

TIIVISTELMÄ

Lappeenrannan teknillinen yliopisto
Teknillinen tiedekunta
LUT Energia

Tomi Pakarinen

Uraaniheksafluoridin faasimuutoksen CFD-simulointi

Diplomityö

2013

129 sivua, 55 kuvaa, 16 taulukkoa ja 3 liitettä

Tarkastajat: Professori Juhani Hyvärinen
TkT Vesa Tanskanen

Ohjaajat: TkT Vesa Tanskanen
DI Ville Kakkonen

Hakusanat: uraaniheksafluoridi, Uf_6 , autoklaavi, CFD

Diplomityön tarkoituksena on luoda uraaniheksafluoridista käyttäjän määrittelemä aine kaupallisen virtauslaskentaohjelmiston (FLUENT) ainekirjastoon ja simuloida aineen käyttäytymistä sulaessa ja kiinteyttäessä.

Työn kirjallisuusosassa on esitelty aiempia tutkimuksia uraaniheksafluoridin termodynaamisista ominaisuuksista, joita käytetään aineen määrittelyssä. Kokeellisessa osassa on käytetty virtauslaskentaohjelmiston Eulerilaista monifaasimallia sulamisen ja kiinteytymisen tarkasteluun kaksidimensionaalisessa sylinterissä.

ABSTRACT

Lappeenranta University of Technology
Faculty of Technology
LUT Energy

Tomi Pakarinen

CFD-simulation of uranium hexafluoride during phase change

Master's Thesis

2013

129 pages, 55 figures, 16 tables and 3 appendixes

Examiners: Professor D.Sc. (Tech.) Juhani Hyvärinen
 D.Sc. (Tech.) Vesa Tanskanen

Supervisors: D.Sc. (Tech.) Vesa Tanskanen
 M. Sc. (Tech) Ville Kakkonen

Keywords: uranium hexafluoride, Uf_6 , autoclave, CFD

The purpose of this thesis is to create a user-defined material of uranium hexafluoride for commercial computational fluid dynamics software (FLUENT) and simulate its behavior when melting and solidifying the matter.

In the literature survey part of this thesis, a review is made of previous publications of the thermodynamic properties of uranium hexafluoride, which are used to define the material. In the simulation part Eulerian multiphase model of the computational fluid dynamics software is used to investigate melting and solidification process in a two-dimensional cylinder.

ALKUSANAT

Tämä diplomityö on tehty Mikkelissä Platom Oy:lle vuonna 2013. Diplomityö on tehty osana autoklaavin tuotekehitysprojektia. Työn ohjaajina toimivat TkT Vesa Tanskanen ja DI Ville Kakkonen ja työn tarkastajina toimivat Professori Juhani Hyvärinen ja TkT Vesa Tanskanen.

Aluksi haluan kiittää Platom Oy:tä mahdollisuudesta ottaa osaa mielenkiintoisen diplomityön tekemiseen. Suuret kiitokset ohjaajalleni TkT Vesa Tanskaselle opastuksesta simulointiohjelmiston käytössä ja neuvoista mallinnukseen liittyvissä ongelmissa. Diplomityön etäohjaus pääasiassa sähköpostin välityksellä on haastava tehtävä. Haluan kiittää myös Lappeenrannan opiskelukavereitani, joiden ansiosta opiskelu yliopistossa on ollut mieluista aikaa.

Lopuksi kiitän vielä vanhempiani, isovanhempiani, siskoani ja veljeäni kannustuksesta ja tuesta opiskelujen aikana.

Mikkelissä 26.11.2013

Tomi Pakarinen

Sisällysluettelo

Symboli- ja lyhenneluettelo

1 Johdanto	13
1.1 Työn tausta	13
1.2 Työn tavoitteet.....	13
1.3 Työn rakenne	13
1.4 Käytetty taustamateriaali ja tutkimukset	14
2 Polttoainekierto	15
2.1 Louhinta.....	16
2.2 UF ₆ prosessointi (konversio)	17
2.3 Uraanin väkevöinti	19
2.4 Polttoaine-elementtien valmistus.....	22
2.5 Polttoaineen käyttö	23
2.6 Välivarastointi	23
2.7 Jälleenkäsittely	24
2.8 Loppusijoitus	24
3 Uraaniheksafluoridi	25
3.1 Yleistä.....	25
3.2 Kemialliset ominaisuudet	25
3.3 Fysikaaliset ominaisuudet	26
4 Autoklaavit	28
4.1 Autoklaavityypit	28
4.2 UF ₆ -sylinteri.....	31
4.2.1 Sylinterin tyhjennys	32
4.2.2 Sylinterin täyttö	34
4.2.3 Näytteenotto	35
4.2.4 UF ₆ :n kuljetukset.....	35
4.2.5 UF ₆ :n säilytys	36

5	Uraaniheksafluoridin aineominaisuudet	39
5.1	Kaasumaisen UF ₆ :n aineominaisuuksien korrelaatiot	39
5.1.1	Ominaistilavuus ja tiheys	40
5.1.2	Ominaislämpökapasiteetti	40
5.1.3	Lämmönjohtumiskerroin	41
5.1.4	Viskositeetti	42
5.2	Nestemäisen UF ₆ :n aineominaisuuksien korrelaatiot	42
5.2.1	Ominaistilavuus ja tiheys	42
5.2.2	Ominaislämpökapasiteetti	43
5.2.3	Viskositeetti	44
5.2.4	Lämmönjohtumiskerroin	47
5.3	Kiinteän UF ₆ :n aineominaisuudet	47
5.3.1	Tiheys	47
5.3.2	Ominaislämpökapasiteetti	48
5.3.3	Lämmönjohtumiskerroin	48
6	UF₆-sylinterin lämmitysajan analyttinen ratkaisu	49
6.1	Ilman konvektiivinen lämmönsiirtokerroin	50
6.2	UF ₆ :n konvektiivinen lämmönsiirtokerroin	51
6.3	UF ₆ :n tilavuus sylinterissä	54
6.4	Lämmönsiirtopinta-alojen arviointi	56
6.5	Keskimääräinen lämmitysteho ja sulamisaika	57
7	UF₆-sylinterin numeerinen simulointi	59
7.1	Volume of Fluid- malli	60
7.2	Jatkuvuusyhtälöt	60
7.3	Liikemääräyhtälö	61
7.4	Energiayhtälö ja lämmönsiirto	62
7.5	Sublimaatio ja härmistyminen	62
7.6	Sulaminen ja jäätyminen	63
7.7	Höyrystyminen ja lauhtuminen	64
7.8	Aineominaisuudet	68
7.9	Ratkaisutapa	68

8	Simulointiasetukset	70
8.1	Geometria ja laskentahila	70
8.2	Tarvittavien alkuarvojen laskenta.....	71
8.3	Aineominaisuudet.....	75
8.4	Simulointiprosessi	76
9	Simuloitavat tapaukset	78
9.1	Testisimulaatio	78
9.1.1	Parametrit ja raja-arvot.....	79
9.2	Lämmityssimulaatio	81
9.2.1	Parametrit ja raja-arvot.....	81
9.3	Jäähdytys­simulaatio.....	83
9.3.1	Parametrit ja raja-arvot.....	84
10	Tulosten tarkastelu	86
10.1	Testisimulaatio	86
10.1.1	Sulamis­aika ja lämmitysteho.....	86
10.1.2	Luonnollinen konvektio sylinterissä	93
10.1.3	Courant-luku	96
10.1.4	Paineen nousu.....	97
10.1.5	Höyrystyminen ja lauhtuminen	99
10.1.6	Mallin massahävikki	101
10.1.7	Yhteenveto simulaatiosta	101
10.2	Lämmityssimulaatio	102
10.2.1	Sulamis­aika ja lämmitysteho.....	102
10.2.2	Luonnollinen konvektio sylinterissä	107
10.2.3	Paineen nousu.....	108
10.2.4	Höyrystyminen ja lauhtuminen	108
10.2.5	Yhteenveto simulaatiosta	110
10.3	Jäähdytys­simulaatio.....	110
10.3.1	Kiinteytys­aika ja jäähdytysteho	110
10.3.2	Paineen lasku.....	114
10.3.3	Höyrystyminen ja lauhtuminen	115

10.3.4 Yhteenveto simulaatiosta	116
10.4 Jatkotutkimuskohteet	116
11 Yhteenveto	118
12 Lähdeluettelo	121

LIITTEET

LIITE 1: Kaasumaisen UF₆:n aineominaisuussovitteet

LIITE 2: Nestemäisen UF₆:n aineominaisuussovitteet

LIITE 3: Kiinteän UF₆:n aineominaisuussovitteet

Symboli- ja lyhenneluettelo

Roomalaiset aakkoset

A	pinta-ala	[m ²]
A_{mush}	Fluentin vakio	[-]
c	äänennopeus	[m/s]
CFL	Courant-luku	[-]
c_p	ominaislämpökapasiteetti	[J/kgK]
D	halkaisija	[m]
E	energia	[J]
g	putoamiskiihtyvyys	[m/s ²]
H	entalpia	[J/kg]
h	lämmönsiirtokerroin	[W/m ² K]
H^0	ideaalikaasun entalpia	[J/kg]
H_f	sulamislämpö	[J/kg]
H_v	höyrystymislämpö	[J/kg]
k	lämmönjohtavuus	[W/mK]
L	latentti lämpö	[J/kg]
m	massa	[kg]
\dot{m}	massansiirto	[kg/m ³ s]
M	moolimassa	[kg/kmol]
n	ainekohtainen vakio	[-]
n	indeksi	[-]
p	paine	[Pa]
P	teho	[W]
Q	lämpömäärä	[J]
R	ainekohtainen kaasuvakio	[J/kgK]

r	säde	[m]
S	entropia	[J/kgK]
S	lähdetermi	tapauskohtainen
t	aika	[s]
T	lämpötila	[K]
U	normaalinopeuteen perustuva tilavuusvuo	[-]
V	tilavuus	[m ³]
v	virtausnopeus	[m/s]
x	korkeus	[m]
Z	kokoonpuristuvuus	[-]

Kreikkalaiset aakkoset

α	tilavuusosuus	[-]
β	nestemäinen tilavuusosuus	[-]
ϵ	kriittisen kokoonpuristuvuuden eksponentti	[-]
μ	dynaaminen viskositeetti	[Ns/m ²]
ρ	tiheys	[kg/m ³]

Dimensiottomat luvut

Gr	Grashofin luku
Nu	Nusseltin luku
Pr	Prandtlin luku
Ra	Rayleighin luku
Re	Reynoldsin luku

Yläindeksit

' viittaa termin korjaukseen

Alaindeksit

c	kriittinen
f	filmi
i	ilma
kiinteä	kiinteä faasi
L	neste
lv	nesteestä kaasuun
min	vähimmäis-
neste	nestemäinen faasi
q	faasi q
r	redusoitu
ref	referenssi
S	kiinteä
s	ominais-
sat	höyrystyminen
SYL	sylinteri
UF ₆	uraaniheksafluoridi
v	kaasumainen faasi
vl	kaasusta nesteeseen

Lyhenteet

CFD Computational fluid dynamics

PISO Pressure Implicit Splitting of Operators

SIMPLE Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations

UDF User Defined Function

VOF Volume of Fluid

1 JOHDANTO

1.1 Työn tausta

Uraaniheksafluoridi on aine, jota käytetään ydinpolttoaineen rikastamisessa. Autoklaavi on laite, jota käytetään uraaniheksafluoridisylinterin käsittelyssä. Autoklaavissa tapahtuva lämmönsiirto ympäröivästä väliaineesta lämmitettävään UF_6 -sylinteriin on tärkein autoklaavin suorituskyvyn mittari. Uraaniheksafluoridin käyttäytymisen tarkka tietäminen mahdollistaa tehokkaamman lämmönsiirron suunnittelun. Tässä työssä keskitytään UF_6 :n käyttäytymisen mallintamiseen aineen sulaessa ja jäätyessä.

1.2 Työn tavoitteet

Diplomityön tavoitteena on luoda uraaniheksafluoridista CFD-malli, joka mahdollistaa aineen käyttäytymisen simuloinnin. Työn ensimmäisessä vaiheessa simulointiohjelmistoon luodaan käyttäjän määrittelemä aine sen kaikissa olomuodoissa. Aineen ominaisuuksien määrittelyssä käytetään hyväksi uraaniheksafluoridista tehtyjä tutkimuksia. CFD-ohjelmistoon luodaan kaksiulotteinen geometriamalli, johon kuuluu pelkästään UF_6 -sylinterin poikkileikkaus. Ohjelmistolla simuloidaan kuinka UF_6 käyttäytyy ja millaisia ilmiöitä sylinterissä tapahtuu, kun sylinteriä lämmitetään tai jäähdytetään.

1.3 Työn rakenne

Diplomityön toisessa luvussa kerrotaan ydinvoimalan polttoainekierrosta ja selvitetään, mihin kohtaan kiertoa uraaniheksafluoridi sijoittuu. Kolmannessa luvussa käydään läpi uraaniheksafluoridin tärkeimpiä ominaisuuksia kemian ja fysiikan kannalta. Neljännessä luvussa perehdytään autoklaaveihin yleisesti sekä tarkemmin uraaniheksafluoridin käsittelyssä käytettyihin vaihtoehtoihin. Viidennessä luvussa käydään läpi uraaniheksafluoridin termodynaamiset aineominaisuudet, joista luodaan ohjelmistoon sopivat sovitteet. Luvussa kuusi esitellään sylinterin lämmityksen analyttinen laskenta, johon simulaation tuloksia verrataan. Seitsemännessä luvussa käydään läpi laskennan numeerinen eteneminen sekä malliin

kuuluvat fysiikkamallit. Kahdeksannessa luvussa lasketaan simulointiin tarvittavat alkuarvot ja esitellään simulaation asetukset. Yhdeksännessä luvussa esitellään tähän työhön valitut simulointitapaukset. Viimeisessä luvussa tarkastellaan simuloinnista saatuja tuloksia ja pohditaan tuloksien luotettavuutta.

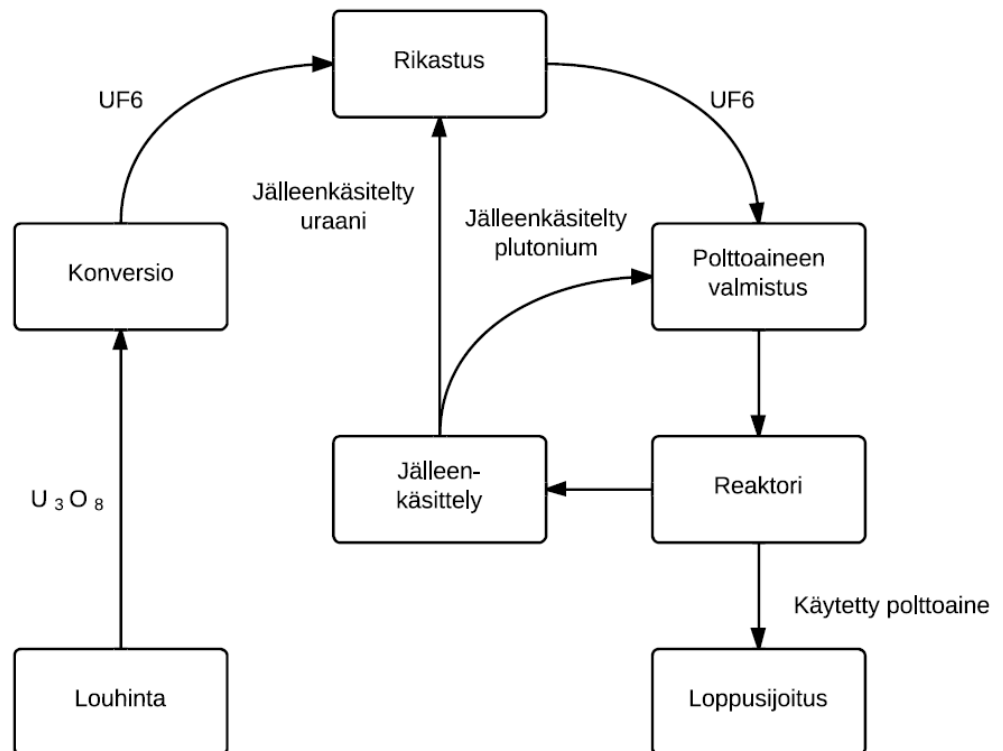
1.4 Käytetty taustamateriaali ja tutkimukset

Uraaniheksafluoridin kemiallisista ja fysikaalisista ominaisuuksista on tehty kattavia tutkimuksia jo 1940-luvulta lähtien. DeWitt on esittänyt tutkimustuloksia uraaniheksafluoridin aineominaisuuksien lämpötilariippuvuudesta teoksessaan ”Uranium hexafluoride: A survey of the physico-chemical properties” (DeWitt, 1960, s. 5). Tutkimusta on käytetty pohjana 1994 julkaistussa tutkielmassa, jossa esitetään kattavat korrelaatiot kaikille uraaniheksafluoridin aineominaisuuksille laajalle lämpötila- ja painealueelle. CFD-mallissa käytetyt aineominaisuudet perustuvat tämän teoksen tuloksiin.

Uraaniheksafluoridin käyttäytymistä lämmitetyssä tai jäädytetyssä sylinterissä ei ole tutkittu tai tutkimuksista ei ole julkista materiaalia saatavilla. Simuloinnin tuoksi ei ole saatavilla myöskään mittaustuloksia. Mallin realistisuus jääkin tässä työssä analyyttisen ratkaisun antamien sulamisaikojen ja keskimääräisen lämmitystehon vertailun varaan.

2 POLTTOAINEKIERTO

Ydinvoimaloissa käytettävä polttoaine on peräisin kallioperän uraanimalmista. Malmi sisältää halkeavaa uraani-isotooppia (U-235), joka rikastetaan kevytvesireaktorien vaatimaan 2-5-prosentin pitoisuuteen. Valmis rikaste puristetaan polttoainepelleteiksi. Käytetty polttoaine voidaan loppusijoittaa käyttäen avointa polttoainekiertoa tai käyttää hyväksi uuden ydinpolttoaineen valmistuksessa soveltaen suljettua polttoainekiertoa (Stuk, 2010). Uraanin polttoainekierto on esitetty kuvassa 1.



Kuva 1. Polttoainekierto (Cochran & Tsoulfanidis, 1992, s. 14)

2.1 Louhinta

Uraanimalmi on noin 500-kertaa yleisempää kuin kulta ja yhtä yleistä kuin tina. Uraanimalmia esiintyy useimmissa kivilajeissa, maaperässä, joissa ja merivedessä. Uraania louhitaan maanpäällisillä avolouhoksilla, maanalaisissa kaivoksissa tai liuotukseen perustuvalla menetelmällä (World Nuclear Association, 2012b). Luonnonuraani sisältää noin 99,3 % uraanin 238-isotooppia, 0,7 % uraanin 235-isotooppia ja pieniä määriä uraanin 234-isotooppia. ^{235}U :n atomeilla on suuri todennäköisyys fission neutronikaappauksen jälkeen. (IAEA, 2009, s. 11)

Avointa louhintatekniikkaa käytetään kun uraanesiintymä on korkeintaan 200–300 m syvyydellä. Maanalaisia kaivoksia perustetaan jos esiintymä on tätä syvemmällä. Uraanin louhinta suoritetaan kuten minkä tahansa mineraalin louhinta. Malmiesiintymään kaivetaan tunneleita ja louhittu kiviaines tuodaan maan pinnalle jatkokäsiteltäväksi (Cochran & Tsoulfanidis, 1992, s. 68-69). Kolmas vaihtoehto uraanin louhimiseen on niin sanottu ISL-menetelmä (In Situ Leach). Menetelmä perustuu uraanin liuotukseen kiintoaineesta eikä varsinaista louhintaa tarvita. ISL-menetelmässä käytetään liuottimena paikallista pohjavettä, johon lisätään hapetinta ja esimerkiksi rikkihappoa. Liuos pumpataan huokoisen maa-aineksen läpi ja maaperän uraanioksidi liukenee seokseen. Maanpinnalla uraani otetaan talteen. (World Nuclear Association, 2012a)

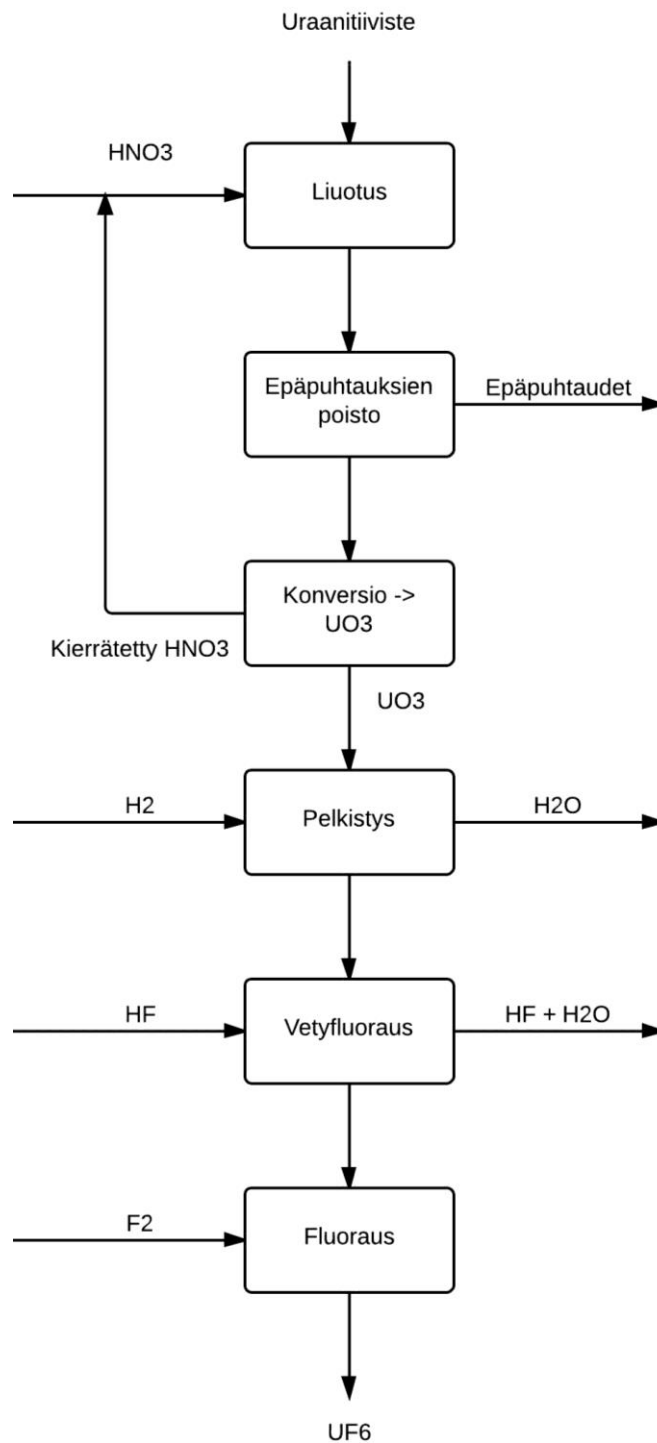
Louhittu uraanioksidi käsitellään yleensä kaivoksen yhteydessä sijaitsevassa käsitelylaitoksessa tiivistetyksi rikasteeksi (U_3O_8). Uraanioksidi jauhetaan tasaiseksi jauheeksi, josta poistetaan suurin osa orgaanisesta aineesta. Jauheesta erotetaan uraani liuottamalla se esimerkiksi rikkihappoon. Uraanin ja rikkihapon seoksesta erotetaan uraani ioninvaihtomenetelmällä tai uuttamalla. ”Yellow cakena” tunnettu lopputuote sisältää noin 80 % uraanioksidia ja 20 % happea. Se pakataan terästyntyneisiin jatkokäsittelyä varten. (Cochran & Tsoulfanidis, 1992, s. 36)

2.2 UF₆ prosessointi (konversio)

Kaupalliset kevytvesireaktorit eivät suoraan voi käyttää louhittua urania polttoaineena matalan ²³⁵U-isotoopin pitoisuuden takia. Louhokselta peräisin oleva uraanioksiditiiviste täytyy muuttua uraaniheksafluoridiksi ennen väkevöintiä. Tämä voidaan tehdä joko niin kutsutulla kuivalla tai märällä tekniikalla. Uraanin epäpuhtauksia poistetaan prosessin joka vaiheessa. Kaupallisia uraaniheksafluoridin käsittelylaitoksia on Yhdysvalloissa, Kanadassa, Ranskassa, Iso-Britanniassa, Venäjällä ja Kiinassa. (World Nuclear Association, 2013a)

Kuiva ja märkä konversioprosessi eroavat toisistaan ainoastaan puhdistusmenetelmän osalta. Kuivassa menetelmässä epäpuhtaudet poistetaan prosessin lopuksi UF₆ kaasusta jakotislauksen avulla. Märässä menetelmässä epäpuhtaudet poistetaan liuottimien avulla jo ennen varsinaista konversioprosessia. (Cochran & Tsoulfanidis, 1992, s. 55-57)

Varsinaisessa konversioprosessissa uraanioksidi (U₃O₈) pelkistetään leijukerrosreaktorissa vedyn avulla uraanidioksidiksi (UO₂). Uraanioksidi (UO₂) syötetään uudelleen reaktoriin kaasumaisen vetyfluoridin (HF) kanssa, jolloin reaktiotuotteena syntyy uraanitetrafluoridia (UF₄) sekä vettä (H₂O). Tämän jälkeen uraanitetrafluoridi muutetaan uraaniheksafluoridiksi (UF₆) kaasumaisen fluorin (F₂) avulla. Lauhdutettu UF₆ säilötään ilmatiiviiseen sylinteriin. Konversiossa käytetään juuri uraaniheksafluoridia sen erinomaisten kemiallisten ja fysikaalisten ominaisuuksien takia. Ominaisuuksista lisää luvussa 3.1. (Cochran & Tsoulfanidis, 1992, s. 55-57)

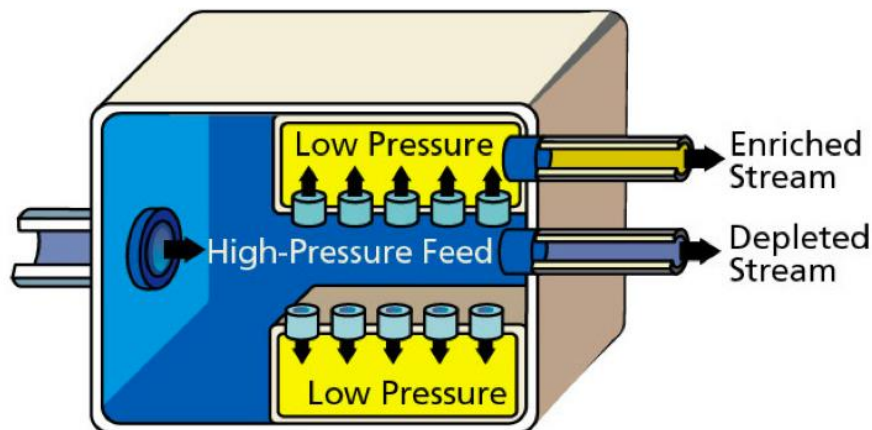


Kuva 2. Konversioprosessi (märkä) (IAEA, 2009, s. 15)

