, el cálculo de la cámara abierta sin skimmer no puede arrojar un valor determinístico para la concentración media del lado externo, pero sí a través del análisis

en el lado interno nos puede dar un indicio acerca de a qué posición radial convendría colocar el skimmer real, para cada posición axial de modo de lograr un máximo en la concentración media de la especie pesada en el lado externo. De este modo, constituye una herramienta válida para un primer análisis con una sola simulación en la búsqueda de los óptimos de enriquecimiento para una configuración dada.

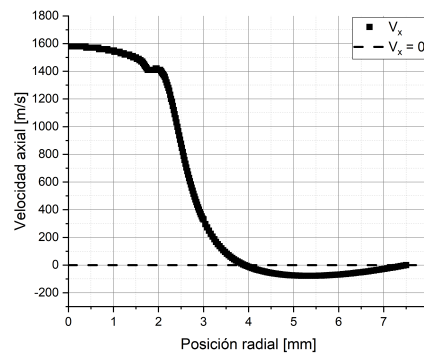
En la Figura 3.33 se muestran los perfiles de velocidad axial en función del radio para cada corte radial a $x = 3$ mm, $x = 4$ mm y $x = 5$ mm.



(a) $x = 3$ mm.



(b) $x = 4$ mm.



(c) $x = 5$ mm.

Figura 3.33: Perfiles de velocidad axial para las posiciones $x = 3$ mm, $x = 4$ mm y $x = 5$ mm.

Se puede observar de la Figura 3.33, que la velocidad axial, sufre un cambio de sentido. En la Figura 3.34 se muestran los vectores de velocidad para la posición $x = 4$ mm.

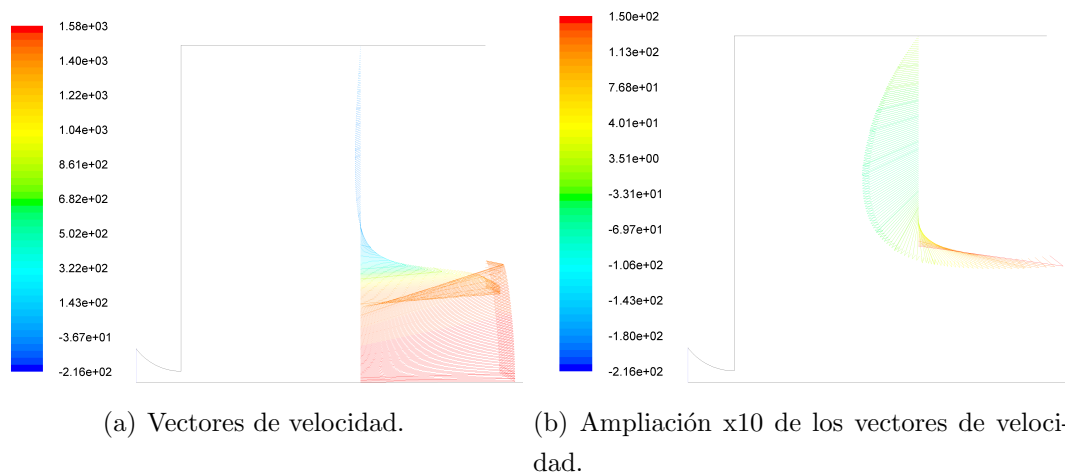


Figura 3.34: Vectores de velocidad coloreados por magnitud de la velocidad axial para la posición $x = 4$ mm.

Cabe destacar, que la concentración media no se calcula como el valor medio del perfil en una superficie dada. Esto se debe a que en el laboratorio, se toma una muestra de la mezcla gaseosa a la salida, y se mide su composición. Esto depende de la cantidad de moles recolectados de cada una de las especies, y por lo tanto, de los caudales molares de las mismas recolectados en un cierto tiempo de medición. Estos caudales molares dependen no solo de la concentración, sino también de las velocidades, siendo la forma de estimar la concentración media que se mide en el laboratorio, la indicada en la sección 2.6.

Las cantidades que se miden a la salida de cada una de las cámaras (cabeza y cola) son los caudales molares, los cuales dependen de la velocidad axial del gas, y por ende, la concentración media se determina como se detalla en la sección 2.6. Por esto, el cálculo de la concentración media por medio de la integración del perfil de concentración no sería un valor representativo.