2.3 Uraanin väkevöinti

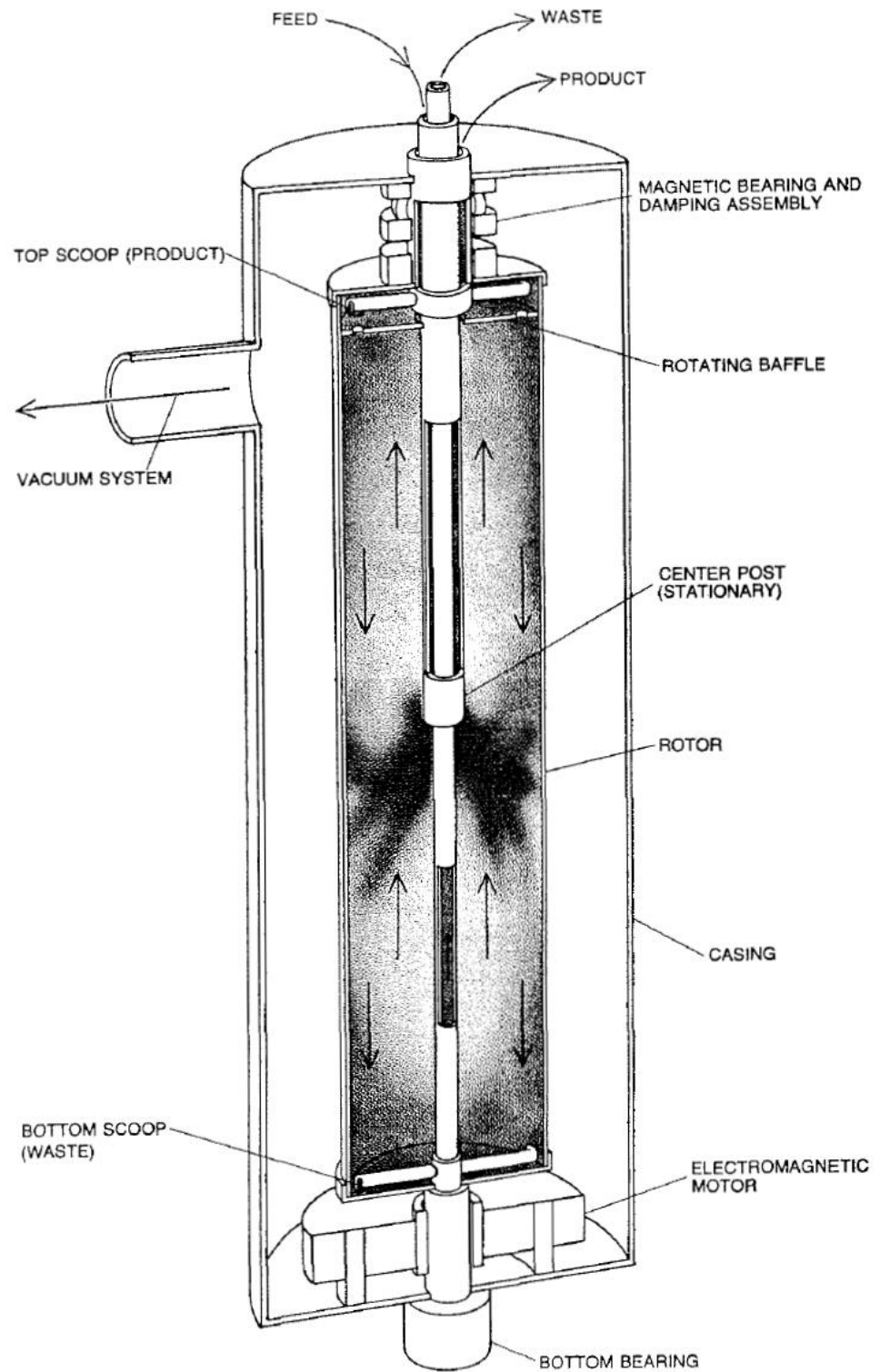
^{235}U on fissiili ja ainoa uraanin isotooppi, jota voidaan käyttää ydinpolttoaineena termisissä ydinreaktoreissa. Raskasvesireaktorit (PHWR) ja kaasujäähdytetyt luonnonuraanireaktorit (Magnox) käyttävät rikastamatonta uraania polttoaineena. Kevytvesireaktorit, kaasujäähdytteiset reaktorit ja vesijäähdytteiset grafiitti-hidasteiset reaktorit (RBMK) vaativat kuitenkin rikastettua uraania toimiakseen. ^{235}U pitoisuus rikastetaan yleensä 2-5 % massaosuuteen. Rikastuksella tarkoitetaan isotooppisuhteiden muuttamista aineessa ja se tehdään yleensä isotooppien erotuksella. Prosessi koostuu useasta rinnakkaisesta ja peräkkäisestä toimenpiteestä. Jokainen osaprosessi pystyy erottamaan ainetta vain pieniä määriä joten peräkkäisiä erotusvaiheita tarvitaan useita. Tuotantomäärää nostetaan lisäämällä samoja osaprosesseja rinnakkain. Käytetyimmät rikastusmenetelmät ovat kaasudiffuusio ja kaasusentrifugi. (IAEA, 2009, s. 16)

Kaasudiffuusion perustana on molekyyliidiffuusio, jonka ansiosta kevyemmät molekyylit saadaan erotettua painavammista membraanikalvon avulla. Kalvon eri puolien välillä vallitsee paine-ero. Tästä seuraa, että nopeammin liikkuvat kevyet ytimet läpäisevät kalvon useammin ja kalvon matalapainepuolelle kertyy enemmän kevyitä ytimiä. Rikastusprosessin tehokkuus on kuitenkin erittäin huono ja prosessi täytyy toistaa useita kertoja ennen kuin haluttu rikastusaste saavutetaan. Tyypillinen kaasudiffuusori kierrättää ainetta jopa tuhansia kertoja. (Cochran & Tsoulfanidis, 1992, s. 57-63)



Kuva 3. Kaasudiffuusion periaate (Wilson, 2012)

Kuvassa 4 on esitetty eräänlaisen modernin kaasusentrifugin toimintaperiaate. Kaasua syötetään tyhjiössä pyörivään sylinteriin sentrifugin yläosasta, jossa on sisäkkäiset putket myös rikastetulle ja köyhdytylle tuotteelle. Sylinteriin tuotu kaasu pyörii lähes samalla nopeudella kuin roottori ja keskipakoisvoiman ansiosta kaasu pakkautuu kohti sylinterin seinämää. Varsinainen rikastus tapahtuu luomalla sylinteriin vastavirtaus. Virtaus saadaan luotua sylinterin alalaidassa sijaitsevan kauhan aiheuttamien aerodynaamisten vuorovaikutusten sekä moottorista syntyvän lämmön vaikutuksen avulla. Virtauksen ansiosta syntyy kierto, jonka seurauksena raskaammat $^{238}\text{UF}_6$ -ytimet kertyvät sentrifugin alaosaan ja kevyemmät $^{235}\text{UF}_6$ -ytimet kulkeutuvat kohti sentrifugin yläosaa. Kaasu kerätään sylinterin laidoissa olevilla kiinteillä kauhoilla. Sylinteri on rakennettu tyhjiön sisään, ettei prosessiin pääse ilmaa. Tällä varmistetaan myös mahdollisimman pieni pyörimiskitka. Kaasusentrifugin energiatehokkuus on kaasudiffuusiota parempi, mutta käsiteltävän kaasun määrä on pienempi. Tämän takia sentrifugeja kytketään rinnan halutun virtauksen saavuttamiseksi. Sentrifugin erottelutarkkuus on myös hieman diffuusiota parempi, mutta peräkkäisiä yksiköitä tarvitaan silti useita. (Krass, et al., 1983, s. 130) Sentrifugin sähkönkulutus on 1/50 diffuusiotekniiikan vaatimasta määrästä. (IAEA, 2009, s. 18)



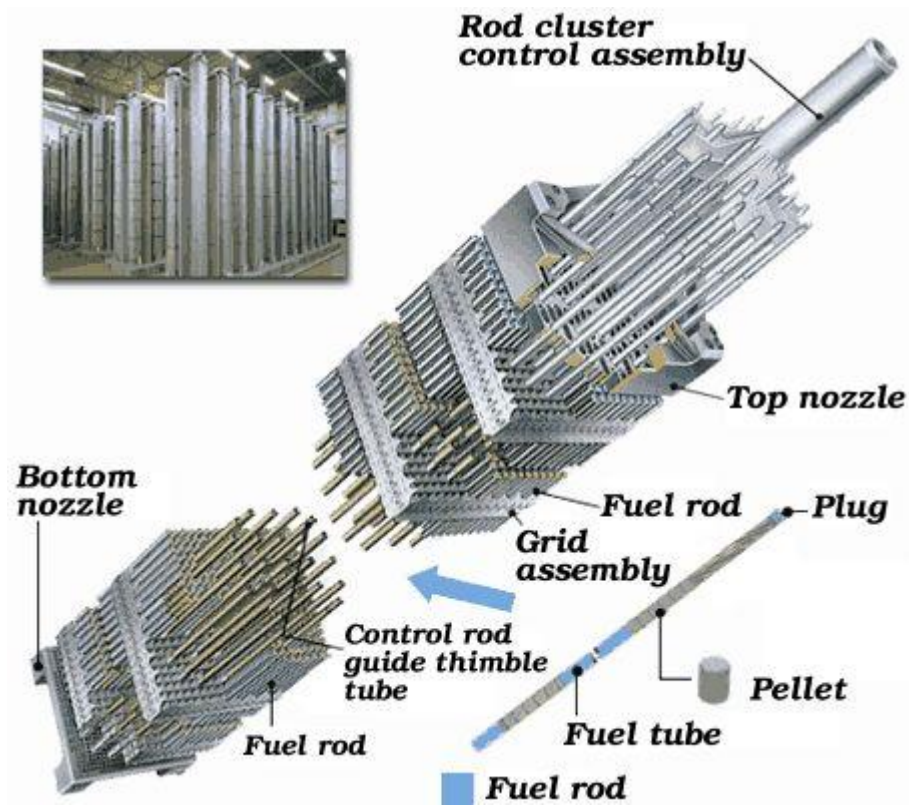
Kuva 4. Kaasuseparifugi (Krass, et al., 1983, s. 131)

Rikastukseen on olemassa myös kehittyneillä olevia menetelmiä. Näitä ovat esimerkiksi kemiallinen erottelu ja aerodynaaminen rikastus. Isotooppierottelumenetelmiä varten on tutkittu myös lasertekniikkaa. Teknologioita ei kuitenkaan ole onnistuttu kaupallistamaan. (IAEA, 2009, s. 18)

2.4 Polttoaine-elementtien valmistus

Polttoaine-elementtien valmistus alkaa rikastusprosessista tulleen uraaniheksafluoridin (UF_6) muuntamisella takaisin uraanioksidijauheeksi (UO_2). Tämä tapahtuu lämmittämällä UF_6 -sylinteriä, jolloin uraaniheksafluoridi höyrystyy. UF_6 :sta erotetaan fluoridi veden tai vesihöyryn avulla jonka jälkeen syntynyt U_3O_8 redusoidaan takaisin uraanioksidiksi (UO_2) kiertouunin ja vedyn avulla. Syntyneeseen jauheeseen lisätään liimaavaa ainetta, jonka jälkeen puuteri voidaan painaa sylinterin muotoisiksi pelleteiksi. Polttoainepelletit sintrataan korkeassa lämpötilassa, jonka jälkeen ne ovat valmiita polttoaine-elementtien kokoamista varten. Pellettien koot vaihtelevat käytettävän reaktorin polttoainenuvaatimusten mukaan. (Cochran & Tsoulfanidis, 1992, s. 84-86)

Polttoaine-elementtien koot, muodot ja mallit vaihtelevat sen mukaan minkälaiseen reaktoriin ne on suunniteltu käytettäväksi. Valmis polttoaine-elementti koostuu polttoainesauvoista, joihin polttoainepelletit on sijoitettu. Kuvassa 5 on esitetty polttoaine-elementin rakenne. (IAEA, 2009, s. 28)



Kuva 5. Polttoaine-elementti (World Nuclear, 2013b)

2.5 Polttoaineen käyttö

Ydinreaktorin sydän koostuu useasta sadasta polttoaine-elementistä. Reaktori, joka tuottaa 1000 MWe sisältää noin 75 tonnia rikastettua uraania. Polttoaineessa tapahtuu jatkuvaa lämmöntuottoa uraanissa tapahtuvien fission seurauksena. Polttoaineesta lämpö siirtyy höyrystyvään jäähdytteeseen, jolla pyöritetään turbiinia. Turbiini pyörittää generaattoria, josta saadaan sähkövirtaa. Reaktorisydämeistä vaihdetaan noin kolmannes polttoaineesta uuteen noin vuoden välein. (World Nuclear Association, 2012b)

2.6 Välivarastointi

Reaktorista poistettua käytettyä polttoainetta säilytetään käytetyn polttoaineen altaassa, joka sijaitsee yleensä reaktorin yhteydessä. Polttoainesauvat säteilevät voimakkaasti, joten säteilytasojen annetaan laskea ennen polttoaineen jatkokäsittelyä. Sauvat tuottavat myös huomattavasti jälkilämpöä, joten käytetyn polttoaineen altaat ovat jäähdytettävä. Käytettyä polttoainetta säilötään yleensä useita

vuosia kyseisissä altaissa. Säteilytasojen laskettua tarpeeksi polttoaine voidaan joko jälleen käsitellä uudelleenkäytettäväksi tai loppusijoittaa. (World Nuclear Association, 2012b)

2.7 Jälleenkäsittely

Suljettu polttoainekierto päättyy jälleenkäsittelyyn. Käytetty polttoaine sisältää edelleen 96 % alkuperäisestä uraanista, josta fissiilin ^{235}U osuus on laskenut alle 1 %. Polttoaineessa on noin 3 % reaktorissa syntyneitä fissiotuotteita ja 1 % palamattomaksi jäänyttä plutoniumia. Jälleenkäsittelylaitoksessa nämä fissiotuotteet ja plutonium erotellaan uraanista. Erotettu uraani voidaan käyttää uudestaan polttoaineen rikastamiseen. Plutoniumista voidaan valmistaa MOX-polttoainetta (Mixed oxide fuel), joka sisältää sekä uraanin että plutoniumin oksideja. MOX-polttoainetta käytävissä reaktoreissa plutonium korvaa normaalissa polttoaineessa käytetyn ^{235}U :n. (World Nuclear Association, 2012b)

2.8 Loppusijoitus

Polttoainekierto päättyy korkea-aktiivisen jätteen loppusijoitukseen. Korkea-aktiivinen jäte tai käytetty polttoaine voidaan pakata esimerkiksi kaasulla täytettyihin suljettuihin metallisäiliöihin. Säiliötä voidaan käyttää jätteen kuljetukseen ja säilömiseen. Korkea-aktiivisen jätteen säiliöt säilötään syvälle maan alle paikkaan, joka on geologisesti vakaa. Säiliöt eristetään useilla rakennetuilla ja luonnollisilla leviämisesteillä kuten betonilla, kalliolla ja savella. Tärkeintä on estää pohjaveden virtauksen pääseminen säiliöiden läheisyyteen, ettei vesi aiheuta säiliöihin korroosiota. (World Nuclear Association, 2010)

3 URAANIHEKSAFLUORIDI

3.1 Yleistä

Uraaniheksafluoridi on heksavalentin uraanin ja fluoridin yhdiste. Sitä käytetään sen sopivien kemiallisten ominaisuuksien takia. Sen kaasumainen olomuoto sopii rikastukseen, jatkokäsittelyyn polttoaine-elementtien valmistuksessa tai UF_6 :n siirrossa sylinteristä toiseen. Nestemäisenä UF_6 soveltuu tehokkaaseen sylintereiden täyttöön. Uraaniheksafluoridin kiinteä olomuoto sopii sen varastointiin. Aineen jokainen olomuoto on saavutettavissa suhteellisen pienillä lämpötiloilla ja paineilla. Toinen syy UF_6 :n käyttöön se, että fluorilla on vain yksi luonnossa esiintyvä isotooppi. Tämän takia rikastuslaitoksen koko isotooppierotuskyky on kevyempien uraanin isotooppien käytettävissä. (USEC, 2006, s. 11)

3.2 Kemialliset ominaisuudet

Kiinteässä olomuodossa UF_6 on lähes valkoista ja tiheää kiteistä jauhetta. Jauheen ulkomuoto riippuu siitä onko UF_6 jäähtynyt nestemäisestä olomuodosta vai härmistynyt suoraan kaasusta kiinteäksi. Jäähtynyt UF_6 näyttää epäsäännöllisiltä kiteiltä, jotka muistuttavat karkeaa suolaa. Härmistynyt UF_6 on muodotonta massaa. Nestemäinen UF_6 on väritöntä ja painavaa ja sillä on matala viskositeetti. Nestemäisen olomuoto ei esiinny ilmakehän paineessa. Kaasumaisena UF_6 on väritöntä. (USEC, 2006, s. 11)

Uraaniheksafluoridi ei reagoi hapen, typen, hiilidioksidin tai kuivan ilman kanssa. Se kuitenkin liukenee näihin kaasuihin nestemäisessä olomuodossa. Kaasumainen UF_6 reagoi voimakkaasti vesihöyryn kanssa muodostaen myrkyllistä vetyfluoridia. Reaktiossa syntyy valkoinen pilvi tai sumua riippuen lämpötilasta, jossa reaktio tapahtuu. Myös kiinteä UF_6 reagoi vesihöyryn kanssa, mutta reaktio on huomattavasti hitaampi aineen pintaan syntyvän uraanioksi-fluoridikerroksen takia. Tästä syystä UF_6 :a käsitellään ilmatiiviissä sylintereissä. (USEC, 2006, s. 11-12)

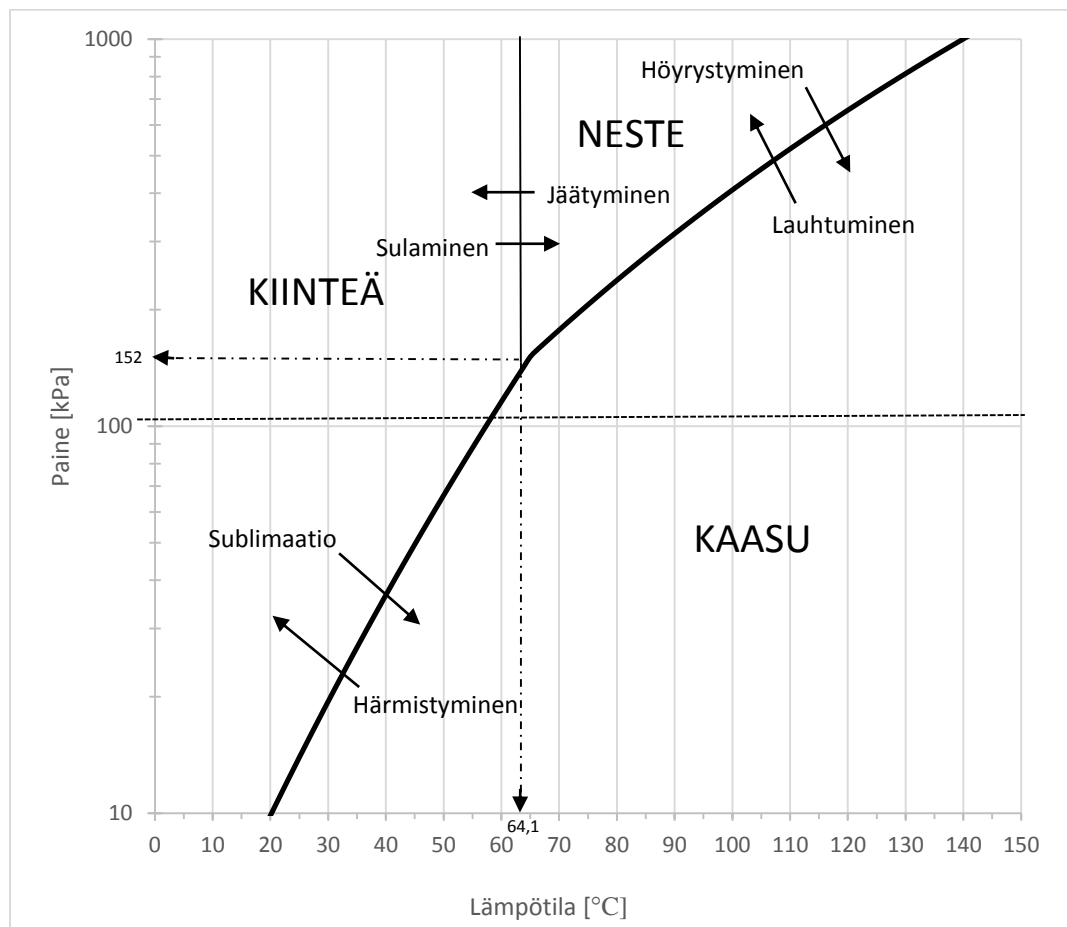
UF_6 reagoi useimpien metallien kanssa muodostaen kyseisen metallin fluoridia sekä uraanifluoridia. UF_6 :n käsittelylaitteissa käytetään yleensä nikkeliä, nikkeli-päällysteistä terästä, monelia, kuparia ja joitakin alumiiniseoksia. Kuljetus- ja säi-

lytys sylintereissä käytetään terästä vaikka UF_6 syövyttää sitä, koska kalliimpia metalleja ei taloudellisista syistä kannata käyttää. UF_6 reagoi voimakkaasti myös hiilivetyjen kanssa. Kaasumaisessa muodossaan reaktiossa muodostuu uraanihiiliyhdisteitä. Nestemäisenä reaktio on voimakkaampi ja voi aiheuttaa räjähdyksen sylinterissä. (USEC, 2006, s. 12)

3.3 Fysikaaliset ominaisuudet

Uraaniheksafluoridin kolmoispiste on $64,1\text{ }^\circ\text{C}$ 152 kPa paineessa. Kyseisessä pisteessä aineen kaikki olomuodot (kiinteä, neste ja kaasu) esiintyvät tasapainossa yhtä aikaa. Jos paine tai lämpötila kasvaa esiintyy vain nestettä ja kaasua. Jos taas paine tai lämpötila laskee, esiintyy vain kiinteää ja kaasua. Kun kiinteää uraaniheksafluoridia lämmitetään suljetussa sylinterissä, kiinteä massa absorboi lämpöä ja osa siitä sublimoituu. Sublimoituminen jatkuu kolmoispisteen 152 kPa paineeseen ja $64,1\text{ }^\circ\text{C}$ asti. Tämän jälkeen kiinteä UF_6 alkaa sulaa nesteeksi kunnes kaikki UF_6 on höyrystynyt. Kuvassa 6 on esitetty uraaniheksafluoridin käyttäytyminen faasidiagrammin avulla. (USEC, 2006, s. 15)

Uraaniheksafluoridin tiheys pienenee huomattavasti lämpötilan noustessa. Kun UF_6 vaihtaa olomuotoaan kiinteästä nesteeksi, sen tiheys pienenee jopa 40 %. Tästä seuraava tilavuuden kasvu asettaa rajoituksia käsittelyjärjestelmiin ja järjestelyihin. Neste jatkaa edelleen laajentumistaan kun sitä lämmitetään. Näiden tietojen perusteella on tärkeää määrittää kuinka paljon uraaniheksafluoridia voidaan laittaa sylinteriin. Esimerkiksi, jos säiliö täytetään kiinteällä UF_6 :lla härmistäen sitä suoraan kaasumaisesta UF_6 :sta, säiliöön on mahdollista laittaa enemmän ainetta kuin sinne nestemäisenä mahtuu. Jos tällainen sylinteri lämmitettäisiin, se täyttyisi pintaansa asti kunnes paine kasvaisi niin suureksi että säiliö repeäisi. Samanlainen repeämisriski esiintyy, jos UF_6 jäähtyy ja tukkii prosessilinjan. Linjan lämmittäminen aiheuttaa kiinteän aineksen äkillisen laajenemisen ja jopa nesteytymisen, josta voi seurata jopa putkiston halkeaminen. (USEC, 2006, s. 15)



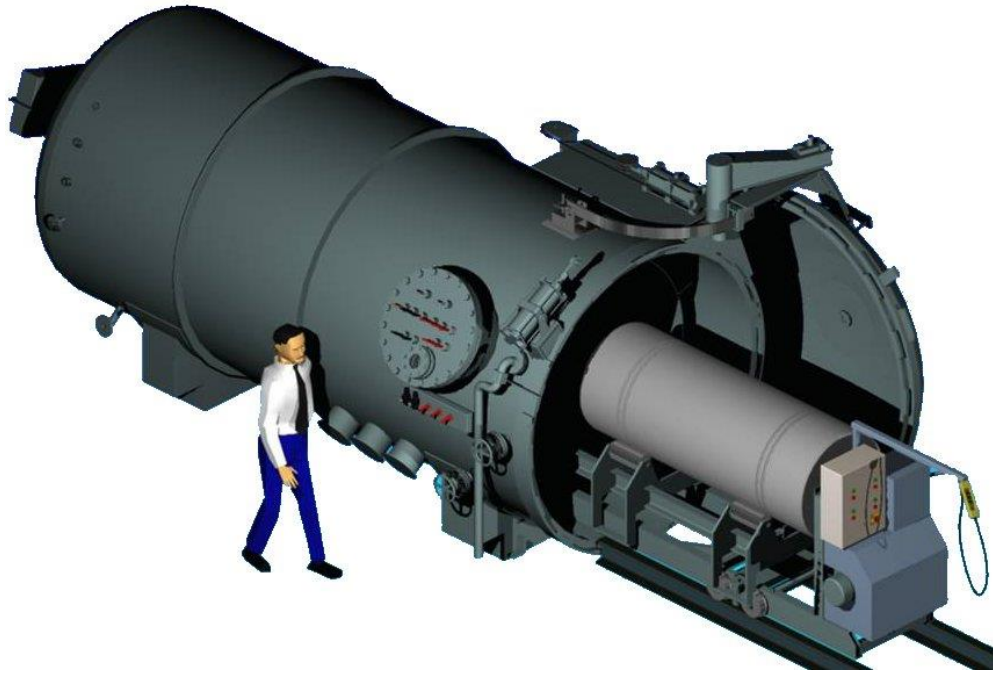
Kuva 6. UF_6 :n faasidiagrammi

4 AUTOKLAAVIT

Autoklaavilla tarkoitetaan ilmatiivistä painesäiliötä, jonka sisällä vallitsee ympäröivää ilmaa suurempi lämpötila. Autoklaaveja on olemassa monenlaisen eri käyttöön. Komposiittiautoklaavit on suunniteltu avaruusteollisuuden käyttöön, jossa tuotetaan korkealaatuisia komposiittikomponentteja. Lasiteollisuudessa käytetään autoklaavia lasin laminoimiseen, jolloin lasista saadaan erittäin kestävää turvalasia. Autoklaaveja on valjastettu myös kumi- ja muoviteollisuuden käyttöön. Tällaisilla vulkanisointiautoklaaveilla käsitellään muun muassa luonnonkumia, silikonia tai renkaita. Autoklaaveja on saatavilla myös valumuoteissa käytettävän vahamallin poistoon varsinaisesta muotista. Autoklaavilla voidaan myös tehdä ilmattua betonia, joka on tavallista betonia huomattavasti lämpöä eristävämpää. Autoklaavia käytetään myös lääketeollisuudessa instrumenttien sterilointiin. Tässä työssä keskitytään autoklaavityyppiin, jota käytetään uraaniheksafluoridin käsittelyssä. (ASC process systems, 2013)

4.1 Autoklaavityypit

Vaakatasossa olevaa autoklaavia käytetään nestemäisen UF₆:n näytteenotossa tai kaasumaisen UF₆:n siirtämiseen rikastusprosessiin, polttoaineen valmistukseen ja fluorin talteenottoon. Autoklaavissa lämmitetään ilmaa, josta lämpö siirtyy sylinteriin. Käyttölämpötila ja paine riippuvat käytetystä sylinteristä. Sylinterien tilavuudet vaihtelevat 0,5 m³ ja 3,94 m³ välillä. Näytteenottoautoklaavissa kaikki nestemäisen uraaniheksafluoridin kanssa kosketuksissa olevat komponentit ovat autoklaavin sisällä. Autoklaavi on rakennettu korkealuokkaisesta metalliseoksesta. (Platom Oy, 2011, s. 5)



Kuva 7. Vaakatasossa oleva autoklaavi. (Platom Oy, 2013, s. 21)

Taulukossa 1 on esitetty tyypilliset toiminta-arvot uraaniheksafluoridin käsittely-autoklaaville.

Taulukko 1. Platom Oy:n vaakatason autoklaavin toiminta-arvot. (Platom Oy, 2013, s. 21)

Suunnitteluarvot	
Lämmitysväliaine	ilma
Suunnittelupaine	8 bar-tyhjiö
Suunnittelulämpötila	130 °C
Käyttölämpötila T_{\max}	110 °C
Sylinterien halkaisijat	48", 30"

Pystyautoklaavit on suunniteltu UF_6 :n siirtoihin. Siirto tapahtuu autoklaavin sisällä olevasta uraaniheksafluoridisylinteristä rikastusprosessiin tai sylinteristä toiseen. Pystyautoklaavi eroaa vaaka-autoklaavista siinä, että UF_6 sylinteri siirretään autoklaaviin nosturilla. Pystyautoklaavin toiminta-arvot ovat samat kuin vaaka-autoklaavissa, mutta käytetyt sylinterit ovat $2,5 \text{ m}^3$ kokoisia. (Platom Oy, 2011, s. 5)

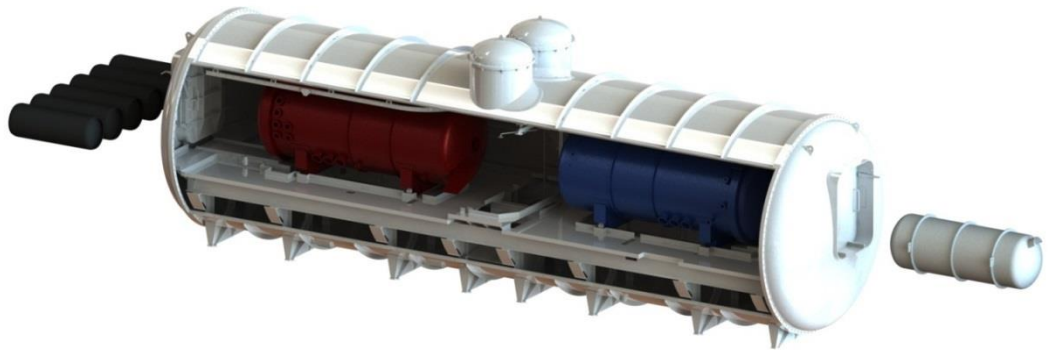


Kuva 8. Pystyautoklaavi. (Platom Oy, 2013, s. 22)

Platom Oy valmistaa myös uraaniheksafluoridin siirtoautoklaaveja. Siirto voi tapahtua sylinterimallista toiseen tai vanhasta sylinteristä uuteen. Kuvissa 9 ja 10 on esitetty kaksi erimallista siirtoautoklaavia. (Platom Oy, 2013, s. 20)



Kuva 9. Siirtoautoklaavi. (Platom Oy, 2013, s. 20)



Kuva 10. Siirtoautoklaavi. (Platom Oy, 2013, s. 20)

Autoklaaveissa on myös sisäänrakennettu jäähdytysjärjestelmä. Järjestelmän tarkoituksena on nopeuttaa uraaniheksafluoridin kiinteytymistä. Jäähdytysjärjestelmän absorboima lämpö siirretään edelleen laitoksen vesijäähdytysjärjestelmään lämmönsiirtimien kautta. (Platom Oy, 2011, s. 6)

4.2 UF₆-sylinteri

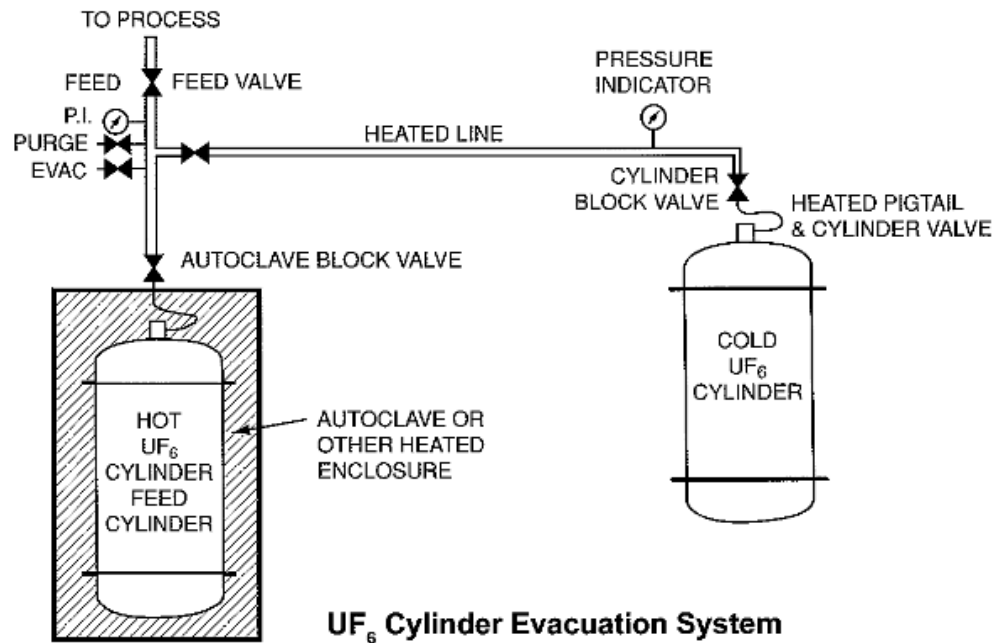
Sylintereitä on erilaisia riippuen niiden käyttötarkoituksesta. Pienimmät säiliöt on tarkoitettu näytteenottoa ja näytteiden siirtämistä varten. Suuremmat säiliöt on suunniteltu UF₆:n säilytykseen tai siirtoon. Taulukossa 2 on esitetty kaikki käytetyt säiliötyypit maailmassa. (USEC, 2006, s. 7)

Taulukko 2. UF₆-sylintereiden mallit ja koot. (USEC, 2006, s. 6)

Malli	Halkaisija (tuumaa)	Materi- aali	Minimitila- vuus (l)	Sylinte- rin massa (kg)	Rikastus- aste U-235 (%)	UF ₆ määrä (kg)
1S	1,5	Nikkeli	0,15	0,79	100	0,45
2S	0,5	Nikkeli	0,74	1,91	100	2,22
5A	5	Nikkeli	8,04	25	100	24,95
5B	5	Nikkeli	8,04	25	100	24,95
8A	8	Monel	37,35	54	12,5	115,67
12A	12	Nikkeli	67,4	84	5,0	208,7
12B	12	Monel	67,4	84	5,0	208,7
30B	30	Teräs	736	635	5,0	2277
48A	48	Teräs	3840	2041	4,5	9539
48X	48	Teräs	3084	2041	4,5	9539
48F	48	Teräs	3964	2356	4,5	12260
48G	48	Teräs	3936	1179	1,0	12174
48Y	48	Teräs	4041	2359	4,5	12501
48H	48	Teräs	3964	1438	1,0	12261
48H	48	Teräs	3964	1438	1,0	12261
480	48	Teräs	3964	1386	1,0	12261

4.2.1 Sylinterin tyhjennys

Kun UF₆-sylinteri halutaan tyhjentää, sitä täytyy lämmittää autoklaavin sisällä halutun faasimuutoksen saavuttamiseksi. Ennen lämmitystä sylinterin paine on pienempi kuin ilmakehän paine. Tällöin sylinteri tarkastetaan pintapuolisesti säröjen, kolhujen ja venttiilin eheyden varmistamiseksi. Ennen lämmitystä sylinterin massa mitataan, koska ylitäytettyä sylinteriä ei ole turvallista lämmittää. Lämmitäessä täytyy ottaa huomioon sylinterin korkein sallittu lämpötila ja varmistuttava siitä, ettei sitä missään tapauksessa ylitetä. Kuvassa 11 on esitetty UF₆ sylinterin tyhjennysjärjestelmä. Kylmää sylinteriä käytetään ylijäämäuraaniheksafluoridin poistoon syöttösylinteristä (USEC, 2006, s. 45)



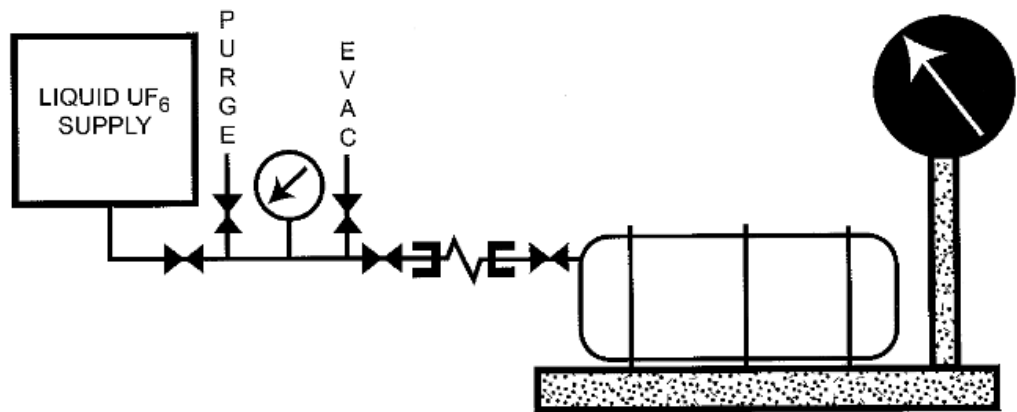
Kuva 11. UF₆-sylinterin tyhjennysjärjestelmä. (USEC, 2006, s. 49)

Sylinteri liitetään prosessiin sylinterissä olevan venttiilin avulla. Venttiiliin tuleva liitos on joustava joka suuntaan, koska sylinteri ei ole koskaan täysin suorassa. Ennen lämmitystä kiinteä UF₆ vie noin 60 % säiliön tilavuudesta. Loput 40 % koostuu UF₆ kaasusta sekä epäpuhtauksista kuten vetyfluoridista, jäähdytteestä ja ilmasta. Epäpuhtaudet voidaan havaita mittaamalla kaasufaasin painetta ja vertaamalla sitä UF₆:n faasidiagrammin paineeseen. Koska epäpuhtauksilla on suurempi höyrynpaine kuin uraaniheksafluoridilla, epäpuhtaudet voidaan poistaa päästämällä sylinteristä kaasua ulos. Jos epäpuhtaudet jäävät sylinteriin lämmityksen ajaksi, voi sylinterin sisäinen paine kasvaa suuremmaksi kuin sylinterin suunniteltu paine. (USEC, 2006, s. 45-47)

Säiliön tyhjennyksen jälkeen sylinteristä voidaan poistaa sinne jäänyt UF₆ käyttämällä hyödyksi uraaniheksafluoridin höyrynpaineominaisuuksia. Kun kuuma ja kylmä UF₆-sylinteri liitetään yhteen, alkaa kuumen sylinterin kaasumainen UF₆ virrata kylmään paineistamattomaan sylinteriin ja härmistyy siellä suoraan kiinteäksi. Tämä aiheuttaa säiliössä paineen laskun, joten jatkuva virtaus kuumasta säiliöstä kylmään pysyy yllä. Ylijäämän poisto tehdään sylintereille, jotka poistetaan käytöstä tai halutaan tyhjentää täysin muuhun käyttöön. (USEC, 2006, s. 49)

4.2.2 Sylinterin täyttö

Sylinterin täyttöjärjestelmään kuuluu nestemäisen uraaniheksafluoridin syöttölinja, joka on liitetty lämmitettyyn linjastoon, jossa on puhdistus-, paineenpäästö- ja paineenmittausjärjestelmät. Sylinteri on liitetty järjestelmään sylinterissä olevan venttiilin avulla. Koko järjestelmän lämpötilaa on tarkkailtava jatkuvasti, koska nestemäinen UF_6 vaihtaa herkästi olomuotoaan. Kun syöttöventtiili avataan, paine-ero sylinterin ja syöttöjärjestelmän välillä tasoittuu. Alussa sylinteriin menevä nestemäinen UF_6 vaihtaa olomuotoaan kaasun ja kiinteän sekoitukseksi, mutta paineen kasvaessa sylinterissä on vain nestemäistä uraaniheksafluoridia. Syötön aikana sylinterin sisäinen paine saattaa kasvaa korkeammaksi kuin syöttöpaine. Tällöin sylinteristä päästetään osa ilman ja kaasumaisen UF_6 yhdistelmästä ulos paineensäätökanavaa pitkin, jolloin täyttöä voidaan taas jatkaa. Sylinterin massaa tarkkaillaan koko syötön ajan vaa'an avulla. (USEC, 2006, s. 52)



UF_6 Cylinder Filling System

Kuva 12. UF_6 sylinterin täyttöjärjestelmä (USEC, 2006, s. 51)

Sylinterin täytössä täytyy ottaa huomioon se, että UF_6 laajenee kiinteästä nestemäiseen olomuotoon muuttuessaan noin 53 %. Myös syöttölämpötilassa ja maksimilämpötilassa olevan UF_6 :n tiheyden välillä on suuri ero. Esimerkiksi sylinteri, jonka kuljetuskapasiteetti on 12,2 tonnia uraaniheksafluoridia kylmänä, pystytään

täyttämään täyttölämpötilassa 71 °C jopa 14,2 tonniin asti. Kun sylinteri lämmitetään siirtolämpötiloihin yli 71 °C, säiliön sisäinen paine kasvaisi liian korkeaksi ja sylinteri halkeaisi. Tätä varten jokaiselle sylinterille on määritelty vähimmäistilavuus, joka mitataan valmistusvaiheessa täyttämällä säiliö noin 15 asteisella vedellä. Säiliön tilavuus saadaan jakamalla tämä vesimäärä veden tiheydellä. Vähimmäistilavuuteen jätetään 5 % turvavara. Sylinteriin mahtuva UF₆ arvioidaan 121 °C nestemäisen uraaniheksafluoridin tiheyden avulla kertomalla se minimitilavuudella. (USEC, 2006, s. 53-54)

4.2.3 Näytteenotto

Hyväksyttävä näyte uraaniheksafluoridista saadaan nestemäisestä olomuodosta. Näytteen pitää olla isotooppisesti ja kemiallisesti homogeeninen. Tämä saavutetaan lämmittämällä sylinteriä tarpeeksi kauan, jolloin nesteen virtaukset itsessään homogenisoivat aineksen. Kemiallinen homogeenisuus taataan sillä, että epäpuhtaudet poistetaan sylinteristä. Tämä tehdään samalla tavalla kuten sylinterin tyhjennyksessä. Suurimmista sylintereistä näyte otetaan säiliön ollessa vaakasennossa autoklaavin sisällä. Tällöin sylinteri asetetaan niin, että nesteen taso on venttiilin kohdalla. Koko prosessin lämpötilaa tarkkaillaan koko lämmityksen ja näytteenoton ajan, jotta varmistetaan UF₆:n pysyminen nesteenä. Ennen näytteenottoa näytesylinterin paine lasketaan niin alas kuin mahdollista. Tämän jälkeen näytteenottoventtiili avataan ja sylinteri täytetään. Kun näytesylinteri on täysi, jäähdytetään se nestemäisen typen avulla jolloin ylijäämäkaasutkin pääsevät näytteen mukaan. Jäähdytystä jatketaan kunnes sylinterin paine on haluttu. Tyypin 1S ja 2S sylintereitä käytetään näytteenottoon. Tyypin 2S sylintereitä ja P-10 putkia käytetään näytteiden siirroissa. P-10 putkeen mahtuu nimensä mukaisesti 10 gramman näyte ja putki on tehty polyuretaanista. (USEC, 2006, s. 59-61)

4.2.4 UF₆:n kuljetukset

Uraaniheksafluoridia alettiin kuljettaa 1960-luvun alusta alkaen. Kuljetusten turvallisuus varmistetaan kansainvälisesti hyväksytyillä turvallisuussäädöksillä. Säädösten ansiosta sattuneiden kuljetusonnettomuuksien terveys- ja ympäristövaikutukset ovat olleet merkityksettömiä. Rikastamaton UF₆ kuljetetaan suuressa säili-

össä, johon mahtuu 12,5 tonnia uraaniheksafluoridia. Rikastettua UF₆ kuljetetaan pienemmissä sylintereissä, joihin saadaan mahtumaan 2,3 tonnia. Kuljetuksen ajaksi säiliön paine lasketaan alipaineeseen, jolloin mahdolliset vuodot saadaan minimoitua. (Urenco, 2003, s. 17)

Kuljetuksessa riskinä on säiliön rikkoutuminen, koska UF₆ on pidettävä jatkuvasti ilmatiiviissä olosuhteissa. Rikkoutuneesta säiliöstä vuotava UF₆ reagoi ilmankosteuden kanssa muodostaen erittäin syövyttävää fluorivetyä. Veden kanssa reagoidessaan fluorivety muodostaa happoa, joka aiheuttaa palovammoja. Vuodot on kuitenkin helppo paikantaa, koska fluorivety muodostaa helposti havaittavaa valkoista sumua jo ennen kuin se on vaarallista ihmiselle. Radioaktiivisuudeltaan UF₆ ei muodosta käytännössä minkäänlaista vaaraa. Raskasmetallimyrkyllisyydeltään UF₆ on yhtä myrkyllinen kuin mikä tahansa raskasmetalli ja on vaarallista vasta kehon sisäisesti nautittuna. (Urenco, 2003, s. 17)

UF₆-kuljetusten riskit ovat pienempiä kuin muiden syövyttävien kemikaalien kuljetukset. Uraaniheksafluoridi ei itsessään ole syttyvää tai syövyttävää eikä vuotessaan reagoi räjähdysmäisesti. Tämän ansiosta vuoto on helposti paikattavissa ennen suurempaa päästöä. Myös tulipalon sattuessa UF₆-säiliö kestää 800°C lämpötilaa 25 minuutin ajan. (Urenco, 2003, s. 18)

4.2.5 UF₆:n säilytys

Pitkäaikaisessa säilytyksessä oleva uraaniheksafluoridi on rikastuslaitoksilta peräisin olevaa köyhdytettyä ainetta. Esimerkiksi Yhdysvalloissa säilytetään yli 57 000 UF₆-sylinteriä, joissa on noin 700 000 tonnia uraaniheksafluoridia. Suurin osa sylintereistä on suurikokoisia, joihin kuhunkin mahtuu 12 tonnia uraaniheksafluoridia. Sylinterit täytetään noin 95 % kapasiteettiin ja annetaan jäähtyä muutaman päivän ajan. Tällöin UF₆ kiinteytyy ja vie noin 60 % säiliön tilavuudesta. Osa aineesta on kaasuna säiliön yläosassa. (Argonne National Laboratory, 2000)



Kuva 13. Uusi UF₆-säilytys sylinteri. (Argonne National Laboratory, 2000)

Sylintereitä säilytetään avonaisilla pihilla rikastamolaitoksen yhteydessä. Säilytyspihat voivat olla jopa 40 hehtaarin kokoisia. Sylinterit pinotaan päällekkäin kahden sylinterin pinoihin. Ongelmana säilytyksessä on sylinterin korrosio. Ikääntyvissä säiliöissä on havaittu vuotoja, jotka ovat aiheutuneet säiliön huonosta käsittelystä johtuvasta korroosiosta tai hitsausseamien ruostumisesta. Jos sylinterissä havaitaan vuoto, se korjataan paikan päällä tai sylinterissä oleva UF₆ siirretään uuteen säiliöön. (Argonne National Laboratory, 2000)



Kuva 14. UF₆ säilytyspiha. (Argonne National Laboratory, 2000)

Uraaniheksafluoridin säilytys edellä mainitulla tavalla ei kuitenkaan ole lopullinen säilytysmuoto. Yhdysvalloissa on päätetty muuttaa sylintereissä oleva UF₆ joko takaisin uraanioksideiksi tai uraanimetalleiksi. Prosessi on kallis ja hidas johtuen materiaalin valtavasta määrästä. Konversiotuotteita säilytetään viisi vuotta, jonka jälkeen päätetään onko niille minkäänlaista kaupallista käyttöä. Jos käyttöä ei löydy, lopputuote voidaan hävittää matala-aktiivisena jätteenä. (U.S. Department of energy, 1999, s. 16)

5 URAANIHEKSAFLUORIDIN AINEOMINAISUUDET

Simulointiohjelmana käytetään Ansys Fluent mallinnusympäristöä. Ennen simuloitua Fluent tarvitsee uraaniheksafluoridin aineominaisuudet paineen ja lämpötilan funktiona. Kaasumaisen UF₆:n ominaisuuksista tehdään sovitteet lukuunottamatta tiheyttä, joka lasketaan käyttäen Redlich-Kwong tilanyhtälöä. Nestemäisen ja kiinteän uraaniheksafluoridin aineominaisuudet siirretään ohjelmaan polynomi-sovitteina. Lähteenä aineominaisuuksille käytetään Anderson et al. vuonna 1994 tekemää tutkielmaa, jossa uraaniheksafluoridin aineominaisuuksille esitetään kattavat korrelaatiot.

5.1 Kaasumaisen UF₆:n aineominaisuuksien korrelaatiot

Aineominaisuuksien laskennassa käytetään yleistä kuutiotilanyhtälöä, jonka yleinen muoto on (ANSYS Inc., 2009, s. 471)

$$p = \frac{RT}{V - b + c} - \frac{\alpha}{V^2 + \delta V + \varepsilon}, \quad (1)$$

missä p on paine, R on ainekohtainen kaasuvakio, T on lämpötila, V on ominaistilavuus. Kertoimet α , b , c , δ ja ε määritellään kriittisen lämpötilan T_c , kriittisen paineen P_c , kertoimen ω ja kriittisen ominaistilavuuden V_c funktiona. Kerroin α on lämpötilariippuvainen muuttuja eli $\alpha = \alpha(T)$. Ominaistilavuus on määritelty

$$V = \frac{1}{\rho}, \quad (2)$$

missä ρ on tiheys. Reaalikaasumalliksi valittiin malleista yksinkertaisin Redlich-Kwong malli, jonka parametreina ovat vain kriittinen paine ja kriittinen lämpötila. Redlich-Kwong tilanyhtälössä funktiot α ja b on määritelty

$$\alpha(T) = \alpha_0 \left(\frac{T_c}{T} \right)^{0.5}, \quad (3)$$

ja

$$b = 0.08664 \frac{RT_c}{p_c}. \quad (4)$$

Funktiossa $\alpha(T)$ esiintyvä α_0 on määritelty

$$\alpha_0 = 0.42747 \frac{R^2 T_c^2}{p_c}. \quad (5)$$

Parametri δ asetetaan yhtälössä (1) arvoon b ja parametrit c ja ε asetetaan nolliksi.

5.1.1 Ominaisilavuus ja tiheys

Tilanyhtälö (1) ratkaistaan ominaisilavuuden V suhteen. Ratkaisukaava on ohjelmoitu valmiiksi Fluentin omaan reaaliikaasumalliin. Ratkaisufunktion tulee olla tehokas, koska sitä kutsutaan useasti laskentaiteraatioiden aikana. Tiheys saadaan ominaisilavuudesta ottamalla tästä käänteisluku.

5.1.2 Ominaislämpökapasiteetti

Ominaislämpökapasiteetille voidaan käyttää pelkästään lämpötilasta riippuvaa sovitetta, koska odotettavissa olevat paineet eivät ole lähellä kriittistä pistettä. Toisin sanoen $P \ll P_c$. Anderson et al. (1994) esittää ominaislämpökapasiteetille sovitetta joka on muotoa

$$C_p^0(T) = a + bT + cT^2 + dT^{0.5} + \frac{e}{T} + f \ln(T) + g \arctan\left(\frac{T}{h}\right), \quad (6)$$

missä vakiot a, b, c, d, e, f, g ja h on määritelty kuten Taulukossa 3 on esitetty.

Taulukko 3. Yhtälössä (6) esiintyvät vakiot.

Vakio	Arvo
<i>a</i>	1704300
<i>b</i>	-170,5
<i>c</i>	0,0039
<i>d</i>	29511
<i>e</i>	-16430000
<i>f</i>	-406630
<i>g</i>	573600
<i>h</i>	189,1

5.1.3 Lämmönjohtumiskerroin

Lämmönjohtumiskertoimen laskemiseen voidaan käyttää ”residual thermal conductivities” – menetelmää (Anderson, et al., 1994, s. 75). Anderson et al. esittää tälle menetelmälle kaksi sovitetta, joista toinen on lämpötilariippuvainen ja toiseen vaikuttaa tiheys. Lämpötilariippuvainen sovite on muotoa

$$k^0 = -3,316 \cdot 10^{-3} + 1,791 \cdot 10^{-2}T_r - 2,085 \cdot 10^{-3}T_r^2, \quad (7)$$

missä T_r on redusoitu lämpötila. Tiheysriippuvainen sovite on muotoa

$$k^1 = -9,007 \cdot 10^{-6} + 9,945 \cdot 10^{-6}\rho + 9,089 \cdot 10^{-9}\rho^2. \quad (8)$$

Lämmönjohtumiskerroin saadaan laskettua tämän jälkeen näiden erotuksesta

$$k = k^1 - k^0. \quad (9)$$

5.1.4 Viskositeetti

Viskositeetti saadaan laskettua lämmönjohtumiskertoimen avulla käyttäen Eucken yhtälöä (ANSYS Inc., 2009, s. 475), joka on muotoa

$$\mu = \frac{k}{C_p + \frac{5R}{4}}. \quad (10)$$

5.2 Nestemäisen UF₆:n aineominaisuuksien korrelaatiot

Nestemäisen uraaniheksafluoridin simulointiin tarvitaan samat aineominaisuudet kuin kaasumaisenkin simulointiin. Anderson et al. esittää aineominaisuuksien laskentaan korrelaatiot, jotka käydään läpi seuraavassa osassa (Anderson, et al., 1994). Korrelaatioista tehdään polynomisovitteet lämpötilavälille 273 K-500 K. Korrelaatioista tehtyjen sovitteiden kuvaajat löytyvät Liitteestä 2.