Según lo explicado anteriormente, se puede estimar que si se utilizara una geometría con divisor de caudales se tendría enriquecimiento de la especie pesada en la salida 1 si se coloca la punta del skimmer a un radio $R_s = 2$ mm para las tres posiciones axiales analizadas.

Capítulo 4

Conclusiones y posibles líneas de trabajos futuros

“No todos los que deambulan sin rumbo fijo están perdidos.”

— J. R. R. Tolkien

4.1. Sobre los resultados fluidodinámicos

Según lo visto en la sección 3.1, se observó al momento de realizar las simulaciones, que para los parámetros de los experimentos realizados en el laboratorio, no se cumple la validez de la hipótesis del continuo, debido a que el número de Knudsen resultante supera el valor límite de $Kn \leq 0,3$ en una región del dominio de simulación, la evolución en el eje adimensional del número de Mach se separa de forma muy temprana del modelo de Pauly, y la geometría dada por el mapa del número de Mach de las simulaciones, no se corresponde a la geometría típica de un flujo supersónico en expansión libre. En el laboratorio, se realizaron las mediciones de concentración a la salida 1 y se observó un enriquecimiento de la especie pesada. Este experimento no puede ser modelado mediante las ecuaciones de Navier-Stokes, por lo que es necesario aplicar otro modelo para representar el fenómeno físico, como por ejemplo, la ecuación de Boltzmann, según el gráfico de la Figura 2.5. Esta metodología se encuentra actualmente en desarrollo dentro del proyecto LASIE.

4.2. Sobre el diseño de experimento

Para poder establecer una relación entre las mediciones realizadas sobre los experimentos llevados a cabo en el laboratorio y las simulaciones, se diseñaron futuros experimentos en los que se cumpla la hipótesis del continuo, para que el fenómeno físico

pueda ser representado por las ecuaciones de Navier-Stokes, y por ende, las simulaciones de lo que ocurre en el interior de la tobera sean representativas. Se propusieron distintas presiones de alta, y distintos diámetros de boquilla, y se calcularon las correspondientes presiones de baja mínimas, de forma tal que se obtenga un número de Knudsen de $Kn = 0,3$ como máximo en todo el dominio del campo del flujo. Se representan las presiones de alta y de baja en las Figuras 3.5, 3.6, y 3.7.

Se pudo observar que para una dada presión de alta, la presión de baja mínima se mantiene aproximadamente constante. Por otra parte, el parámetro más influyente sobre la variación de P_b^{min} , es el diámetro de boquilla, observando que a mayor diámetro de la misma, se podrían utilizar presiones más bajas, mientras que para diámetros menores, se necesitan mayores valores de P_b^{min} .

Se realizaron simulaciones fluidodinámicas de cuatro de las presiones de alta propuestas: $P_0 = 200$ mBar, $P_0 = 330$ mBar, $P_0 = 450$ mBar, y $P_0 = 660$ mBar, y se obtuvieron los perfiles de la evolución del número de Mach y del número de Knudsen a lo largo del eje para cada una de ellas. Se observó que en todos los casos, se cumple con $Kn \leq 0,3$. Además, cabe destacar que para menores presiones de alta, la evolución del número de Mach se aparta del modelo de Pauly mucho antes de alcanzar la posición teórica del disco de Mach, que para presiones mayores. Debido a esto, se concluye que las recomendaciones para realizar los experimentos en el laboratorio de forma tal que se pueda correlacionar los resultados con los obtenidos mediante las simulaciones fluidodinámicas, son utilizar las mayores presiones de alta posibles y utilizar el mayor diámetro de boquilla posible para poder utilizar las menores presiones de baja posibles, aumentando así la relación de presiones $\frac{P_0}{P_b}$, aunque esto tiene un límite asociado con la capacidad de bombeo instalada en el laboratorio.