5.2.1 Ominaistilavuus ja tiheys

Ominaistilavuuden ratkaisemiseen Anderson et al. esittää ”Rackett”-yhtälöä (Anderson, et al., 1994, s. 23), joka on muotoa

$$V_s = V_s^R Z_c^\epsilon, \quad (11)$$

missä V_s on ominaistilavuus, V_s^R on ominaistilavuus referenssilämpötilassa ja Z_c^ϵ on kokoonpuristuvuus kriittisessä pisteessä. Yhtälössä (11) ϵ on määritelty

$$\epsilon = (1 - T_r)^{\frac{2}{7}} - (1 - T_r^R)^{\frac{2}{7}}. \quad (12)$$

Laskennassa käytetään kriittistä pistettä referenssipisteenä, koska kriittisen pisteen arvot ovat tiedossa. Yhtälö (11) saa tällöin muodon

$$V_s = V_c Z_c^\epsilon, \quad (13)$$

missä eksponentti ϵ yksinkertaistuu muotoon

$$\epsilon = (1 - T_r)^{\frac{2}{7}}, \quad (14)$$

koska redusoitu lämpötila kriittisessä pisteessä on 1 ($T_r(T_c) = 1$). Tällöin yhtälön (12) viimeinen termi menee nolllaksi. Tiheys saadaan ominaistilavuuden avulla yhtälöstä

$$\rho = \frac{1}{V_s}. \quad (15)$$

Kyseinen sovite on luotettava kriittiseen lämpötilaan asti, joten se riittää hyvin nestefaasin laskentaan.

5.2.2 Ominaislämpökapasiteetti

Ominaislämpökapasiteetti lasketaan kahden tilapisteen entalpioiden erotuksen avulla. Kylläiselle nesteelle Anderson et al. esittää lämpötilariippuvaista sovitetta, joka on muotoa (Anderson, et al., 1994, s. 43)

$$H_T = 2,69 \cdot 10^5 - 4,561 \cdot 10^3 (T_c - T)^{0,5} - 247,8(T_c - T), \quad (16)$$

missä H_T on kylläisen nesteen entalpia, T_c on kriittinen lämpötila ja T on lämpötila. Ominaislämpökapasiteetille voidaan nyt kirjoittaa kahden peräkkäisen tilapisteen erotus, joka jaetaan tilapisteiden lämpötilaerolla. Yhtälömuodossa

$$C_p = \left(\frac{\partial H}{\partial T}\right)_P \approx \left(\frac{\Delta H}{\Delta T}\right)_P = \frac{H_T - H_{T-\Delta T}}{T - (T-\Delta T)} = \frac{H_T - H_{T-\Delta T}}{\Delta T}, \quad (17)$$

missä C_p on ominaislämpökapasiteetti ja ΔT on lämpötilaero.

5.2.3 Viskositeetti

Viskositeetille joudutaan käyttämään kahta erilaista sovitetta. Orrick & Erbar -menetelmällä saadaan viskositeetti $0,75T_c$ asti (Anderson, et al., 1994, s. 65). Väli-
lille $0,75T_c < T < T_c$ käytetään Chung et al. -korrelaatiota (Anderson, et al.,
1994, s. 65). Orrick & Erbar -korrelaatio on muotoa

$$\mu = \rho M e^{A + \frac{B}{T}}, \quad (18)$$

missä μ on viskositeetti, ρ on tiheys ja M on moolimassa. Vakiot A ja B on määri-
telty

$$A = \ln\left(\frac{0,752}{\rho M_w}\right) - \frac{B}{372,15}, \quad (19)$$

ja

$$B = \ln\left(\frac{0,924}{0,752}\right) \left(\frac{372,15 \cdot 341,05}{372,15 - 341,05}\right) = 840,60. \quad (20)$$

Chung et al. -korrelaatiota tarvitaan lämpötiloille, jotka ovat yli $0,75T_c$:

$$\mu = \mu^\circ \frac{(C_0 + C_1 T)(MT_c)^{1/2}}{V_c^{2/3}}. \quad (21)$$

Muuttuja μ° on määritelty

$$\mu^\circ = \frac{T^{\circ 1/2}}{\Omega_v} (F_c(G_2^{-1} + E_6 y)) + \mu^{\circ\circ}. \quad (22)$$

Yhtälössä (22) esiintyvät kertoimet saadaan yhtälöistä

$$T^\circ = 1,2593T_r, \quad (23)$$

$$F_c = 1 - 0,2756\omega + 0,059035\mu_r^4 + \kappa, \quad (24)$$

$$y = \frac{\rho V_c}{6}, \quad (25)$$

$$G_1 = \frac{1-0,5y}{(1-y)^3}, \quad (26)$$

$$G_2 = \frac{E_1((1-e^{-E_4 y})/y) + E_2 G_1 e^{E_5 y} + E_3 G_1}{E_1 E_4 + E_2 + E_3}, \quad (27)$$

$$\mu^{\circ\circ} = E_7 y^2 e^{E_8 + E_9 T^{\circ -1} + E_{10} T^{\circ -2}}, \quad (28)$$

ja

$$\Omega_v = 1,16145T^{\circ -0,14874} + 0,52487e^{-0,7732T^\circ} + 2,16178e^{-2,4378T^\circ}. \quad (29)$$

Kertoimet $E_1 - E_{10}$ lasketaan yhtälöllä

$$E_i = a_i + b_i\omega + c_i\mu_r^4 + d_i\kappa. \quad (30)$$

UF₆ ei ole polaarinen, joten redusoitu dipolimomentti μ_r ja kerroin κ oletetaan nolliksi. Kertoimet a_i - d_i löytyvät Taulukosta 4. Kertoimet C_0 ja C_1 yhtälössä (21) on sovitettu niin, että korrelaation vaihto lämpötilassa $T = 0,75T_r$ ei aiheuta viskositeettikäyrään epäjatkuvuutta. Kertoimet on määritelty

$$C_1 = \frac{\frac{\mu_c V_c^{2/3}}{\mu^\circ(T_c, P_c)(MT_c)^{1/2}} - \frac{\mu_{\text{Thigh}} V_c^{2/3}}{\mu^\circ(T_{\text{high}}, P)(MT_c)^{0.5}}}{T_c - T_{\text{high}}}, \quad (31)$$

ja

$$C_0 = \frac{\mu_c V_c^{2/3}}{\mu^\circ(T_c, P_c)(MT_c)^{1/2}} - C_1 T_c. \quad (32)$$

missä μ_c on viskositeetti kriittisessä pisteessä, $\mu^\circ(T_c, P_c)$ on μ° laskettuna kriittisessä pisteessä, μ_{Thigh} on viskositeetti lämpötilassa $T = 0,75T_r$ ja $\mu^\circ(T_{\text{high}}, P)$ on μ° laskettuna lämpötilassa $T = 0,75T_r$.

Taulukko 4. Viskositeetilaskennassa tarvittavat vakioarvot (Anderson, et al., 1994, s. 63)

i	a_i	b_i
1	6,324	50,412
2	1,10E-03	1,15E-03
3	5,283	254,209
4	6,623	38,096
5	19,745	7,63
6	-1,9	-12,537
7	24,275	3,45
8	0,7972	1,117
9	-0,2382	0,0677
10	0,06863	0,3479

5.2.4 Lämmönjohtumiskerroin

Nestefaasin lämmönjohtumiskerroin lasketaan samalla tavalla kuin kaasufaasin, mutta tiheysriippuvan funktion arvoina yhtälössä (8) käytetään nestemäisen UF₆:n arvoja.

5.3 Kiinteän UF₆:n aineominaisuudet

Kiinteän uraaniheksafluoridin simulointiin tarvitaan samat aineominaisuudet kuin nestemäisenkin aineen simulointiin lukuunottamatta viskositeettiä, jota kiinteälle aineelle ei ole määritelty. Anderson et al. esittää aineominaisuuksien laskentaan korrelaatiot, jotka käydään läpi seuraavassa osassa (Anderson, et al., 1994). Korrelaatioista tehdään polynomisovitteet lämpötilavälille 273 K-500 K. Korrelaatioista tehtyjen sovitteiden kuvaajat löytyvät Liitteestä 3.

5.3.1 Tiheys

Kiinteän uraaniheksafluoridin tiheys on DeWittin mukaan (Anderson, et al., 1994, s. 29) lineaarisesti lämpötilasta riippuva ja kokeellisesti määritetyistä datapisteistä on saatu sovite, joka on muotoa

$$\rho = 6611 - 5,19T . \quad (33)$$

5.3.2 Ominaislämpökapasiteetti

Myös ominaislämpökapasiteetti noudattaa yksinkertaista lämpötilasta riippuvaa sovitetta (Anderson, et al., 1994, s. 55)

$$C_p = -238,9 + 1,922T + \frac{1,246 \cdot 10^7}{T^2} . \quad (34)$$

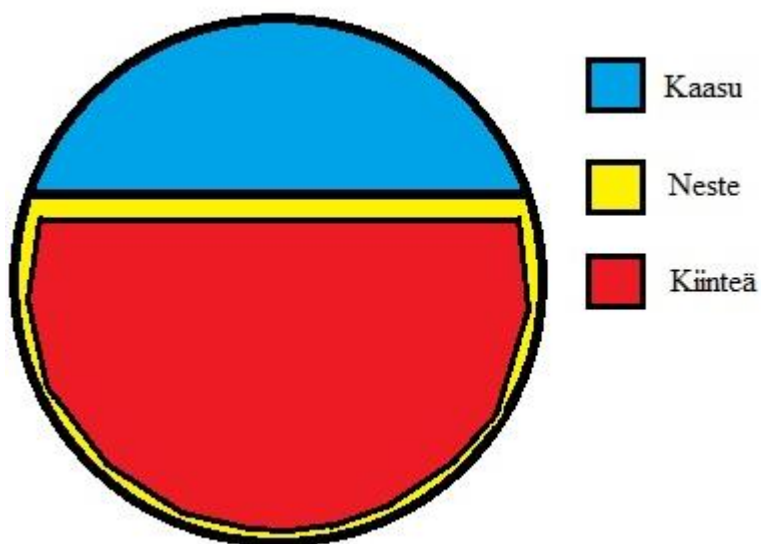
5.3.3 Lämmönjohtumiskerroin

Lämmönsiirtokertoimelle on myös johdettu kokeellisesti yksinkertainen lämpötilasta riippuva sovite (Anderson, et al., 1994, s. 76)

$$k = -3,645 \cdot 10^{-2} + 1,895 \cdot 10^{-3}T . \quad (35)$$

6 UF6-SYLINTERIN LÄMMITYSAJAN ANALYYTTINEN RATKAISU

Simulaation antamien tuloksien vertailua varten tarvitaan laskelma sulamiseen tarvittavasta ajasta, koska mittaustietoa lämmitysvaiheesta ei ole saatavilla. Laskelma antaa karkean arvion CFD-mallin toimivuudesta. Kuvassa 15 on esitetty lämmönsiirtoverkon periaatekuva. Sylinterin seinämää lämmitetään tasaisesti joka puolelta. Alkutilanteessa lämmönsiirto tapahtuu pelkästään johtumalla sylinterin seinästä kiinteään uraaniheksafluoridiin. Melko nopeasti reunoille sulaa ohut nesteäinen kerros, jonka kautta lämpö siirtyy konvektion avustamana nesteestä kiinteään. Tämä tilanne vallitsee sylinterissä koko sulamissyklin ajan. Laskelmas-
sa ei oteta huomioon kaasun kautta nesteeseen siirtyvää lämpöä, koska sen osuus lämmönsiirrosta on pieni. Tässä luvussa esitelty laskelma on tehty osiossa 9.2 esiteltävää lämmityssimulaatiota varten.



Kuva 15. Lämmönsiirtolaskelman geometriaperiaatekuva.

Kuvan 15 perusteella lämmönsiirtoverkoksi saadaan

$$R_{\text{tot}} = \frac{1}{h_i A_{\text{syl}}} + \frac{L}{k_{\text{syl}} A_{\text{syl}}} + \frac{1}{h_{\text{UF}_6} A_L} + \frac{1}{h_{\text{UF}_6} A_S}, \quad (36)$$

missä h_i on ilman konvektiivinen lämmönsiirtokerroin, A_{syl} on sylinterin lämmönsiirtopinta-ala, k_{syl} on sylinterin lämmönjohtavuus (hiiliteräs), L on sylinterin paksuus, h_{UF_6} on UF_6 :n konvektiivinen lämmönsiirtokerroin, A_L on nesteen kontaktipinta-ala sylinteriin ja A_S on kiinteän aineen pinta-ala.

6.1 Ilman konvektiivinen lämmönsiirtokerroin

Sylinteriä lämmitetään ilmalla pakotetun konvektion avustamana. Ilmaa kierrätetään puhaltimen avulla ilman nopeuden ollessa noin 20 m/s. Ilmaa lämmitetään sähkölämmittimillä autoklaavin yläosassa. Ilman lämpötila pidetään 120 °C, jolloin ilmalle voidaan käyttää Taulukossa 5 esitettyjä aineominaisuuksia.

Taulukko 5. Ilman ominaisuudet lämpötilassa 393K (120 °C). (Incropera, et al., 2007, s. 941)

Suure	Arvo	Yksikkö
ρ	0.8711	kg/m ³
μ	0.000021915	Ns/m ²
c_p	1014	J/kg
k	0.0338	W/mK
v	20	m/s

Reynoldsin luvuksi saadaan

$$\text{Re}_D = \frac{\rho v D}{\mu} = \frac{0.8711 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \cdot 20 \frac{\text{m}}{\text{s}} \cdot 1.21 \text{ m}}{0.000021915 \frac{\text{Ns}}{\text{m}^2}} = 9,1 \cdot 10^5, \quad (37)$$

missä Re_D on Reynoldsin luku, ρ on ilman tiheys, v on ilman virtausnopeus, D on sylinterin halkaisija ja μ on ilman dynaaminen viskositeetti. Prandtlin luvuksi saadaan

$$\text{Pr} = \frac{c_p \mu}{k} = 0.69 \quad (38)$$

Reynoldsin luvun ja Prandtin luvun tulo on $Re_D \cdot Pr = 9,1 \cdot 10^5 \cdot 0.69 = 6,3 \cdot 10^5$. Kun $Re_D \cdot Pr \geq 0.2$ Churchill & Bernstein ehdottavat Nusseltin luvulle korrelaatiota, joka on muotoa (Incropera, et al., 2007, s. 427)

$$\overline{\text{Nu}}_D = 0.3 + \frac{0.62 Re_D^{1/2} Pr^{1/3}}{[1 + (0.3/Pr)^{2/3}]^{1/4}} \cdot \left[1 + \left(\frac{Re_D}{282000} \right)^{5/8} \right]^{4/5} = 1133 \quad (39)$$

Lämmönsiirtokerroin saadaan Nusseltin luvun avulla lämmönsiirtokertoimen määritelmästä.

$$h_i = \frac{\text{Nu} \cdot k}{D} = 31,65 \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \text{K}} \approx 32 \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \text{K}} \quad (40)$$

6.2 UF₆:n konvektiivinen lämmönsiirtokerroin

Uraaniheksafluoridin konvektiivista lämmönsiirtokerrointa varten tarvitaan UF₆:n aineominaisuudet filmilämpötilassa $T_f = \frac{393 \text{ K} + 337 \text{ K}}{2} = 365 \text{ K}$. Taulukossa 6 on esitetty Luvun 5 sovitteista saadut aineominaisuudet.

Taulukko 6. UF₆:n aineominaisuudet filmilämpötilassa 365 K.

Suure	Arvo	Yksikkö
ρ	3297	kg/m ³
μ	0,0007852	Ns/m ²
c_p	441	J/kg
k	0,13186	W/mK
β	0,001815	1/K

Sylinterissä vallitsee vain luonnollisesta konvektiosta johtuvia virtauksia, jolloin virtausta määrittävä parametri on Rayleighin luku

$$Ra = Gr \cdot Pr , \quad (41)$$

missä

$$Pr = \frac{\mu \cdot c_p}{k} , \quad (42)$$

ja

$$Gr = \frac{g\beta\rho\Delta T D^3}{\mu^2} . \quad (43)$$

Anderson (1996) esittää vaakataso sylinterille seuraavaa korrelaatiota Nusseltin luvulle

$$Nu_{Di,conv} = \frac{2}{\ln\left[\frac{1+2/X}{1-2/Y}\right]} , \quad (44)$$

missä

$$X = \left[(0,518 Ra_{Di}^{1/4} [1 + (0,559/Pr)^{-5/12}]^{15} + (0,1 Ra_{Di}^{1/3})^{15} \right]^{1/15} ,$$

$$Y = \left[\left(\left[\left(\frac{2}{1 - e^{-0,25}} \right)^{5/3} + (0,587 G Ra_{Do}^{1/4})^{5/3} \right]^{3/5} \right)^{15} + (0,1 Ra_{Do}^{1/3})^{15} \right]^{1/15} ,$$

ja

$$G = \left[\left(1 + \frac{0,6}{Pr^{0,7}} \right)^{-5} + (0,4 + 2,6 Pr^{0,7})^{-5} \right]^{-1/5} .$$

Yhtälöissä alaindeksi o viittaa sylinterin ulkohalkaisijaan ja alaindeksi i sisähalkaisijaan. Johtumisen kautta siirtyvälle lämmölle Anderson (1996, s. 10) esittää korrelaatiota Nusseltin luvulle

$$\text{Nu}_{Di,\text{cond}} = \frac{2}{\cosh^{-1}\left[\frac{D_i^2 + D_o^2}{2D_i D_o}\right]}. \quad (45)$$

Yhdistetty Nusseltin luku konvektiolle ja johtumiselle mille tahansa Rayleighin luvulle on

$$\text{Nu}_{Di} = [\text{Nu}_{Di,\text{cond}}^{15} + \text{Nu}_{Di,\text{conv}}^{15}]^{\frac{1}{15}}. \quad (46)$$

Kokonaislämmönsiirtokerroin saadaan Nusseltin luvun määritelmästä

$$h_{\text{UF}_6} = \frac{\text{Nu}_{Di} k}{D_i}. \quad (47)$$

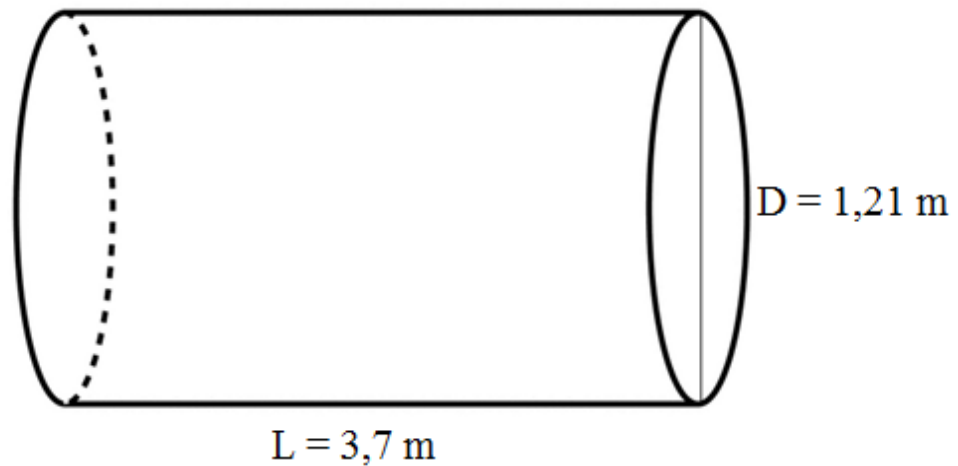
Sijoittamalla lukuarvot yhtälöihin saadaan Taulukossa 7 esitetyt tulokset.

Taulukko 7. UF₆:n lämmönsiirtokerroimen laskentatulokset

Suure	Arvo	Yksikkö
Pr	2,62	-
Gr _o	3,11E+13	-
Gr _i	3,05E+13	-
Ra _o	8,17E+13	-
Ra _i	8,01E+13	-
X	4312	-
G	1,31	-
Y	4341	-
Nu _{conv}	2163	-
Nu _{cond}	301	-
Nu _{di}	2163	-
h _{UF6}	237	W/m ² K

6.3 UF₆:n tilavuus sylinterissä

Kuvassa 16 on esitetty yksinkertaistetun sylinterin dimensiot, joita käytetään tilavuuksien ja pinta-alojen laskennassa. Sylinterin päädyt on kuvattu tässä tasaisiksi, mutta todellisuudessa päädyt ovat hieman kuperat.



Kuva 16. Pinta-alalaskennan sylinterin dimensiot

Tilavuuden laskentaa varten tarvitaan tarkka uraaniheksafluoridin määrä sylinterissä. Määrän laskeminen perustuu sylinterin minimitilavuuden tietoon. Minimitilavuuden määritelmä on esitelty luvussa 4.2.2 ”Sylinterin täyttö”. Simuloitavan sylinterin ilmoitettu minimitilavuus on $V_{\min} = 3,94 \text{ m}^3$, mutta koska laskelmassa päädyt oletetaan tasaisiksi, on tilavuus suurempi. Tilavuudeksi saadaan

$$V_{\text{syl}} = \frac{\pi D^2 L}{4} = \frac{\pi \cdot 1,21 \text{ m}^2 \cdot 3,7 \text{ m}}{4} = 4,254 \text{ m}^3. \quad (48)$$

Uraaniheksafluoridin tiheys täyttölämpötilassa 113 °C on 3256 kg/m³ ja sylinteriin jätetään aina 5 % turvavara. Tästä saatava UF₆-määrä on

$$m = 95\% \cdot \left(4,254 \text{ m}^3 \cdot 3256 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}\right) = 13160 \text{ kg} . \quad (49)$$

Sylinterissä olevan UF₆:n tilavuus kiinteässä olomuodossa voidaan laskea massan avulla, kun tiedetään, että kiinteän UF₆:n tiheys lämpötilassa 64 °C on 4861 kg/m³. Kiinteän uraaniheksafluoridin tilavuus on tällöin

$$V_{\text{kiinteä}} = \frac{13160 \text{ kg}}{4861 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}} = 2,70 \text{ m}^3 . \quad (50)$$

Nestemäisessä olomuodossa UF₆:n tiheys lämpötilassa 64 °C on 3457 kg/m³. Tällöin UF₆:n tilavuus sylinterissä on

$$V_{\text{neste}} = \frac{13160 \text{ kg}}{3457 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}} = 3,80 \text{ m}^3 . \quad (51)$$

Tilavuuksille saadaan suhdeluvut

$$\frac{V_{\text{kiinteä}}}{V_{\text{syl}}} = \frac{2,70 \text{ m}^3}{4,254 \text{ m}^3} = 0,634 , \quad (52)$$

ja

$$\frac{V_{\text{neste}}}{V_{\text{syl}}} = \frac{3,80 \text{ m}^3}{4,254 \text{ m}^3} = 0,893 . \quad (53)$$

6.4 Lämmönsiirtopinta-alojen arviointi

Kaksiulotteisessa tapauksessa lämmönsiirtopinta-alaksi sylinterille käytetään pelkästään ympyrän piiriä, joka kerrotaan sylinterin pituudella

$$A_{\text{syl}} = \pi DL = \pi \cdot 1,21 \text{ m} \cdot 1 \text{ m} = 3,80 \text{ m}^2 . \quad (54)$$

Koko sylinterin pinta-alaa käytetään sylinterin läpi johtumisen avulla siirtyvän lämmönsiirron laskennassa.

Sylinterin reunasta lämpö siirtyy nesteeseen konvektion avulla. Nestefaasin lämmönsiirtopinta-ala on sulamisen alkaessa se pinta-ala, jonka kiinteä UF_6 peittää sylinterissä. Edellisessä luvussa 6.2 laskettiin tilavuuksien suhteet, joita voidaan käyttää pinta-alojen arvioinnissa. Lämmityksen alussa UF_6 vie sylinterin tilavuudesta 63,4 % ja lopussa 89,3 %. Keskiarvoksi saadaan 76,3 %. Tällöin keskimääräiseksi lämmönsiirtopinta-alaksi saadaan

$$A_L = 0,763 \cdot \pi DL = 0,763 \cdot \pi \cdot 1,21 \text{ m} \cdot 1 \text{ m} = 2,90 \text{ m}^2 . \quad (55)$$

Nesteestä kiinteään lämpö siirtyy myös konvektiolla. Kiinteän aineen lämmönsiirtopinta-ala on alussa 63,4 % sylinterin pinta-alasta. Lopussa kiinteä aine on sulanut kokonaan. Keskiarvoksi saadaan 31,7 %, jolloin keskimääräinen lämmönsiirtopinta-ala on

$$A_S = 0,317 \cdot \pi DL = 0,317 \cdot \pi \cdot 1,21 \text{ m} \cdot 1 \text{ m} = 1,21 \text{ m}^2 . \quad (56)$$

6.5 Keskimääräinen lämmitysteho ja sulamisaika

Koko sylinteriin menevä lämpö oletetaan kuluvan sulamiseen, joten lämpötila sylinterissä on vakio. Tämä tehokaskelma on tehty lämmityssimulaatiota varten, jossa ilman lämpötila pidetään vakiona. Teholle saadaan yhtälö

$$P = \frac{\Delta T}{\frac{1}{h_i A_{\text{syl}}} + \frac{L}{k_{\text{syl}} A_{\text{syl}}} + \frac{1}{h_{\text{UF}_6} A_L} + \frac{1}{h_{\text{UF}_6} A_S}} . \quad (57)$$

Sijoittamalla lukuarvot keskimääräiseksi lämmitystehoksi saadaan $P = 4237 \text{ W}$.

Luvussa 6.2 laskettu massa saadaan muutettua kaksiulotteiseen tapaukseen sopivaksi jakamalla massa sylinterin pituudella $L = 3,7 \text{ m}$. Tällöin kiinteän UF_6 :n määrä sylinterissä on

$$m = \frac{13160 \text{ kg}}{3,7 \text{ m}} = 3556 \text{ kg} . \quad (58)$$

Sulamislämmölle käytetään arvoa $h_f = 54743 \frac{\text{J}}{\text{kg}}$. Tästä saatava tarvittava lämpömäärä, joka sylinteriin on tuotava, että kaikki kiinteä UF_6 sulaa on

$$Q = m \cdot h_f = 3556 \text{ kg} \cdot 54743 \frac{\text{J}}{\text{kg}} = 194707535 \text{ J} . \quad (59)$$

Sulamisajaksi saadaan tällöin

$$t = \frac{Q}{P} = \frac{194707535 \text{ J}}{4237 \frac{\text{J}}{\text{s}}} = 45951 \text{ s} \approx 12,7 \text{ h} . \quad (60)$$

Kolmiulotteiseksi (todelliseksi) sulatusajaksi skaalattuna tulee ottaa huomioon suurempi lämmönsiirtopinta-ala ja todellinen UF₆:n määrä sylinterissä. Tällöin sylinterin pinta-ala on

$$A_{\text{syl}} = \pi DL + \frac{\pi D^2}{2} = \pi \cdot 1,21 \text{ m} \cdot 3,7 \text{ m} + \frac{\pi \cdot (1,21 \text{ m})^2}{2} = 16,36 \text{ m}^2. \quad (61)$$

Tällä pinta-alalla keskimääräinen lämmitysteho on $P = 18237 \text{ W}$. UF₆:n määrä sylinterissä on 13160 kg, jolloin tarvittava lämpömäärä on

$$Q = m \cdot h_f = 13160 \text{ kg} \cdot 54743 \frac{\text{J}}{\text{kg}} = 720417880 \text{ J}. \quad (62)$$

Sulatusajaksi saadaan tällöin

$$t = \frac{Q}{P} = \frac{720417880 \text{ J}}{18237 \frac{\text{J}}{\text{s}}} = 39501 \text{ s} \approx 11 \text{ h}. \quad (63)$$

Laskelma ei ota huomioon kaasufaasin kautta tapahtuvaa lämmönsiirtoa, joka CFD-mallissa on mukana. Kaasun kautta tapahtuva lämmönsiirto voidaan kuitenkin olettaa huomattavasti pienemmäksi kuin nesteen kautta siirtyvä lämpö, joten laskelmaa voidaan pitää suhteellisen hyvänä approksimaationa.

7 UF6-SYLINTERIN NUMEERINEN SIMULOINTI

Tässä luvussa esitellään simulaation kannalta oleellinen monifaasimalli käyttäen kaupallisen CFD-ohjelmiston käyttöohjekirjan antamia ohjeita. Monifaasimallin esittelyssä keskitytään simulaatiotapauksen kannalta oleellisten yhtälöiden ja ilmiöiden selvittämiseen.

Monifaasiseen CFD-simulointiin on tällä hetkellä kaksi numeerista lähestymistapaa, Euler-Lagrange ja Euler-Euler. Euler-Lagrangelaisessa tarkastelussa seurataan jatkuvan (fluidi) faasin mukana kulkeutuvaa diskreettiä faasia, muun muassa partikkeleita. Tässä mallinnuksessa käytettävässä Euler-Euler lähestymistavassa seurataan kahta tai useampaa jatkuvaa faasia (fluidia), joiden voidaan olettaa sekoittuvan tasaiseksi seokseksi tai erottuvan muodostaen jatkuvia rajapintoja. Lähestymistavassa oleellista on faasikohtainen tilavuusosuus, joka tarkoittaa sitä, ettei faasin viemässä tilavuudessa voi olla muita faaseja. Nämä tilavuusosuudet oletetaan jatkuviksi tilan ja ajan funktioiksi ja niiden summa on yksi. (Ansys Inc., 2012a, s. 450)

Tässä työssä käytettävässä Ansys Fluent ohjelmistossa Euler-Euler lähestymistapaa edustavat Volume of Fluid, Mixture ja Eulerian monifaasimallit. VOF rajapintamallissa ratkaistaan faaseille yhteinen liikemääräyhtälö, mutta jokaisen faasin tilavuusosuus ratkaistaan erikseen. VOF-mallissa faasit eivät voi sekoittua keskenään. Malli sopii etenkin tapauksiin, joissa halutaan seurata faasien rajapintaa. Mixture mallissa faasit käsitellään sekoittuneena jatkumona. Malli ratkaisee seokselle yhteisen liikemääräyhtälön ja määrää faaseille suhteelliset nopeudet, joiden avulla sekoittuneet faasit saadaan erotettua toisistaan. Eulerian malli on monifaasimalleista monipuolisin, koska sillä voidaan mallintaa teoriassa rajaton määrä yhtä aikaisia faaseja. Tämä on mahdollista, koska liikemäärä- ja jatkuvuusyhtälöt ratkaistaan jokaiselle faasille erikseen. (Ansys Inc., 2012a, s. 450-451)

7.1 Volume of Fluid- malli

Monifaasimalliksi valittiin VOF-malli, koska Fluentin solidification/melting-malli toimii vain VOF-mallin kanssa. Malli tukee myös faasimuutoksien lisäämistä ratkaisijan koodiin, koska faasien entalpiat ratkaistaan jokaiselle faasille erikseen. Malli on suunniteltu kahden tai useamman sekoittumattoman aineen (tai aineen olomuodon) kontaktirajapinnan seuraamiseen. VOF-mallissa aineet jakavat yhteisen liikemääräyhtälöiden kokonaisuuden ja aineiden tilavuusosuudet ratkaistaan laskentahilan jokaisessa laskentasolussa. Malli käyttää painekentän ratkaisemiseen perustuvaa ratkaisijaa, josta tietoa osiossa 7.9. (Ansys Inc., 2012a, s. 450)

VOF-malli perustuu siihen, että faasit eivät kemiallisesti sekoitu keskenään. Faasilla q on tilavuusosuus α_q , jolla on kolme mahdollista tilaa:

Kun $\alpha_q = 0$: laskentasolussa ei ole faasia q

Kun $\alpha_q = 1$: laskentasolu on täynnä faasia q

Kun $0 < \alpha_q < 1$: laskentasolussa on faasin q ja jonkin muun faasin rajapinta.

Aineominaisuudet ja muuttujat kussakin laskentasolussa lasketaan tilavuusosuuksien perusteella. (Ansys Inc., 2012a, s. 457)

7.2 Jatkuvuusyhtälöt

Faasien välisen rajapinnan seuraamiseen tarvitaan ratkaisu tilavuusosuuksien jatkuvuusyhtälöön, joka on faasille q muotoa

$$\frac{1}{\rho_q} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_q \rho_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{v}_q) \right] = S_{\alpha_q} + \sum_{p=1}^n (\dot{m}_{pq} - \dot{m}_{qp}), \quad (64)$$

missä \dot{m}_{qp} on massansiirto faasista q faasiin p , \dot{m}_{pq} on massansiirto faasista p faasiin q ja S_{α_q} sisältää ylimääräiset lähdetermit, joita ei tässä simulaatiossa ole mukana.

Pääfaasin (tässä tapauksessa kaasumaisen uraaniheksafluoridin) tilavuusosuutta ei lasketa erikseen, vaan se saadaan tilavuusosuuksien summan avulla

$$\sum_{q=1}^n \alpha_q = 1. \quad (65)$$

Tilavuusosuusyhtälön ratkaisemiseen käytetään eksplisiittistä diskretointia. Tälöin ratkaistava yhtälö saa muodon

$$\frac{\alpha_q^{n+1} \rho_q^{n+1} - \alpha_q^n \rho_q^n}{\Delta t} V + \sum_f (\rho_q U_f^n \alpha_{q,f}^n) = \left[\sum_{p=1}^n (\dot{m}_{pq} - \dot{m}_{qp}) + S_{\alpha_q} \right] V, \quad (66)$$

missä $n + 1$ on nykyisen aika-askeleen indeksi, n on aiemman aika-askeleen indeksi, $\alpha_{q,f}$ on faasin q tilavuusosuus, V on laskentasolun tilavuus ja U_f on normaalinopeuteen perustuva tilavuusvuo.

Faasien rajapintojen interpolointiin valittiin Geo-Reconstruct malli, koska mallilla saadaan terävä rajapinta faasien välille. (Ansys Inc., 2012a, s. 462)

7.3 Liikemääräyhtälö

Faaseista riippumatta, koko kontrollitilavuudelle ratkaistaan yksi liikemääräyhtälö, jonka nopeuskenttä on faaseille yhteinen. Yhtälö on riippuvainen tilavuusosuuksista tiheyden ja viskositeetin kautta ja se on muotoa (Ansys Inc., 2012a, s. 462)

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{v}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot [\mu (\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T)] + \rho \vec{g} + \vec{F}, \quad (67)$$

missä \vec{F} on lähde-termi muista tilavuuteen vaikuttavista voimista. Yhteinen liikemääräyhtälö ei sovellu hyvin tapauksiin, joissa faasien väliset nopeuserot ovat suuria. Tässä tapauksessa nopeuserot ovat kuitenkin pieniä, koska sylinterissä vallitsevat pelkästään luonnollisesta konvektiosta johtuvat virtausnopeudet. Liikemääräyhtälöön lisätään ylimääräinen lähde-termi kiinteän aineen laskentasolui-

hin. Tällä lähdetermillä simuloidaan kiinteän aineen käyttäytymistä. Lähdetermistä lisää luvussa 7.6.

7.4 Energiayhtälö ja lämmönsiirto

Myös energiayhtälö on faaseille yhteinen ja se on muotoa

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \nabla \cdot (\vec{v}(\rho E + p)) = \nabla \cdot (k_{\text{eff}} \nabla T) + S_h . \quad (68)$$

VOF-malli käsittelee energiaa E ja lämpötilaa T massakeskiarvoisina muuttujina, jotka ovat muotoa

$$E = \frac{\sum_{q=1}^n \alpha_q \rho_q E_q}{\sum_{q=1}^n \alpha_q \rho_q} , \quad (69)$$

missä faasin energia E_q perustuu ominaislämpökapasiteettiin ja jaettuun lämpötilaan. Faaseille yhteisiä ovat myös yhtälössä (64) esiintyvät tiheys ja lämmönsiirtoeroin. Lähdetermi S_h tarkoittaa faasien välistä energiansiirtoa sulaessa tai jäätyessä, josta lisää luvussa 7.6. Lisäksi luvussa 7.7 esiteltävä höyrystymis- ja lauhtumismalli lisää energiatasapainoon ylimääräisen lähdetermin. (Ansys Inc., 2012a, s. 463)

7.5 Sublimaatio ja härmistyminen

Tätä diplomityötä varten tehty CFD-malli ei ota huomioon sublimaation kautta syntyvää kaasua tai härmistymällä kaasusta kiinteytyvää ainetta. Ominaisuuden lisääminen vaatisi Fluentin sulamismallin muokkaamista niin, että sulamismalli ottaa huomioon myös sylinterissä vallitsevan paineen. Fluentin oma sulamismalli ottaa huomioon pelkästään lämpötilan. Sulamismallin muokkaaminen ei ole mahdollista, koska malli on integroitu CFD-ohjelmistoon. Ohjelmistoon voi kuitenkin lisätä käyttäjän määrittelemien funktioiden (UDF) avulla uusia ominaisuuksia,

joten sublimaation lisääminen onnistuisi nykyisen sulamismallin uudelleenohjelmomisella.

Simulointitapaus on tähän työhön valittu niin, ettei sublimointimallin puuttuminen aiheuta tuloksiin virhettä. Olomuodon muutos pidetään sulamisena asettamalla sylinterin paine yli kolmoispisteen 152 kPa.

7.6 Sulaminen ja jäätyminen

Nestefaasille otetaan käyttöön Fluentin sulamista simuloiva ”Solidification/melting” -malli. Sulaminen tapahtuu kolmoispisteen lämpötilassa 64 °C. Malli käyttää nesteen ja kiinteän rajapinnan laskentaan entalpia-huokoisuusmenetelmää (Ansys Inc., 2012a, s. 580). Nesteen ja kiinteän olomuodon raja käsitellään huokoisena alueena. Liikemääräyhtälöön lisätään ylimääräinen lähdetermi, joka ottaa huomioon paineen laskun kiinteän aineen takia. Aineominaisuudet eri olomuodoille esitellään luvussa 7.8.

Nestemäisen ja kiinteän aineen tilavuusosuudet lasketaan jokaisella aika-askeleella entalpiatasapainon avulla. Tällä osittain sulaneen materiaalin alueella nestefaasin tilavuusosuus on välillä $0 < \beta < 1$. Kun laskentaselun nestetilavuusosuus on nolla, oletetaan solussa olevan pelkkää kiinteää ainetta, jolloin nopeudet solussa ovat nollia.

Materiaalin entalpia lasketaan tunnetun entalpian h ja latentin lämmön ΔH avulla.

$$H = h + \Delta H , \quad (70)$$

missä entalpia h on määritelty

$$h = h_{\text{ref}} + \int_{T_{\text{ref}}}^T c_p dT . \quad (71)$$

Nestetilavuusosuus on määritelty

$$\beta = 0, \text{ jos } T < T_{\text{solidus}},$$

$$\beta = 1, \text{ jos } T > T_{\text{liquidus}},$$

$$\beta = \frac{T - T_{\text{solidus}}}{T_{\text{liquidus}} - T_{\text{solidus}}}, \text{ jos } T_{\text{solidus}} < T < T_{\text{liquidus}},$$

missä solidus viittaa lämpötilaan, jossa aine alkaa kiinteytyä ja liquidus viittaa lämpötilaan, jossa aine alkaa sulaa. Tässä simulointitapauksessa sulamisen oletetaan tapahtuvan vakio­lämpötilassa, joten $T_{\text{solidus}} = T_{\text{liquidus}}$.

Latentille lämpösisällölle voidaan tällöin kirjoittaa $\Delta H = \beta L$, joka on nolla kiinteälle ja L nestemäiselle aineelle. Energiayhtälöön (64) lisätään lähdetermiksi edellä laskettu entalpia H .

Liikemääräyhtälöön (63) lisätään myös ylimääräinen lähdetermi, joka kuvaa vähentynyttä huokoisuutta laskentaselussa. Lähdetermi vähentää laskentaselun virtausnopeudet nol­laan kiinteän aineen kohdalla ja termi on muotoa

$$S = \frac{(1-\beta)^2}{(\beta^3 + \varepsilon)} A_{\text{mush}} (\vec{v} - \vec{v}_p), \quad (72)$$

missä β on nestetilavuusosuus, ε on pieni luku, jolla estetään nol­lalla jakaminen, A_{mush} on fluentin vakio, jolla säädetään kuinka jyrkästi nopeudet laskevat ja \vec{v}_p on kiinteän aineen vetonopeus, jota ei tässä simulaatiossa ole mukana. (Ansys Inc., 2012a, s. 580)

7.7 Höyrystyminen ja lauhtuminen

Höyrystymisen ja lauhtumisen mallintamiseen käytetään Fluentin tarjoamaa evaporation/condensation – mallia. Ohjelmiston tarjoamista vaihtoehtoista kyseinen malli osoittautui ainoaksi toimivaksi malliksi. Tarkempia ja validoituja malleja ei tällä hetkellä ole saatavilla. Massansiirtoa kuvaa kuljetusyhtälö (62), jossa mas-

sansiirtotermit perustuvat faasien lämpötilaeroihin ja aineen höyrystymislämpötilaan T_{sat} . (Ansys Inc., 2012a, s. 569)

Mallia varten tarvitaan uraaniheksafluoridin höyrystymislämpötila paineen funktiona. Anderson et al. (1994) esittää uraaniheksafluoridin höyrystymislämpötilalle sovitetta, joka on jaettu kolmeen lämpötila-alueeseen.

Alue 1: $273,15 \text{ K} \leq T \leq 337,35 \text{ K}$, missä paine on määritelty

$$P = 2,3425 \cdot e^{\left[28,957 - 29,022\left(\frac{273,15}{T}\right) - 7,1656 \cdot \ln\left(\frac{T}{273,15}\right) + 6,54 \cdot 10^{-2} \left(\frac{T}{273,15}\right)^6\right]} \quad (73)$$

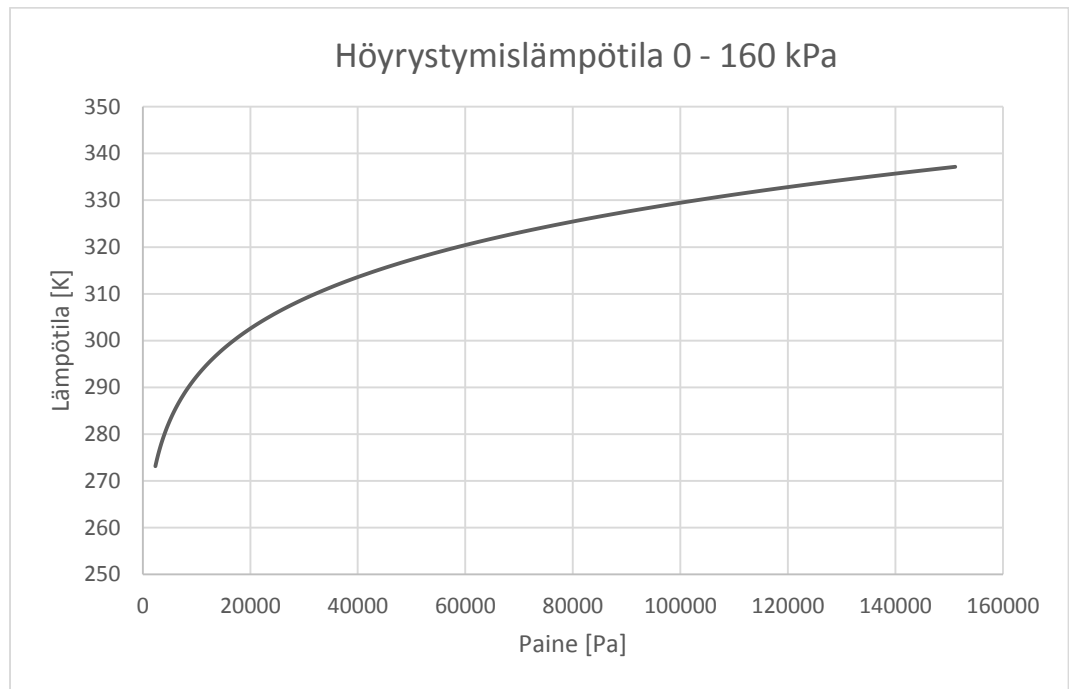
Alue 2: $337,35 \text{ K} < T \leq 469,17 \text{ K}$, missä paine on määritelty

$$P = 1,5268 \cdot 10^2 \cdot e^{\left[15,063 - 15,087\left(\frac{337,35}{T}\right) - 4,5612 \cdot \ln\left(\frac{T}{337,35}\right) + 2,3947 \cdot 10^{-2} \left(\frac{T}{337,35}\right)^6\right]} \quad (74)$$

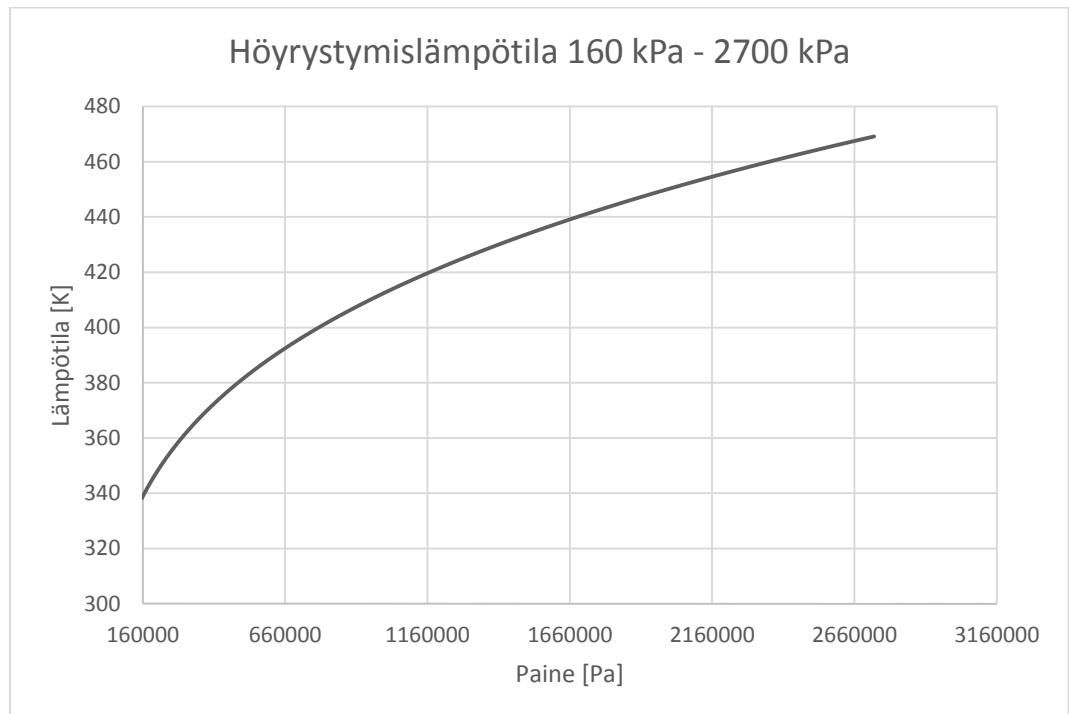
Alue 3: $469,17 \text{ K} < T \leq 503,3 \text{ K}$, missä paine on määritelty

$$P = 2,7303 \cdot 10^3 \cdot e^{\left[631,57 - 645,83\left(\frac{469,17}{T}\right) - 722,61 \cdot \ln\left(\frac{T}{469,17}\right) + 14,258 \left(\frac{T}{469,17}\right)^6\right]} \quad (75)$$

Höyrystymiskäyrästä saadaan johdettua höyrystymislämpötila paineen funktiona. Viimeistä lämpötila-aluetta ei tässä simulointimallissa tarvita, joten kahdesta alueesta saadaan kaksi erillistä sovitetta jotka on esitetty Kuvissa 17 ja 18.



Kuva 17. Höyrystymislämpötila painealueella 0 - 160 kPa.



Kuva 18. Höyrystymislämpötila painealueella 160 kPa – 2700 kPa.

Yhtälössä (62) esiintyvät massansiirtotermit on määritelty seuraavasti

$$\dot{m}_{lv} = \text{coeff} \cdot \alpha_l \rho_l \frac{T_l - T_{\text{sat}}}{T_{\text{sat}}}, \quad (76)$$

ja

$$\dot{m}_{vl} = \text{coeff} \cdot \alpha_v \rho_v \frac{T_v - T_{\text{sat}}}{T_{\text{sat}}}. \quad (77)$$

Yhtälöissä (72) ja (73) esiintyvät coeff kertoimet ovat aineelle ominaisia höyrystymiskertoimia, jotka säädetään mittausten perusteella vastaamaan todellisuutta. Uraaniheksafluoridin höyrystymisestä ei ole mittaustuloksia saatavilla, joten käyttöön otetaan yleisesti hyväksytyt kertoimet. On osoitettu kokeellisesti, että kinettisen teorian mukaan lasketut höyrystymismäärät ovat noin kymmenkertaiset todellisiin höyrystymismääriin verrattuna (Rahimi & Ward, 2005, s. 1). Tämän oletuksen perusteella kertoimelle voidaan käyttää ohjelmiston oletusarvoa

$$\text{coeff} = 0,1 \frac{1}{s}. \quad (78)$$

Energiayhtälöön lisätään tarvittava lähde-termi kuvaamaan höyrystymisessä sitoutuvaa ja lauhtumisessa vapautuvaa energiaa. Lähde-termi on muotoa

$$S = \dot{m} \cdot \Delta H_v, \quad (79)$$

missä \dot{m} on massansiirto faasien välillä ja ΔH_v on höyrystymislämpö.

7.8 Aineominaisuudet

Nestemäisen ja kiinteän UF₆:n aineominaisuuksista tehdään sovitteet pelkän lämpötilan funktiona. Näistä sovitteista saadaan yksinkertaiset polynomisovitteet esimerkiksi Excelin trendiviivatoiminnon avulla. Nämä polynomisovitteet voidaan ohjelmoida käyttäjän määrittelemiin funktioihin, jotka saadaan Fluentissa käyttöön aineen ominaisuuksiksi. Fluent ei suoraan tue aineominaisuuksien säätöä erikseen nesteelle ja kiinteälle, kun solidification/melting-malli on käytössä. Tämä ongelma voidaan kiertää ohjelmoimalla aineominaisuudet ikään kuin yhdelle faasille, mutta ottaen huomioon laskentasolussa olevan nestemäisen ja kiinteän aineen tilavuusosuudet (ks. osio 7.6). Näin saadaan tiheys muuttumaan jäätymässä tai sulassa tasaisesti eikä simulaatiossa synny hyppäyksiä aineominaisuuksissa.