4.3. Sobre el análisis de la termoforesis

4.3.1. Gas $Ne^{22} 9,25\%$ - Ne^{20}

Según lo presentado en la sección 3.2.1, se pudo observar que el término de la termoforesis de la Ecuación 2.27 no presenta una gran relevancia. Mas aún, se observó que considerar la variación con la temperatura del factor de difusión térmica α_T no presenta un cambio significativo en el perfil de concentraciones para el gas $Ne^{22} 9,25\%$ - Ne^{20} . Esto se debe principalmente a lo explicado en la sección 3.2.1, en donde se detalla que existe una competencia entre la existencia del gradiente de temperatura y el valor del α_T . Cuando el α_T toma los mayores valores en valor absoluto, la temperatura se mantiene aproximadamente uniforme en la dirección radial, tanto antes como después de la onda de choque. Esto implica un término difusivo asociado a la termoforesis despreciable, dado que el mismo depende del gradiente de temperatura ∇T . Por otra

parte, cuando se da lugar al mayor salto de temperatura el α_T toma valores cercanos a 0. Si bien el término $K_T \frac{\nabla T}{T}$ presenta un salto en la posición del skimmer de valores negativos a valores positivos en forma pronunciada, se concluye que su aporte a la difusión total se puede considerar despreciable para el gas $Ne^{22} 9,25\%-Ne^{20}$.

4.3.2. Mezcla SF_6 5 %-He

Para esta mezcla de gases utilizada, se observó un comportamiento similar al del gas $Ne^{22} 9,25\%-Ne^{20}$. Los perfiles de concentración no presentan una variación significativa para los tres casos analizados del α_T , ya que se observa que la diferencia entre los valores de los perfiles de concentración en el pico de ambos es de $C_{\alpha_T=-0,1} - C_{\alpha_T=0,1} \approx 0,05\%$. El perfil de concentración en el cual se consideró la variación lineal del α_T se encuentra nuevamente entre los valores de los perfiles a $\alpha_T = \pm 0,1$. De manera similar que para el caso de $Ne^{22} 9,25\%-Ne^{20}$, a pesar de que el término $K_T \frac{\nabla T}{T}$ presenta un salto en la posición del skimmer de valores negativos a valores positivos en forma pronunciada, se concluye que su aporte a la difusión total se puede considerar despreciable para la mezcla SF_6 5 %-He.

4.4. Sobre el análisis de la posición axial del skimmer

Para el análisis realizado para el radio del skimmer de $R_s = 1,5$ mm, se concluyó que dicho valor tomando la variación de la posición axial, no es el adecuado para generar una separación en la cual se obtenga una mezcla enriquecida con la especie pesada a la salida 1, para las posiciones axiales de $x = 4$ mm y $x = 5$ mm y una relación de presiones de $\frac{P_0}{P_b} = 250$. Sin embargo, sí se logra un enriquecimiento de la especie pesada para $x = 2$ mm y $x = 3$ mm.

En este caso de $R_s = 1,5$ mm = constante, sucede que a medida que la punta del skimmer se aleja de la boquilla, el mismo ingresa dentro del núcleo supersónico cuasi-isoentrópico y de este modo al no cortar a la onda de choque en las posiciones más alejadas de la boquilla, no se genera enriquecimiento y la concentración en la rama externa cae al valor de referencia. Esto se debe a que el proceso difusivo ocurre principalmente en la onda de choque oblicua, donde se presentan los mayores gradientes de presión. Cuando la punta del skimmer entra al núcleo cuasi-isoentrópico, la onda de choque se encuentra totalmente en la zona externa y la separación de especies que produce la misma no se aprovecha en la división de flujos generada por el skimmer.

Por otra parte, para el caso en que $R_s = 1,8$ mm, se observa que se tiene un enriquecimiento de la especie pesada, debido a que se obtienen concentraciones medias

mayores a la de referencia. Puede observarse que sucede algo similar a lo que ocurre en el caso de $R_s = 1,5$ mm. Para el caso de $R_s = 1,5$ mm la punta del skimmer corta dentro de la zona de silencio obteniendo una concentración media a la salida 1 cercana a la de referencia, mientras que en este caso la punta del skimmer corta aproximadamente la mitad del espesor de la onda de choque en la posición $X_s = 4$ mm. Debido a que no llega a encontrarse dentro de la zona de silencio, se obtiene un enriquecimiento, aunque para el valor de $X_s = 4$ mm, el valor de la concentración media cae en comparación con los valores obtenidos para las posiciones adyacentes, por lo explicado en la sección 3.3.