Kaasumaisen ja nestemäisen uraaniheksafluoridin kuljetusyhtälöissä esiintyvät aineominaisuudet laskentasoluissa lasketaan samalla tavalla. Esimerkkinä tiheyden laskenta faaseille 1 ja 2: (Ansys Inc., 2012a, s. 462)

$$\rho = \alpha_2 \rho_2 + (1 - \alpha_2) \rho_1 . \quad (80)$$

7.9 Ratkaisutapa

Fluent käyttää ratkaisussa painekentän ratkaisuun perustuvaa muuttujat erottelevaa ratkaisualgoritmia (pressure-based segregated solver). Tämä tarkoittaa sitä, että määräävät yhtälöt ratkaistaan yksi kerrallaan iteratiivisesti. Laskentasolun laskenta etenee seuraavalla tavalla: (Ansys Inc., 2012a, s. 604)

1. Päivitetään aineominaisuudet (esimerkiksi tiheys, viskositeetti, ominaislämpökapasiteetti)
2. Ratkaistaan liikemääräyhtälöt yksi kerrallaan käyttäen edellisen aika-askelen paine- ja massavuoarvoja
3. Ratkaistaan paineenkorjausyhtälö käyttäen kohdassa kaksi saatuja nopeuskentän ja massavuon arvoja

4. Päivitetään painekenttä, massavuot ja nopeuskenttä käyttäen kohdassa kolme saatuja paineenkorjauksia
5. Päivitetään massansiirtotermit eri faasien välillä
6. Tarkastetaan ratkaisun konvergoituminen

Paine- ja nopeuskentän yhdistävänä algoritmina käytetään PISOa (Pressure-Implicit with Splitting of Operators). PISO on SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations) algoritmista paranneltu versio. Paineenkorjausyhtälö tässä menetelmässä on muotoa (Ansys Inc., 2012a, s. 627)

$$a_p p' = \sum_{nb} a_{nb} p'_{nb} + b, \quad (81)$$

missä b on lähdetermi soluun virtaavasta materiaalista, joka on määritelty

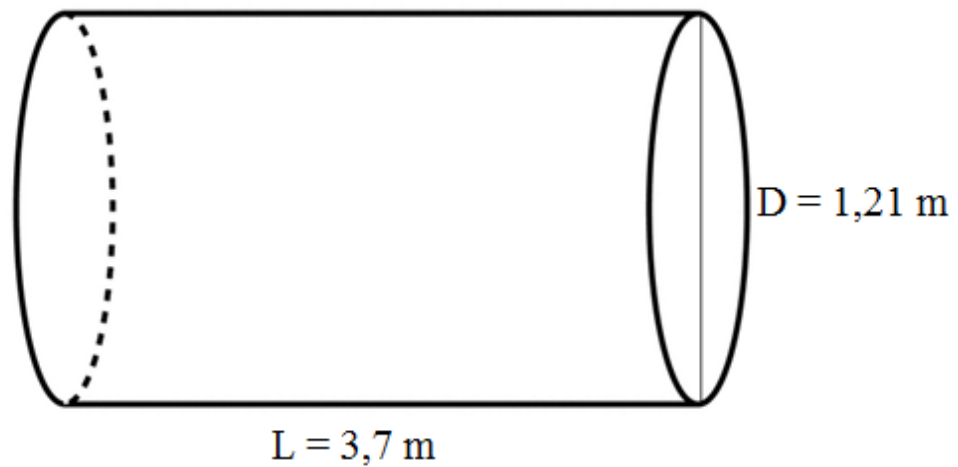
$$b = \sum_f^N J_f^* A_f. \quad (82)$$

PISO-algoritmia on paranneltu SIMPLE-algoritmista siten, että laskentasolun nopeusvektorit toteuttavat liikemäärätasapainon paremmin painekorjaustermin lisäyksen jälkeen. Tämä on saavutettu laskemalla paineenkorjausyhtälö erillisessä silmukassa normaalin iteraatiokierroksen sijaan. Tuloksen saaminen kestää hieman normaalia iteraatiokierrosta pidempään, mutta tarvittavien iteraatiokierrosten lukumäärä vähenee huomattavasti. (Ansys Inc., 2012a, s. 629)

8 SIMULOINTIASETUKSET

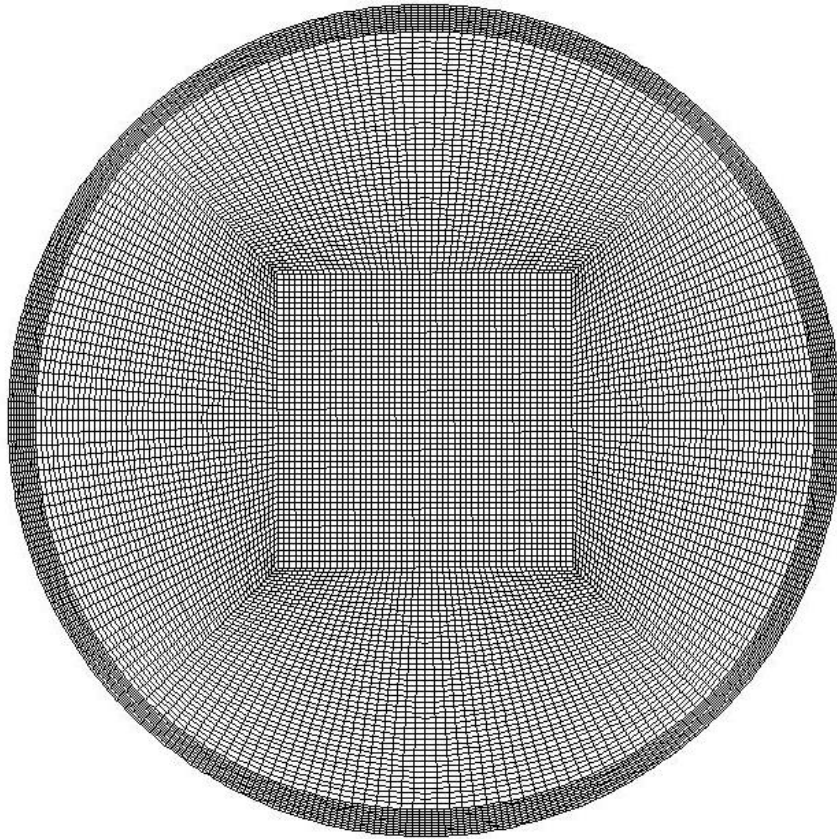
8.1 Geometria ja laskentahila

Sylinteristä tehdään geometriamalli, joka käännetään Fluentin laskentaverkoksi. Geometria yksinkertaistetaan olettamalla sylinterin päädyt tasaisiksi, kuten luvussa 6 tehtiin. Kuvassa 19 on esitetty sylinterin dimensiot ja periaatekuva.



Kuva 19. UF₆-sylinteri.

Laskentaverkossa on 15500 laskentasolua. Säiliön reunoille on tehty ykköstason hanging-node adaptointi viisi solua sisäänpäin. Tämä tarkoittaa sitä, että alkupe-
räisestä laskentaverkosta on merkitty viisi solua reunasta, joista jokainen on jaettu neljään pienempään soluun. Tällä saadaan simulointi vakaammaksi, koska reunoilla on odotettavissa sulan aineen ja kaasun virtauksia sekä voimakas lämpötilagradientti. Laskentaverkko on esitetty kuvassa 20.

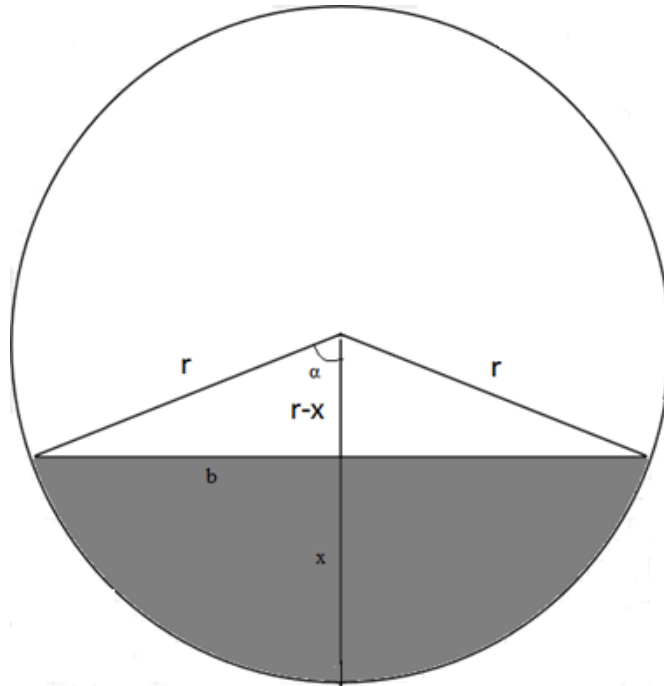


Kuva 20. Kaksiulotteinen laskentaverkko, jossa hanging-node adaptointi reunoilla.

8.2 Tarvittavien alkuarvojen laskenta

Osiassa 6.3 laskettiin tilavuudet kiinteälle ja nestemäiselle UF_6 :lle. Näiden tilavuuksien avulla saadaan laskettua myös pinnankorkeus sylinterissä simulaation eri vaiheissa. Yhtälön (46) mukaisesti $V_{\text{kiinteä}} = 2,70 \text{ m}^3$. Tätä tilavuutta vastaava pinnankorkeus saadaan käyttämällä hyväksi sylinterin geometriaa, joka esiteltiin Kuvassa 19.

Kuvassa 21 on esitetty pinnankorkeuslaskennassa käytetyt merkinnät.



Kuva 21. Pinnankorkeuslaskennan parametrit.

Kuvasta 21 täytyy ensin ratkaista kulma α . Kulmalle voidaan kirjoittaa

$$\alpha = \cos^{-1}\left(\frac{r-x}{r}\right). \quad (83)$$

Tämän kulman avulla voidaan lausua sektorin pinta-ala

$$A_{\text{sektori}} = \pi r^2 \cdot \frac{2\alpha}{360} = \frac{2 \cdot \cos^{-1}\left(\frac{r-x}{r}\right)}{360} \cdot \pi r^2. \quad (84)$$

Tästä pinta-alasta vähennetään kahden suorakulmaisen kolmion pinta-alat, joiden kateetit ovat b ja $r-x$. Pythagoraan lauseesta voidaan kirjoittaa

$$r^2 = (r-x)^2 + b^2. \quad (85)$$

Järjestämällä termit uudestaan saadaan

$$b = \sqrt{r^2 - (r - x)^2}. \quad (86)$$

Nyt kolmion pinta-ala on

$$A_{\text{kolmio}} = \frac{b \cdot (r - x)}{2} = \frac{(r - x) \sqrt{r^2 - (r - x)^2}}{2}. \quad (87)$$

Kolmioita on kaksi, joten koko sektorin pinta-alasta vähennettävä kahden kolmion pinta-ala on

$$A_{\text{kolmiot}} = (r - x) \cdot \sqrt{r^2 - (r - x)^2}. \quad (88)$$

Harmaan alueen pinta-alaksi saadaan vähentämällä sektorin pinta-alasta yhtälöstä (84) laskettu kolmioiden pinta-ala. Harmaan alueen pinta-ala on

$$A_{\text{harmaa}} = \frac{2 \cos^{-1}\left(\frac{r-x}{r}\right)}{360} \cdot \pi r^2 - (r - x) \sqrt{r^2 - (r - x)^2}. \quad (89)$$

Sylinterin tilavuus tiedetään, joten sylinterin pituudelle voidaan kirjoittaa

$$h = \frac{V}{\pi r^2}. \quad (90)$$

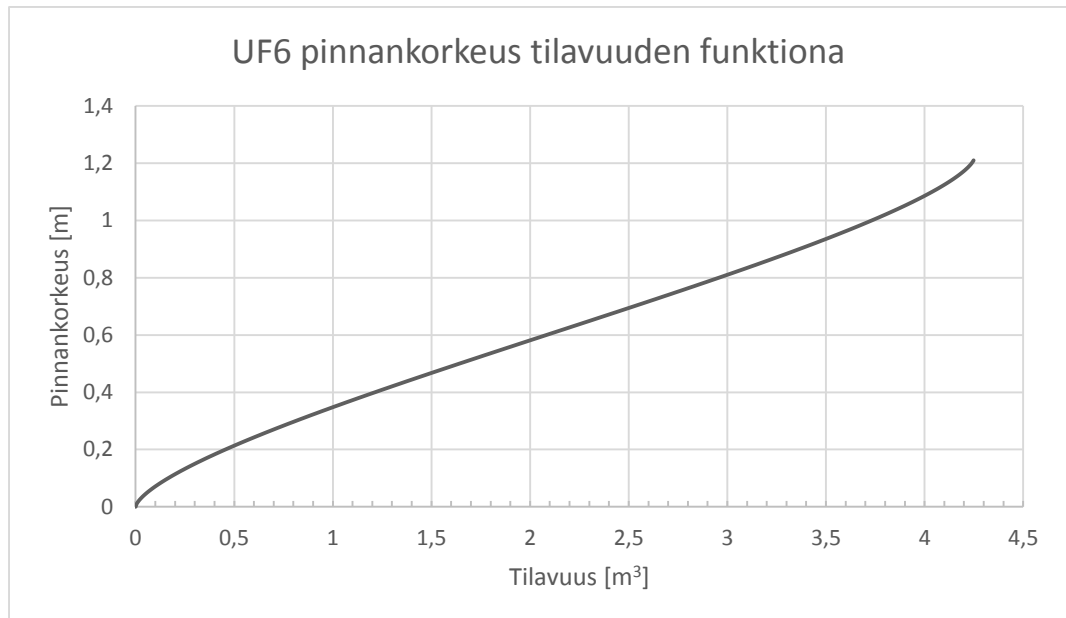
Sylinterissä olevan materiaalin tilavuus voidaan nyt lausua pinnankorkeuden x funktiona, kertomalla harmaan alueen pinta-ala sylinterin pituudella. Saadaan

$$V(x) = \frac{V}{\pi r^2} \cdot \left[\frac{2 \cos^{-1}\left(\frac{r-x}{r}\right)}{360} \cdot \pi r^2 - (r - x) \sqrt{r^2 - (r - x)^2} \right]. \quad (91)$$

Muuttamalla asteet radiaaneiksi ($360^\circ = 2\pi$) ja sieventämällä lauseke saadaan lo-pullinen tilavuuden yhtälö

$$V(x) = \frac{V}{\pi r^2} \cdot \left[r^2 \cos^{-1} \left(\frac{r-x}{r} \right) - (r-x) \sqrt{r^2 - (r-x)^2} \right]. \quad (92)$$

Kun lausekkeeseen sijoitetaan lukuarvot, saadaan kuvaaja, joka kertoo pinnankor-keuden tilavuuden funktiona. Kuvaaja on esitetty kuvassa 22.



Kuva 22. Pinnankorkeus tilavuuden funktiona

Pinta asetetaan tasaiseksi laskettuun pinnankorkeuden arvoon. Pinta ei kiinteälle aineelle todellisuudessa kuitenkaan ole tasainen, koska nestemäisestä olomuodosta jäätyessään kiinteä aines kerääntyy säiliön reunoja mukailleen. Simuloinnin kanalta pinnan tasaisuudella ei ole kuitenkaan merkitystä, koska lämmitys tapahtuu säiliön reunoilta. Jäähdytys­simulaatiossa pinnankorkeus asetetaan myös vastaavalla tavalla. Tässä simulaatiossa pinta on todellisuudessaakin täysin tasainen.

8.3 Aineominaisuudet

Taulukoissa 8 on esitetty käytetyt aineominaisuudet kaasumaiselle uraaniheksafluoridille. Kaasu käsitellään kokoonpuristuvana reaalikaasuna, jonka tiheys saadaan Fluentin omasta reaalikaasun tilanyhtälöstä. Höyrystymislämpöä tarvitaan nesteestä höyrystyvän kaasun sitoman energian laskentaan.

Taulukko 8. Kaasufaasin aineominaisuudet

Suure	Sovite	Yksikkö
Ominaislämpökapasiteetti (C_p)	$0,0000013927 T^3 - 0,0022709543 T^2 + 1,3581332064 T + 128,2597191821$	J/kg
Lämmönjohtavuus (k)	$0,0000000006 T^3 - 0,0000005324 T^2 + 0,0002004505 T - 0,0208911076$	W/mK
Dynaaminen viskositeetti (μ)	$-0,0000000012 T^2 + 0,0000004378 T - 0,0000424922$	kg/ms
Höyrystymislämpö (H_v)	81589	J/kg
Tiheys (ρ)	real-gas-redlich-kwong tilanyhtälöstä	kg/m ³

Taulukossa 9 ja 10 on esitetty nestemäisen ja kiinteän UF₆:n aineominaisuudet. Kiinteän aineen aineominaisuudet sisällytetään nestemäisen aineen UDF-tiedostoihin, joiden perusteella aineominaisuudet vaihdetaan materiaalin sulaessa tai jäätyessä.

Ominaislämpökapasiteetit nestemäiselle ja kiinteälle faasille joudutaan jättämään vakioarvoihin, jotka saadaan lasketuista sovitteista. Sovitteen käyttö suoraan laskennassa ei ole mahdollista, koska Fluentin ”DEFINE_SPECIFIC_HEAT”-makro ei tue faasitason määrittelyä (thread). Toisin sanoen ratkaisija ei palauta laskentatason nesteosuutta käyttäjälle. Vaihtoehdoksi jää ominaislämpökapasiteetin vaihtaminen suoraan lämpötilaan perustuen. Numeerisen vakauden takia käytetään kuitenkin vakioarvoja sovitteiden sijaan. Valitut arvot on otettu sulamislämpötilassa 337 K.

Kiinteän aineen tiheydelle käytetään myös vakioarvoja, koska testisimuloinneissa havaittiin lämpötilan mukaan muuttuvan tiheyden aiheuttavan suuria numeerisia ongelmia laskennassa. Laskennassa käytetty tiheys on sovitteista laskettu arvo lämpötilassa 337 K.

Taulukko 9. Nestefaasin aineominaisuudet

Suure	Sovite	Yksikkö
Ominaislämpökapasiteetti (C_p)	421,6603	J/kgK
Lämmönjohtavuus (k)	$-0,0000000080 T^3 + 0,0000083372 T^2 - 0,0032355111 T + 0,6002910871$	W/mK
Dynaaminen viskositeetti (μ)	$-0,0000000002 T^3 + 0,0000002116 T^2 - 0,0000941575 T + 0,0149527687$	kg/ms
Sulamislämpö (H_f)	54743	J/kg
Tiheys (ρ)	$-0,0001953473 T^3 + 0,2027000781 T^2 - 74,9930889504 T + 13168,7964459175$	kg/m ³

Taulukko 10. Kiinteän UF₆:n aineominaisuudet

Suure	Sovite	Yksikkö
Ominaislämpökapasiteetti (C_p)	492,9424	J/kgK
Lämmönjohtavuus (k)	$-3,645e-2 + 1,895e-3 T$	W/mK
Dynaaminen viskositeetti (μ)	-	kg/ms
Sulamislämpö (H_f)	54743	J/kg
Tiheys (ρ)	4830	kg/m ³

Jokainen sovite on toimiva vain lämpötila-alueella 273 K – 504 K. Tämä on otettu huomioon aineominaisuudet määrittävissä UDF-funktioissa. Lämpötilan mensesä rajojen ulkopuolelle (esimerkiksi iteraatiokierroksen alussa) aineominaisuudet asetetaan vakioksi sovitteen pätevyysalueen ääriarvoon. Tällä estetään ratkaisun voimakas oskilloiminen, joka johtuu pelkästään aineominaisuuksien epäluonnollisuudesta.

8.4 Simulointiprosessi

Simuloinnissa käytetään muuttuvaa aika-askelta. Simulointi aloitetaan aika-askeleella $\Delta t = 0,0001$ s ja suurimmaksi Courant luvuksi asetetaan aluksi 1. Testisimuloinnit osoittivat, että varsinkin simuloinnin loppupuolella nesteessä tapahtuvat vapaan konvektion virtaukset kasvavat suuremmiksi. Tällöin konvergoituminen heikkenee. Tällä Courant luvulla aika-askel vaihtelee välillä $0,001 \text{ s} < \Delta t < 0,020 \text{ s}$. Testisimuloinnit osoittivat, että aika-askel konvergoituu noin kol-

menkymmenen iteraatiokierroksen aikana. Simulointidata tallennetaan 30 sekunnin välein.

Simuloinnissa on ongelmana simulointitapauksen pitkä simulointiaika. Mallia voidaan kuitenkin hienosäätää käyttämään suurempia Courant arvoja, jolloin suurempien aika-askelten käyttö onnistuu. Testien perusteella todettiin, että virtausnopeudet ovat suurimmat kaasufaasissa ja ainoastaan tämä rajoittaa suurempien Courant lukujen käyttöä. Kaasufaasin kautta tapahtuva lämmönsiirto todettiin jo aiemmin merkityksettömän pieneksi nestefaasin kautta tapahtuvaan lämmönsiirtoon verrattuna, joten Courant lukua nostettiin vähitellen ylöspäin laskennan edetessä. Parhaimmillaan päästiin jopa aika-askelisiin $\Delta t = 0,1$ s.

9 SIMULOITAVAT TAPAUKSET

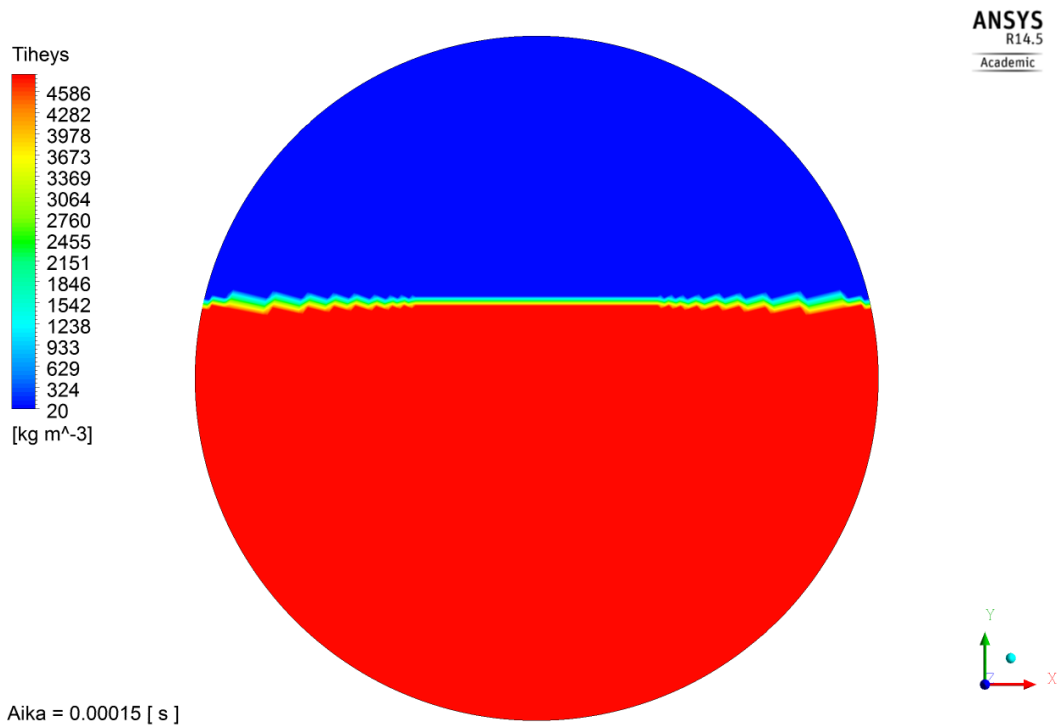
Mallinnettavaksi valittiin UF₆-sylinterin lämmitysvaihe sekä jäähdytysvaihe. Simulointilaskenta suoritetaan Ansys Fluent 14.5 ohjelmalla. CFD-mallin testaus ja luominen suoritetaan Platom Oy:n tiloissa Mikkelissä neliytimisellä tietokoneella, jossa on usean ytimen käytön mahdollistava Fluent lisenssi. Varsinaiset simulaatiot suoritetaan Lappeenrannan teknillisen yliopiston laskentaklusterilla.

9.1 Testisimulaatio

Ensimmäisenä simuloidaan testisimulaatio lämmitysvaiheesta. Tämän simulaation tarkoituksena on kerätä tietoa mallin toimivuudesta ja simulointinopeudesta. Mallinnettava tapaus koostuu 48G-mallisen sylinterin poikkileikkauksesta, jonka halkaisija on 1,21 m. Säiliössä on pelkästään uraaniheksafluoridia sen kaikissa olomuodoissa. Ilmaa tai muita epäpuhtauksia ei säiliössä oleteta olevan. Alkutilanteessa kiinteä UF₆ on sylinterissä lämpötilassa 63 °C, joka on lähellä sulamispistettä. Sylinterissä kaasufaasin paine on kolmoispisteen paine 152 kPa. Näissä olosuhteissa nestemäinen olomuoto on mahdollinen, joten sulaminen saadaan alkamaan.

Säiliötä lämmitetään tasaisesti reunoilta niin, että sylinterin ulkoseinämän lämpötila on jatkuvasti 500 K (227 °C). Lämpötilaksi valittiin juuri 500 K, koska aineominaisuussovitteet toimivat vain kyseiseen lämpötilaan asti. Mallinnuslämpötila ei ole realistinen, koska sylinteriä ei todellisuudessa saa lämmittää yli 120 °C väliaineella. Simulaatio antaa tietoa sulamisen etenemisestä ilmiönä eivätkä absoluuttiset lukuarvot ole vertailukelpoisia todellisten arvojen kanssa.

Osiassa 6.3 laskettiin kiinteän UF₆:n tilavuus sylinterissä. Osiossa 8.2 laskettiin pinnankorkeus tilavuuden funktiona. Kuvasta 22 voidaan todeta, että lasketulle tilavuuden arvolle $V = 2,70 \text{ m}^3$ saadaan pinnankorkeudeksi $x = 0,74 \text{ m}$. Kiinteän UF₆:n pinnankorkeus asetetaan kyseiseen arvoon. Kuvassa 23 on esitetty simulaation alkutilanne, jossa kiinteä aine vie noin 60 % sylinterin tilavuudesta ja kaasun viemä tilavuus on 40 % koko sylinterin tilavuudesta.



Kuva 23. Simulaation alkutilanne. Punainen väri esittää kuvassa kiinteää ainetta ja sininen kaasumaista. Simulaation edetessä nestemäinen aine näkyy kuvissa keltaisena.

9.1.1 Parametrit ja raja-arvot

Taulukossa 11 on esitetty simuloinnin asetukset, käytetyt mallit ja käytetyt vakiot. Liikemäärä-, energia- ja tiheysyhtälöiden diskretoinnissa käytetään toisen kertaluokan tarkkuutta. Ajan diskretoinnissa käytetään ensimmäisen kertaluokan impliittistä diskretointia.

Taulukko 11. Raja-arvot ja simuloinnin parametrit

Models:		
Solver:	Segregated 2D- 1st order explicit	
Multiphase:	Volume-of-Fluid, 2 phases	
Energy equation:	Enabled	
Viscous:	Laminar	
Other models:	Solidification/melting, evaporation/condensation	
Solution controls:	Pressure-velocity coupling:	PISO
	Discretization of momentum and energy:	2nd order upwind
Materials:	UF6 gas, UF6 liquid, UF6 solid	
Phase properties:	UF6-gas	UF6-liquid
Pure solvent melting heat (J/kg)	0	54743
Solidus temperature [K]	0	337
Liquidus temperature [K]	0	337
Critical temperature [K]	503,3	0
Critical pressure [Pa]	4610000	0
Critical specific volume [m ³ /kg]	0,000727	0
Acentric factor [-]	0,09215	0
Speed of sound [m/s]	real-gas-redlich-kwong	-
Phase interactions:		
Mass:	condensation	evaporation melting solidification
Operating conditions:		
Op. Pressure [Pa]:	Floating (152 kPa initial)	
Gravity [m/s ²]:	-9,81 in y-direction	
Op. temperature [K]:	337	
Spec. Op. Density [kg/m ³]	0	
Boundary conditions		
wall'	Cylinder wall	
	Wall temperature [K]:	500
	Wall conductivity [W/mK]:	43
	Material:	Carbon Steel
	Wall thickness [m]:	0,008
default-interior'	Contents of the cylinder	
UDFs	UDF for densities in in each phase, UDF for viscosities in each phase, UDF for thermal conductivities in each phase, UDF for specific heats in each phase, UDF for evaporation and condensation	

9.2 Lämmityssimulaatio

Tässä simulaatiossa käytetään hyväksi testisimulaatiossa saatuja tietoja mallin toimivuudesta. Mallinnettava tapaus koostuu 48G-mallisen sylinterin poikkileikkauksesta, jonka halkaisija on 1,21 m. Säiliössä on pelkästään uraaniheksafluoridia sen kaikissa olomuodoissa. Ilmaa tai muita epäpuhtauksia ei säiliössä oleteta olevan. Alkutilanteessa kiinteä UF_6 on sylinterissä lämpötilassa 63 °C , joka on lähellä sulamispistettä. Sylinterissä kaasufaasin paine on kolmoispisteen paine 152 kPa . Näissä olosuhteissa nestemäinen olomuoto on mahdollinen, joten sulaminen saadaan alkamaan.

Säiliötä lämmitetään tasaisesti reunoilta ilmalla, jonka lämpötila on 393 K (120 °C). Luvussa 6.1 laskettiin ilmalle konvektiivinen lämmönsiirtokerroin, jota käytetään Fluentissa sylinterin ulkopuolisena konvektiivisena lämmönsiirtokertoimena. Näin saadaan mallinnettua realistiset olosuhteet sylinterin ulkopuolella. Simulaation alkutilanne on sama kuin Kuvassa 23. Pinnankorkeus asetetaan kuten testisimulaatiossa.

9.2.1 Parametrit ja raja-arvot

Taulukossa 12 on esitetty simuloinnin asetukset, käytetyt mallit ja käytetyt vakiot. Liikemäärä-, energia- ja tiheysyhtälöiden diskretoinnissa käytetään toisen kertaluokan tarkkuutta. Ajan diskretoinnissa käytetään ensimmäisen kertaluokan impliittistä diskretointia.

Taulukko 12. Raja-arvot ja simuloinnin parametrit

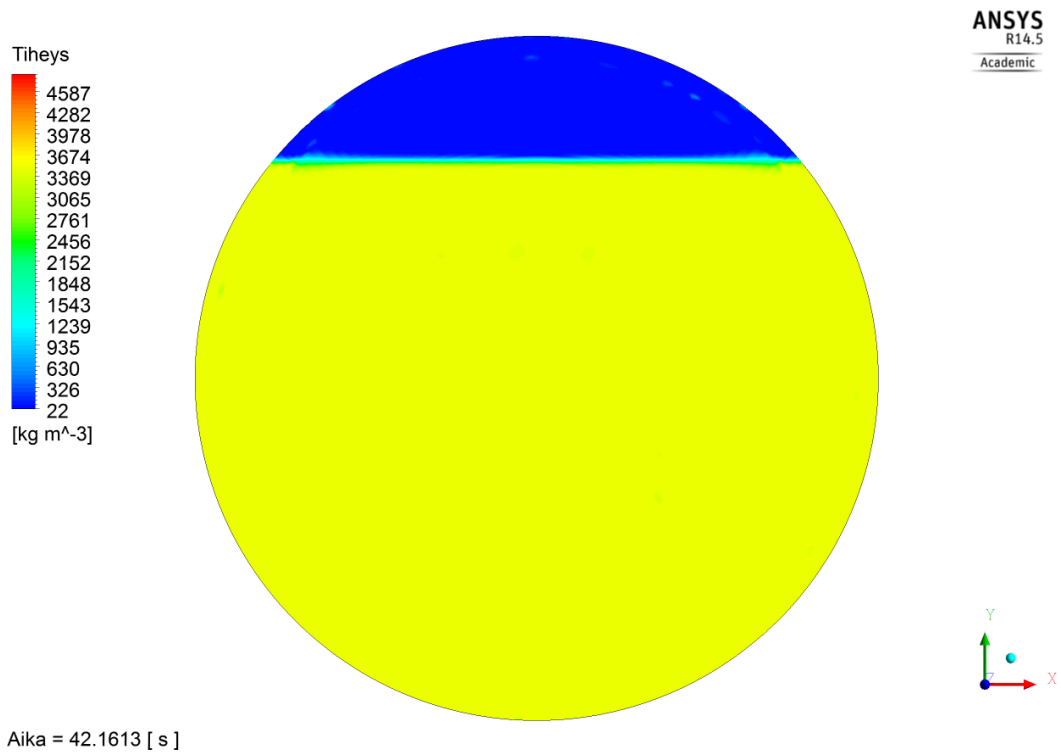
Models:		
Solver:	Segregated 2D- 1st order explicit	
Multiphase:	Volume-of-Fluid, 2 phases	
Energy equation:	Enabled	
Viscous:	Laminar	
Other models:	Solidification/melting, evaporation/condensation	
Solution controls:	Pressure-velocity coupling:	PISO
	Discretization of momentum and energy:	2nd order upwind
Materials:	UF6 gas, UF6 liquid, UF6 solid	
Phase properties:	UF6-gas	UF6-liquid
Pure solvent melting heat (J/kg)	0	54743
Solidus temperature [K]	0	337
Liquidus temperature [K]	0	337
Critical temperature [K]	503,3	0
Critical pressure [Pa]	4610000	0
Critical specific volume [m ³ /kg]	0,000727	0
Acentric factor [-]	0,09215	0
Speed of sound [m/s]	real-gas-redlich-kwong	-
Phase interactions:		
Mass:	condensation	evaporation melting solidification
Operating conditions:		
Op. Pressure [Pa]:	Floating (152 kPa initial)	
Gravity [m/s ²]:	-9,81 in y-direction	
Op. temperature [K]:	337	
Spec. Op. Density [kg/m ³]	0	
Boundary conditions		
wall'	Cylinder wall	
	Free stream temperature [K]:	393
	Convection heat transfer coefficient [W/m ² K]:	32 (osio 6.1)
	Wall conductivity [W/mK]:	43
	Material:	Carbon Steel
	Wall thickness [m]:	0,008
default-interior'	Contents of the cylinder	
UDFs	UDF for densities in in each phase, UDF for viscosities in each phase, UDF for thermal conductivities in each phase, UDF for specific heats in each phase, UDF for evaporation and condensation	

9.3 Jäähdytys­simulaatio

Tämä simulaatio on erilainen kuin kaksi edellistä, koska sylinteriä jäähdytetään. Mallinnettava tapaus koostuu 48G-mallisen sylinterin poikkileikkauksesta, jonka halkaisija on 1,21 m. Säiliössä on pelkästään uraaniheksafluoridia sen kaikissa olomuodoissa. Ilmaa tai muita epäpuhtauksia ei säiliössä oleteta olevan. Alkutilanteessa kiinteä UF_6 on sylinterissä lämpötilassa $65\text{ }^\circ\text{C}$, joka on lähellä jäätymispistettä. Sylinterissä kaasufaasin paine on arvioitu 300 kPa suuruiseksi. Näissä olosuhteissa nestemäinen olomuoto alkaa kiinteytyä.

Säiliötä jäähdytetään tasaisesti reunoilta ilmalla, jonka lämpötila on 293 K ($20\text{ }^\circ\text{C}$). Luvussa 6.1 laskettiin ilmalle konvektiivinen lämmönsiirtokerroin, jota käytetään Fluentissa sylinterin ulkopuolisena konvektiivisena lämmönsiirtokertoimena. Näin saadaan mallinnettua realistiset olosuhteet sylinterin ulkopuolella.

Osiossa 6.3 laskettiin nestemäisen UF_6 :n tilavuus sylinterissä. Osiossa 8.2 laskettiin pinnankorkeus tilavuuden funktiona. Kuvasta 22 voidaan todeta, että lasketulle tilavuuden arvolle $V = 3,80\text{ m}^3$ saadaan pinnankorkeudeksi $x = 1,02\text{ m}$. Nestemäisen UF_6 :n pinnankorkeus asetetaan kyseiseen arvoon. Kuvassa 24 on esitetty simulaation alkutilanne, jossa kiinteä aine vie noin 90 % sylinterin tilavuudesta ja kaasun viemä tilavuus on 10 % koko sylinterin tilavuudesta.



Kuva 24. Jäähdytys­simulaatio alkutilanne. Kaasumainen UF₆ on esitetty kuvassa sinisenä ja nestemäinen keltaisena. Kiinteä näkyy kuvissa punaisena simulaation edetessä.

9.3.1 Parametrit ja raja-arvot

Taulukossa 13 on esitetty simuloinnin asetukset, käytetyt mallit ja käytetyt vakiot. Liikemäärä-, energia- ja tiheysyhtälöiden diskretoinnissa käytetään toisen kertaluokan tarkkuutta. Ajan diskretoinnissa käytetään ensimmäisen kertaluokan impliittistä diskretointia.

Taulukko 13. Raja-arvot ja simuloinnin parametrit

Models:		
Solver:	Segregated 2D- 1st order explicit	
Multiphase:	Volume-of-Fluid, 2 phases	
Energy equation:	Enabled	
Viscous:	Laminar	
Other models:	Solidification/melting, evaporation/condensation	
Solution controls:	Pressure-velocity coupling:	PISO
	Discretization of momentum and energy:	2nd order upwind
Materials:	UF6 gas, UF6 liquid, UF6 solid	
Phase properties:	UF6-gas	UF6-liquid
Pure solvent melting heat (J/kg)	0	54743
Solidus temperature [K]	0	337
Liquidus temperature [K]	0	337
Critical temperature [K]	503,3	0
Critical pressure [Pa]	4610000	0
Critical specific volume [m ³ /kg]	0,000727	0
Acentric factor [-]	0,09215	0
Speed of sound [m/s]	real-gas-redlich-kwong	-
Phase interactions:		
Mass:	condensation	evaporation melting solidification
Operating conditions:		
Op. Pressure [Pa]:	Floating (300 kPa initial)	
Gravity [m/s ²]:	-9,81 in y-direction	
Op. temperature [K]:	337	
Spec. Op. Density [kg/m ³]	0	
Boundary conditions		
wall'	Cylinder wall	
	Free stream temperature [K]:	293
	Convection heat transfer coefficient [W/m ² K]:	32 (osio 6.1)
	Wall conductivity [W/mK]:	43
	Material:	Carbon Steel
	Wall thickness [m]:	0,008
default-interior'	Contents of the cylinder	
UDFs	UDF for densities in in each phase, UDF for viscosities in each phase, UDF for thermal conductivities in each phase, UDF for specific heats in each phase, UDF for evaporation and condensation	

10 TULOSTEN TARKASTELU

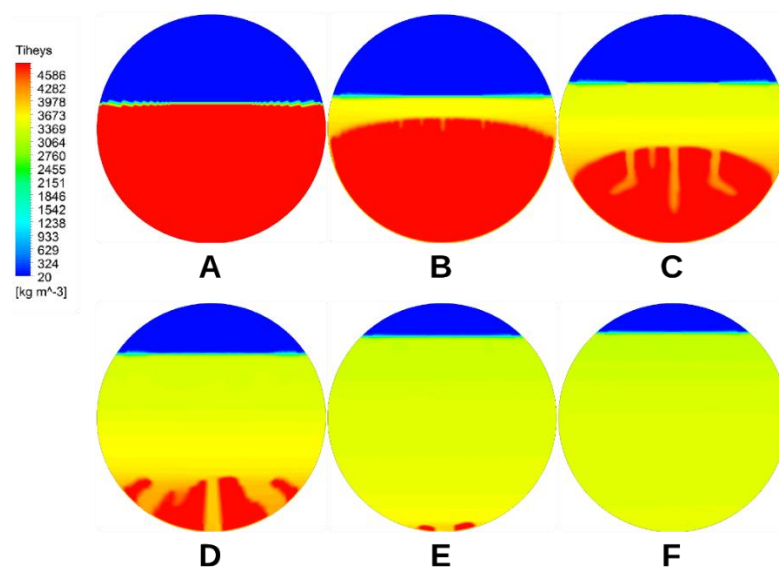
Tässä luvussa esitellään simuloinnin tulokset. Tuloksista esitellään sulamiseen tai kiinteytymiseen mennyt aika, sylinterin sisäinen paineen nousu ja lasku, keskimääräinen lämpötila sylinterissä, kokonaislämmitys- tai jäähdystysteho, vapaan konvektion virtausnopeudet sekä havainnollistavat kuvat sulamisen tai jäätyneen etenemisestä. Höyrystymisestä ja lauhtumisesta esitetään kuvaaja, johon on laskettu sylinterissä tapahtuva massansiirto nesteen ja kaasun välillä. Tuloksia vertaillaan Luvussa 6 esiteltyyn analyttiseen laskentatulokseen ja molempien mallien toimivuutta arvioidaan tuloksien perusteella.

10.1 Testisimulaatio

Testisimulaation tarkoituksena oli todeta malli toimivaksi ja tarpeeksi vakaaksi pitempiä simulaatioita varten.

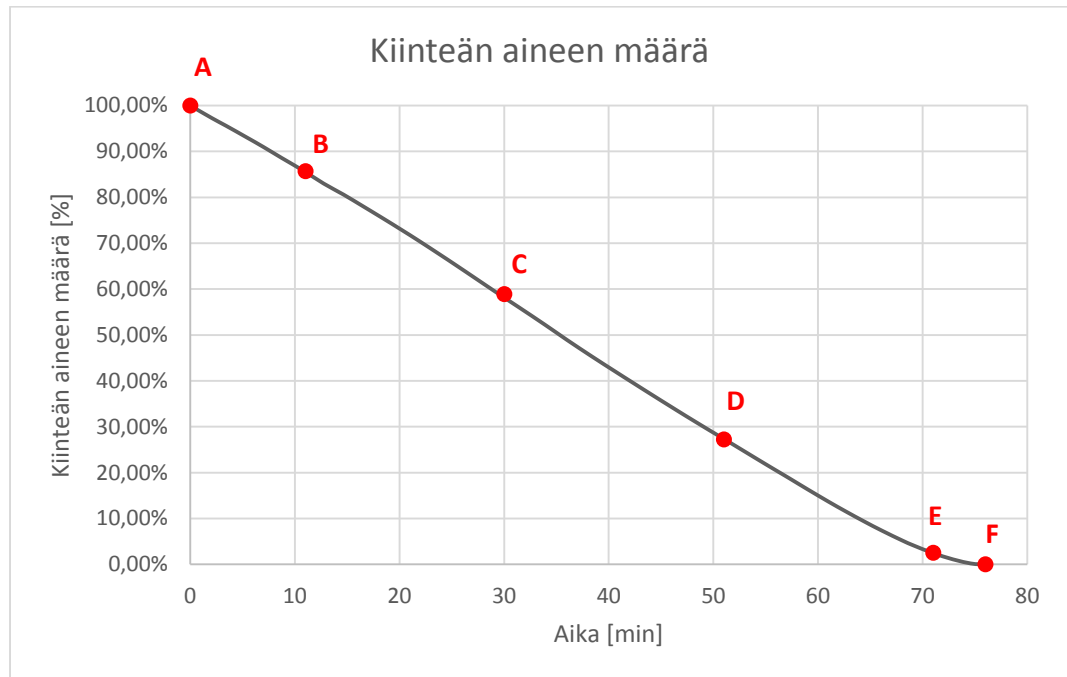
10.1.1 Sulamisaika ja lämmitysteho

Kuvassa 25 on esitetty sulamisen eteneminen eri ajanhetkillä. Tuleviin kaaviokuvaan on merkitty kyseisten pisteiden arvot.



Kuva 25. Sulamisen eteneminen A) 0 min, B) 11 min, C) 30 min, D) 51 min, E) 71 min, F) 76 min.

Kuvasta 26 nähdään, että sulaminen on suhteellisen lineaarista suurella teholla lämmitetyssä sylinterissä. Simuloinnissa sylinterissä oleva kiinteä UF_6 , jonka massa on kaksiulotteisessa tapauksessa 3556 kg, sulii kokonaan 76 minuutissa. Tietokoneaikaa simulointi vaati noin neljä viikkoa.



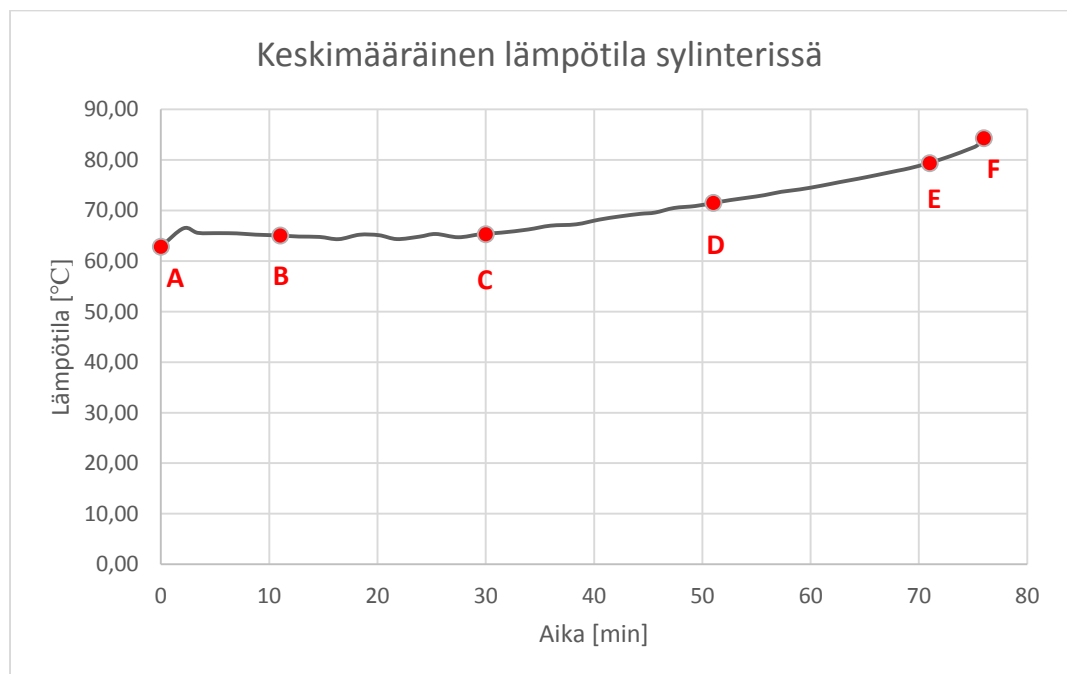
Kuva 26. Kiinteän aineen määrä sylinterissä ajan funktiona.

Taulukossa 14 on esitetty vertailu sulamisajasta ja keskimääräisestä lämmitystehosta numeerisen ja analyttisen laskennan välillä. Nyt analyttisessä ratkaisussa jätetään lämmönsiirtovastuksesta ilman konvektiivinen lämmönsiirtokerroin pois, koska seinämän lämpötila on vakio. Analyttinen ratkaisu antaa hieman suuremman keskimääräisen tehon kuin numeerinen ratkaisu. Tämä johtuu siitä, että analyttisessä ratkaisussa lämmönsiirtopinta-alojen arviointi muuttuvien olosuhteiden takia on hankalaa. Ratkaisussa käytettiin keskimääräiseksi arvioituja pinta-aloja, jotka numeerisen laskennan perusteella arvioitiin liian suuriksi. Eroa on kuitenkin vain 7 %.

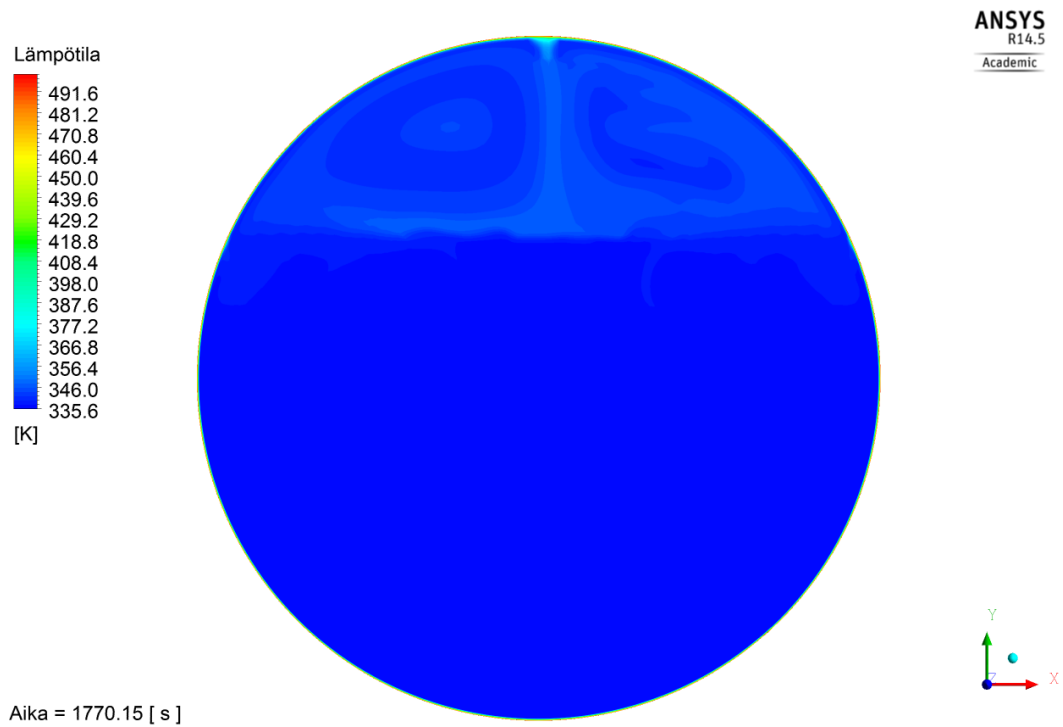
Taulukko 14. Lämmitystehon ja –ajan vertailua analyttisen ja numeerisen mallin välillä.

	Analyttinen ratkaisu	Numeerinen ratkaisu	Ero analyttiseen	Ero %
Keskimääräinen lämmitysteho	52473 W	48886 W	-3587 W	-6,84 %
Sulamiseen käytetty aika	3710 s	4564 s	854 s	23,01 %

Sulamisajassa eroa on 23 % huolimatta liian suureksi arvioidusta analyttisen ratkaisun keskimääräisestä lämmitystehosta. Tähän on syynä analyttisen mallin oletus, jonka mukaan kaikki sylinteriin tuotu energia kuluu sulamiseen. Kuvasta 27 nähdään, että oletus pitää paikkansa simulaation puoleen väliin asti, koska sylinterin keskimääräinen lämpötila ei nouse. Puolivälin jälkeen välillä C – D nestemassan lämpötila alkaa kuitenkin nousta ja osa energiasta kuluu lämpötilan nostamiseen.

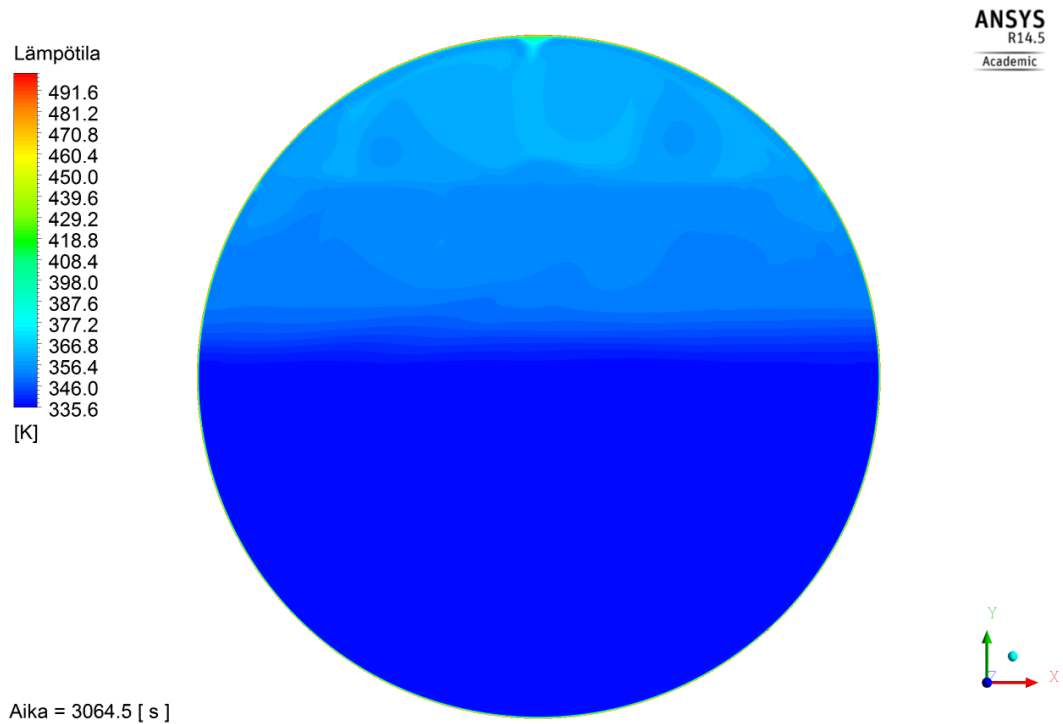
**Kuva 27.** Keskimääräinen lämpötila sylinterissä. Puolessa välissä sulamissykliä lämpötila sylinterissä alkaa nousta, joten kaikki energia ei mene sulamiseen.

Kuvassa 28 on esitetty lämpötila sylinterissä kohdassa C ($t = 30$ min). Vielä tässä vaiheessa energia siirtyy lähes kokonaan kiinteän aineen sulamiseen, koska nesteen ja kiinteän aineen lämpötiloissa ei ole havaittavaa eroa.



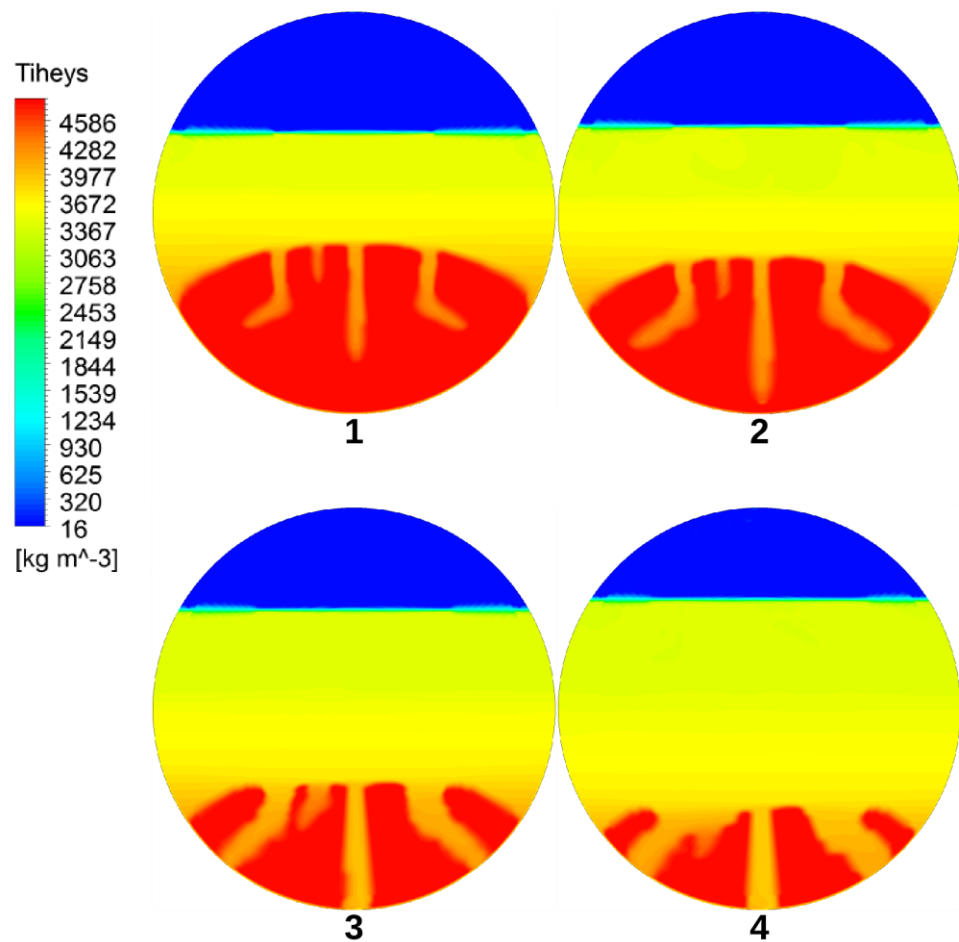
Kuva 28. Lämpötila sylinterissä kohdassa C ($t = 30$ min).

Kuvassa 29 on esitetty lämpötila sylinterissä kohdassa D ($t = 51$ min). Kuvasta on selkeästi nähtävissä lämmenneen nesteen ja kylmän kiinteän aineen ero. Tässä vaiheessa nesteeseen alkaa muodostua tiheyseroja, koska UF_6 :n tiheys on vahvasti riippuvainen lämpötilasta. Tiheyseroista seuraa vapaan konvektion virtauksia, joista lisää myöhemmässä luvussa.