Según este análisis, se debe tener especial cuidado con la posición de la punta del skimmer, debido a que un radio que no sea suficiente para separar el flujo a la altura en la que se forman las ondas de choque, no generaría ningún tipo de enriquecimiento. Por otra parte, a pesar de que el radio sea tal que corte al flujo obteniendo enriquecimiento a la salida, puede suceder que en alguna posición axial, se corte por demás el espesor de la onda de choque oblicua, disminuyendo la concentración media.

Es por esto que la selección de la posición axial del skimmer, tanto como su diámetro son muy importantes para lograr una buena separación.

4.5. Sobre el análisis de los perfiles de concentración en una tobera sin divisor de caudales

En este análisis se observó que no se puede realizar un cálculo preciso del valor de la concentración media para distintas posiciones axiales, en la zona externa mediante el cálculo detallado en la sección 2.6, debido a que se tiene recirculación del flujo, por lo que la velocidad axial negativa introduce errores en el cálculo de los caudales molares.

Debido a esto, se estimó cuál sería el radio adecuado para colocar la punta del skimmer si se utilizara una geometría con divisor de caudales para la configuración de presiones utilizada en este análisis, resultando ser del orden de $R_s = 2$ mm, para las posiciones axiales analizadas en la sección 3.4, dado que un mínimo de concentración media en la rama interna por debajo del valor de referencia de la entrada, sugiere que la concentración media en la cámara externa puede tener un valor bien enriquecido en la especie pesada (CO_2).

Por lo tanto, la cámara sin skimmer constituye una herramienta útil para un análisis cualitativo orientado a encontrar configuraciones de skimmer que brinden óptimos de concentración media de la especie pesada en la cámara externa, que es lo que se mide en el laboratorio.

Con ésta posición de skimmer aproximada, posteriormente pueden realizarse las simulaciones detalladas con el divisor modelado explícitamente para determinar el valor

de esta concentración media.

4.6. Posibles líneas de trabajo futuras

A continuación se detallan posibles líneas de trabajo futuras:

- **Análisis experimental:** Planificar y realizar experimentos para obtener una buena comparación entre los experimentos y las simulaciones, dentro de un régimen en el cual sean válidos los cálculos de las simulaciones y que así se pueda predecir lo que ocurra en la unidad separativa. Cabe destacar que es necesario que en los experimentos se tenga especial cuidado en la configuración de las presiones de alta y de baja ya que las mismas determinan la geometría del barril de Mach, y por ende, el nivel de enriquecimiento.
- **Realimentación de la fluidodinámica:** Como se mencionó en la sección 2.5.2, el escalar que calcula *Fluent* no altera la fluidodinámica del caso bajo estudio. Debido a que al variar la concentración en el dominio del flujo, cambia la masa de la mezcla, entre otros parámetros, se recomienda realizar un estudio en el que se retroalimenten los parámetros fluidodinámicos mediante los cálculos difusivos. Esto permitiría hacer cálculos de la concentración media más precisos.

Apéndice A

Práctica profesional supervisada y actividades desarrolladas

La Práctica Profesional Supervisada (PPS) forma parte de la formación requerida en la carrera de Ingeniería Mecánica del Instituto Balseiro. La misma se llevó a cabo en las instalaciones del proyecto L.A.S.I.E. (Laboratorio Argentino de Separación Isotópica para Enriquecimiento), dentro del Centro Atómico Bariloche (CAB). La PPS se realizó bajo la dirección del Dr. Jose González y la co-dirección del Ing. Leandro Perlo y se cumplió con 420 horas de trabajo.

Las actividades que se desarrollaron fueron:

- Estudio bibliográfico acerca de los modelos de difusión binaria y de flujo compresible en expansión libre axi-simétrica.
- Aprendizaje del manejo del software *Fluent* para la creación de geometrías, mado, simulaciones fluidodinámicas sobre las geometrías y extracción de datos.
- Familiarización con el uso e implementación de las librerías de *Fluent* definidas por el usuario.
- Comparación entre las mediciones del laboratorio y simulaciones fluidodinámicas de mezclas binarias de CO_2-He para el análisis de la hipótesis del continuo y diseño de condiciones para experimentos.
- Estudio bibliográfico sobre el factor de difusión térmica α_T e implementación de un modelo de variación lineal con la temperatura para el mismo.
- Simulaciones fluidodinámicas y de difusión de mezclas binarias de CO_2-He , SF_6-He y de Ne mediante modelos binarios desarrollados previamente en el proyecto.
- Análisis de la influencia de la posición de un divisor de caudales en la concentración media para una mezcla de CO_2-He .

- Análisis de perfiles de concentración sin divisor de caudales en una mezcla de CO_2 - He .

Bibliografía

- [1] Bird, G. A. Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows. En: Oxford Engineering Sciences, tomo 1, 2^a ed^{ón}. Clarendon Press, 1994. [ix](#), [12](#)
- [2] M. Leuenberger, C. L. Thermal diffusion: an important aspect in studies of static air columns such as firm air, sand dunes and soil air. *University of Bern, Switzerland*. [ix](#), [ix](#), [21](#), [22](#)
- [3] Pauly, H. Atom, molecules and cluster beams. tomo 1. Springer, 2000. [8](#), [10](#)
- [4] Giovanni Sanna, G. T. Molecular beams and gas dynamics. tomo 1. Imperial college press, 2005. [8](#)
- [5] White, F. M. Fluid mechanics. 7^a ed^{ón}. McGraw Hill, 2004. [13](#)
- [6] Cabaña, A. Caracterización de ondas de choque en toberas tipo expansión libre. *Tesis de grado*, 2022. [13](#), [38](#), [41](#)
- [7] ANSYS. Fluent user's guide. 2016. [18](#), [26](#)
- [8] S. Chapman, T. C. The mathematical theory of non-uniform gases. Cambridge University Press, 1953. [20](#)
- [9] Arana, B. Análisis de modelos de clusterización en mezclas de gases. *Tesis de grado*, 2022. [21](#), [24](#)
- [10] K. E. GREW, T. L. I. Thermal diffusion in gases. Cambridge University Press, 1952. [22](#)
- [11] Frigerio, L. Modelado de gases en flujo compresible en expansiones libres. *Tesis de grado*, 2019. [50](#), [53](#)

Agradecimientos

Si tuviera que mencionar a cada persona que realizó un aporte en mi formación, de seguro dejaría a alguien afuera, lo cual no es mi intención.

En principio, quiero agradecer a mi familia que estuvo siempre presente y apoyandome en todo momento para que lograra mis estudios. Los almuerzos y cenas que mi Tata me suministró a lo largo de mis años en la facultad siempre fueron una caricia para calmar cualquier estrés.

A mis compañeros y amigos del IB, que siempre estuvieron para darnos una mano; en especial a mi grupo autodenominado *Guido Beck*, por todos los momentos compartidos, y por cuando estuvieron siempre dispuestos a ayudarme cuando estuve lesionado por el accidente que sufrimos juntos en junio de 2022.

También quiero agradecer a mis amigos que siempre supieron entender cuando no pude asistir a alguna juntada por motivos de estudio, y por cuando también me instaron a salir a despejar la cabeza.

A Graciela, por cuanto siempre nos acompañó y estuvo dispuesta a generar las mejores condiciones para que podamos estudiar y rendir los exámenes.

A aquellos profes de la secundaria que me motivaron a seguir una carrera universitaria.

A mi director el Pampa, por estar siempre dispuesto a explicarme lo necesario para este trabajo y por sus asados. Sin él ni Leandro, éste trabajo no hubiese sido posible.

A Adonis, con quien compartimos habitación durante estos años sin problemas. En cada cuatri que pasó, nos recalcan que se escuchaban nuestras risas desde otras habitaciones.

A nuestro equipo de fútbol Urganeta, que después de tantos cuatrimestres, finalmente salimos campeones del torneito del CAB.

A la educación pública, y a cada una de las personas que aportaron a mi formación como profesional y como persona.