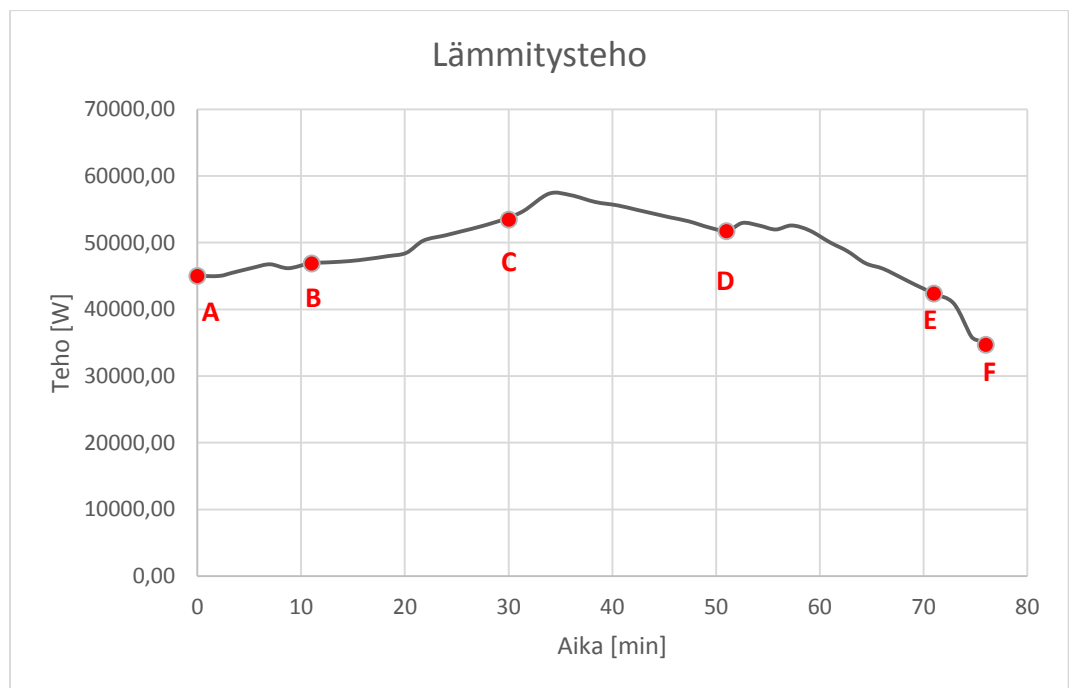
Kuva 29. Lämpötila sylinterissä kohdassa D ($t = 51$ min).

Kuvassa 30 on tarkasteltu tarkemmin väliä C – D, jonka aikana kiinteän kappaleen geometria muuttuu. Sulamiseen menevän lämpöenergian laskua selittää kuvien perusteella osin se, että kiinteän aineen kontaktipinta-ala sylinterin reunaan pienenee huomattavasti. Samoin kiinteän aineen lämmönsiirtopinta-ala nesteeseen muuttuu. Toisaalta nesteen kontaktipinta-ala sylinterin seinään kasvaa pinnan noustessa, joten nesteeseen siirtyy suurempi määrä lämpöenergiaa, josta seuraa lämpötilan nousu.



Kuva 30. Sulamisen eteneminen simuloinnin keskivaiheilla. 1) 30 min, 2) 34 min, 3) 42 min, 4) 49 min.

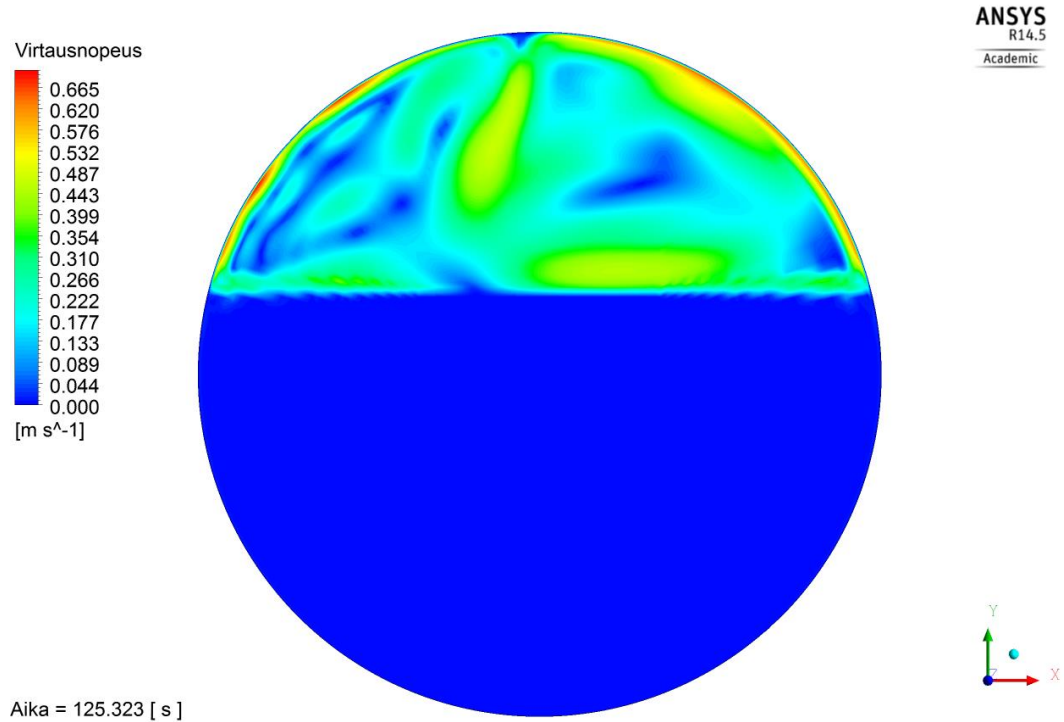
Kuvassa 31 on esitetty lämmitysteho koko simulaation ajalta. Kuvaajasta nähdään lämmitystehon tasainen nousu simulaation puoleen väliin asti. Tämän jälkeen teho alkaa laskea. Kuvaajan muotoa selittävät edellisessä luvussa esitetyt analyysit. Kun nesteen lämpötila välillä C – D alkaa nousta, nesteen lämpösisältö kasvaa. Tällöin neste ei pysty sitomaan sylinteriin tuotavasta tehosta yhtä suurta osaa kuin aiemmin. Lämmönsiirto nesteestä kiinteään heikkenee myös pienentyneen lämmönsiirtopinta-alan seurauksena.



Kuva 31. Lämmitysteho simulaation aikana.

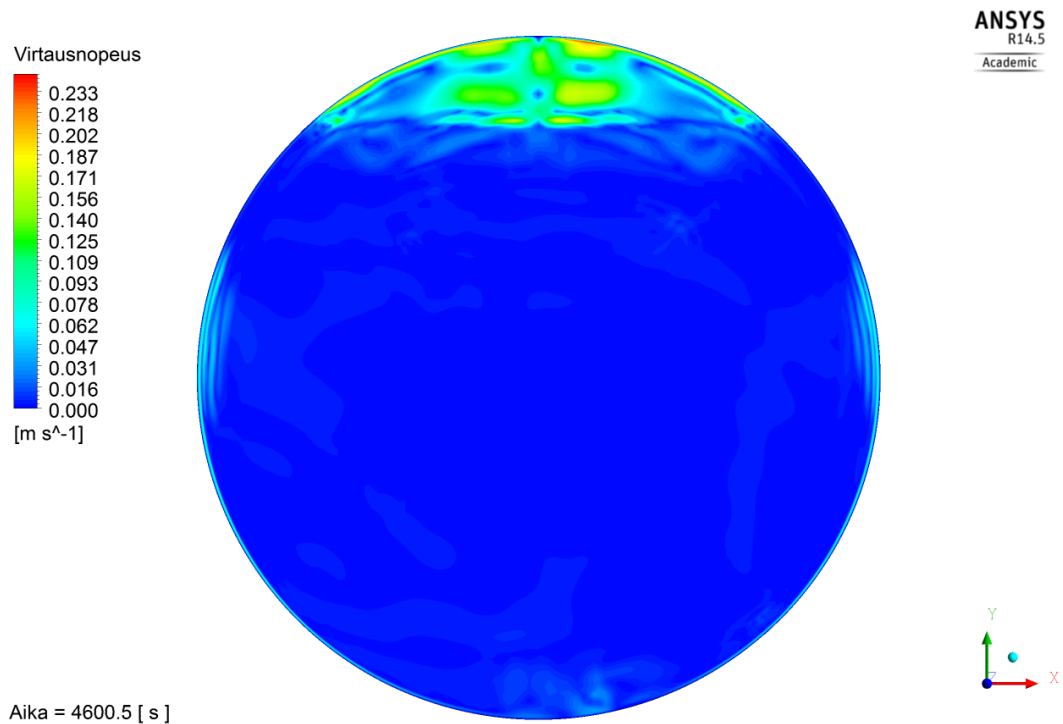
10.1.2 Luonnollinen konvektio sylinterissä

Sylinterin sisällä vallitsevat olosuhteet aiheuttavat nesteessä ja kaasussa luonnollisista tiheyseroista johtuvia konvektiivisia virtauksia. Kuvassa 32 on kuvattu sylinterin nopeuskenttä simuloinnin alussa. Sylinterin yläosassa oleva kaasu virtaa luonnollisen konvektion ansiosta siirtäen lämpöä reunoilta kiinteään aineeseen.



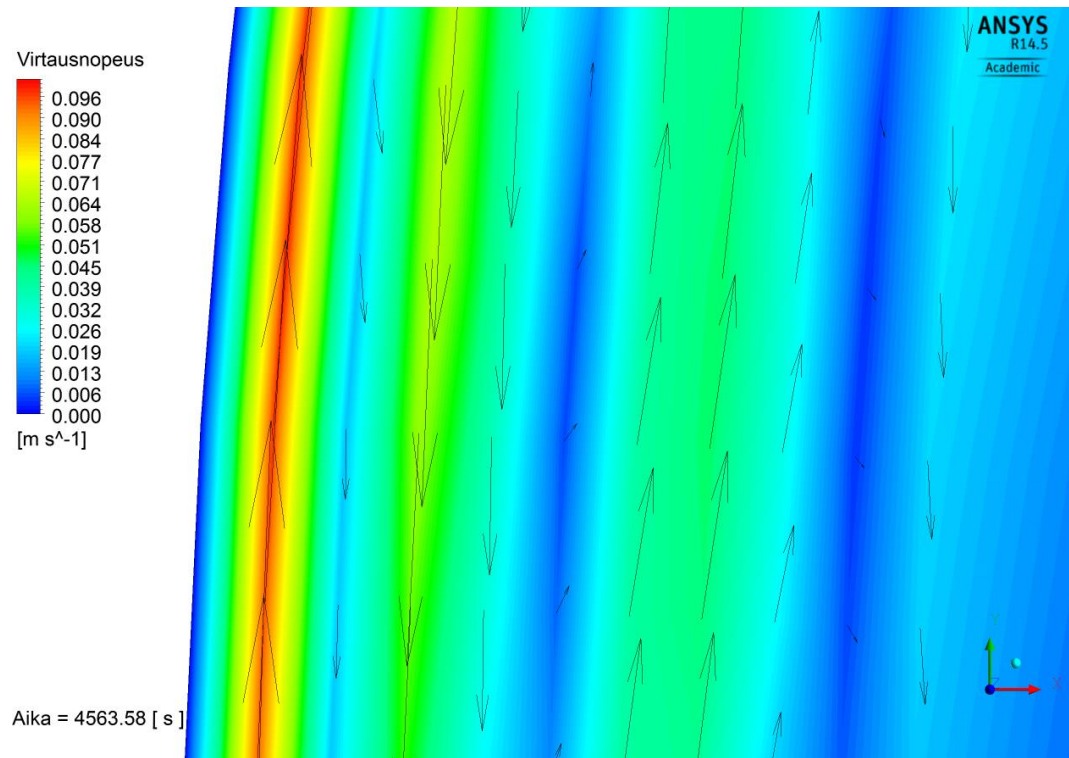
Kuva 32. Virtausnopeudet sylinterissä simuloinnin alkupuolella $t = 125$ s, kun tilanne on tasoittunut.

Kuvassa 33 on esitetty sylinterin nopeuskenttä simulaation lopussa. Kuvasta on nähtävissä myös nesteessä tapahtuvat virtaukset, jotka homogenisoivat nestettä. Virtausnopeudet kaasussa ovat laskeneet kolmasosaan alkutilanteesta.

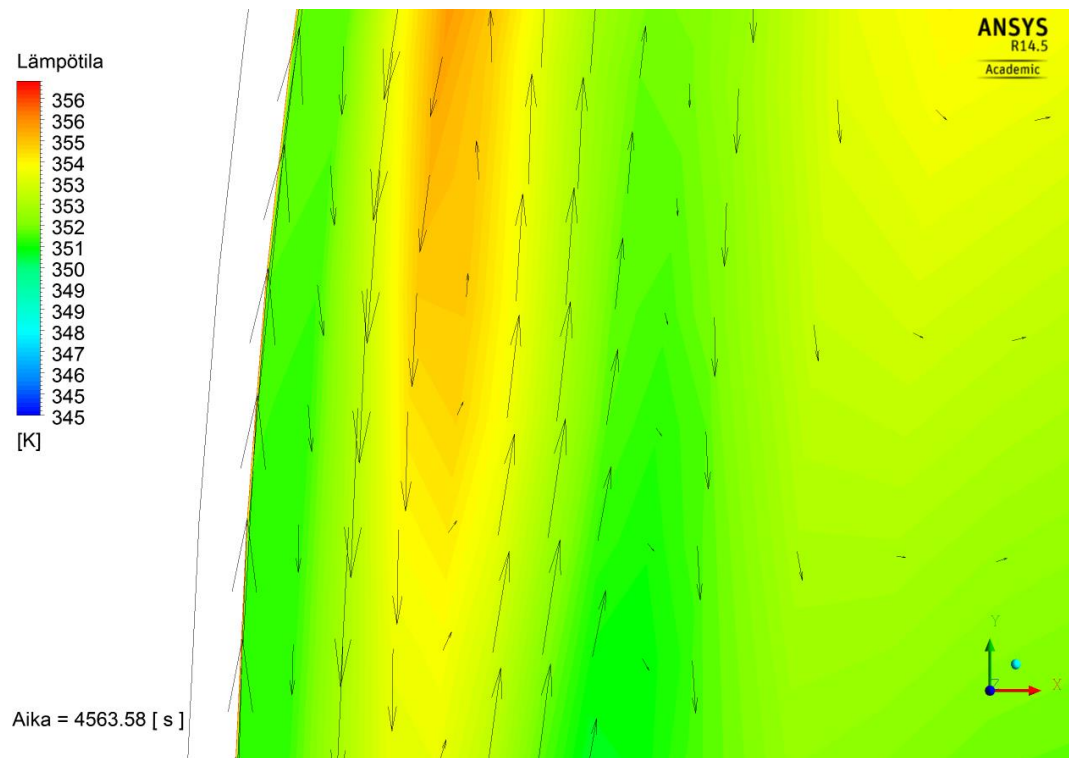


Kuva 33. Virtausnopeudet sylinterissä simulaation lopussa.

Kuvassa 34 on esitetty nopeusvektorit ja virtausnopeudet sylinterin reunalla neste-faasissa. Sylinterin reunassa virtaa kuumempaa ainetta, jonka tiheys on pienempi kuin kylmemmän keskellä olevan aineen tiheys. Kuvassa 35 nopeusvektorit on esitetty lämpötilojen kanssa samassa kuvassa.



Kuva 34. Nopeusvektorit ja virtausnopeudet nestefaasissa simulaation loppupuolella.



Kuva 35. Nopeusvektorit ja lämpötilat nestefaasissa simulaation loppupuolella.

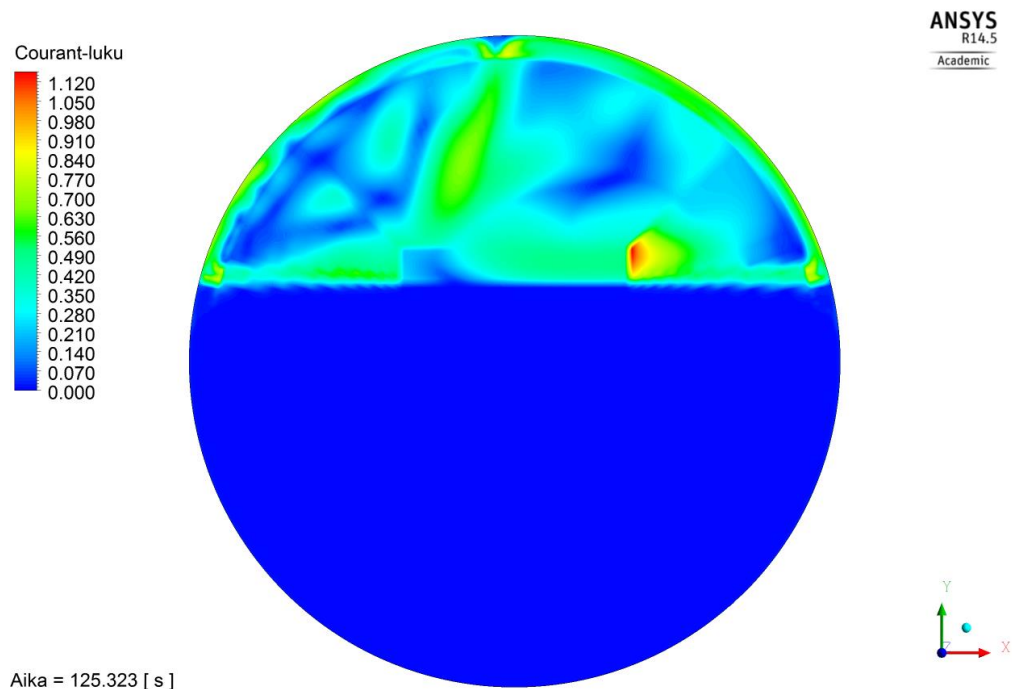
10.1.3 Courant-luku

Simulaatiossa käytettyä mallia säädettiin nopeammaksi muokkaamalla Courant-lukua. Fluentin käyttämä aika-askel on määritelty (Ansys Inc., 2012b, s. 1429)

$$\Delta t = \frac{\text{CFL}}{\max(\sum \frac{\text{solusta ulosvirtaavat vuot}}{\text{tilavuus}})}, \quad (93)$$

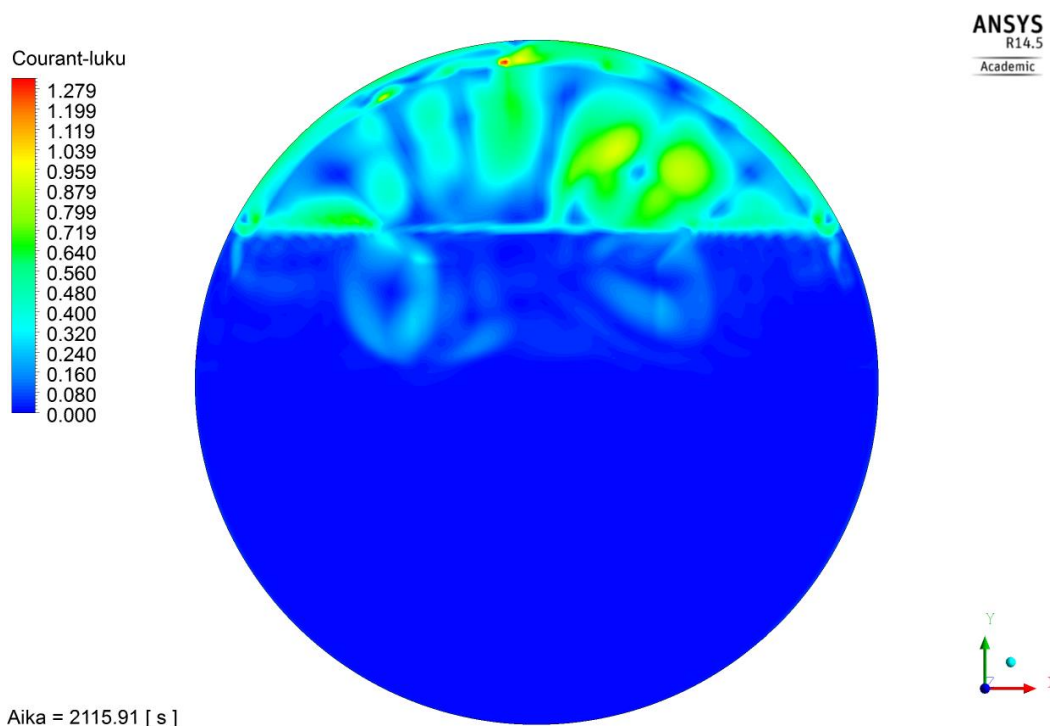
missä CFL on Courant-luku ja $\sum(\frac{\text{solusta ulosvirtaavat vuot}}{\text{tilavuus}})$ lasketaan jokaiselle laskentisolulle. Fluent käyttää koko laskentatilavuudesta saatua suurinta arvoa tästä summasta, jonka perusteella aika-askel lasketaan.

Fluentissa Courant-luku on oletuksena 1, mutta lukua säädettiin suuremmaksi pidempien aika-askeleiden saavuttamiseksi. Kuvassa 36 on kuvattu Courant-luku simulaation alkupuolella. Kuten aiemmin todettiin, kaasufaasin osuus lämmönsiirrostä on huomattavasti pienempi kuin nestefaasin kautta siirtyvä lämpö. Suurimmat Courant-arvot ovat kuvien perusteella jatkuvasti kaasufaasin puolella, joten on perusteltua käyttää suurempia Courant-lukuja simulaation aikana ilman tuloksien luotettavuuden heikentymistä.



Kuva 36. Courant-luku simulaation alussa.

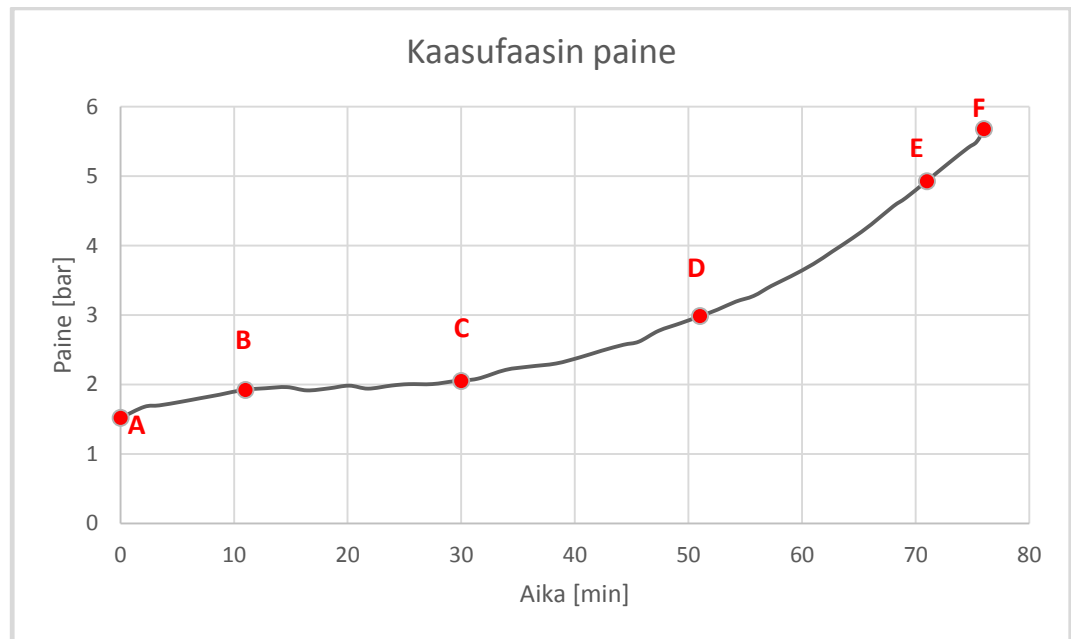
Kuvassa 37 on esitetty Courant-luku simulaation puolessa välissä. Kaasufaasi on edelleen vallitsevana faasina virtausnopeuksissa ja näin ollen myös Courant-luvun suuruudessa.



Kuva 37. Courant-luku simulaation puolessa välissä.

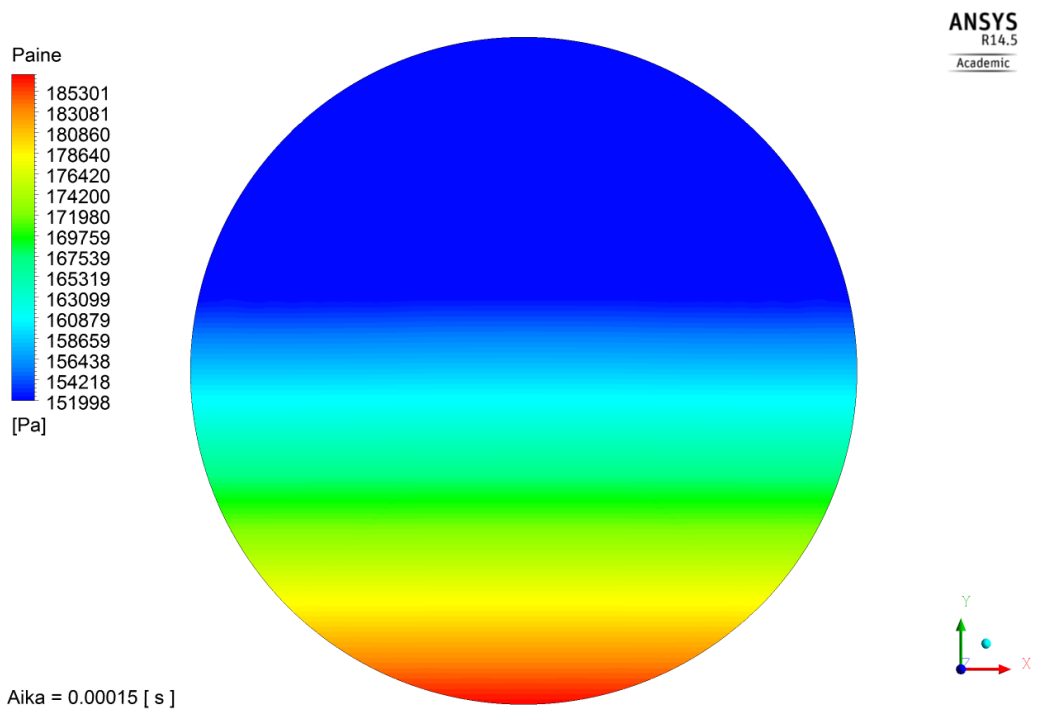
10.1.4 Paineen nousu

Sylinterin paineen nousu on alussa hidasta, mutta loppua kohti nousu on jyrkempää. Syynä paineen nousun nopeutumiseen on kiinteän aineen tiheyden lasku sulamisen takia. Nestemäinen UF_6 vie sylinterissä enemmän tilaa kuin kiinteä, joten kaasu pakkautuu tiiviimmin sylinterin yläosaan. Sylinterin geometrian vuoksi pinta nousee sulatuksen lopussa nopeammin ja kaasun viemä tilavuus pienenee. Tästä seuraa nopea paineen nousu. Kuvassa 38 on esitetty koko sulatukseen aikainen paine sylinterissä.

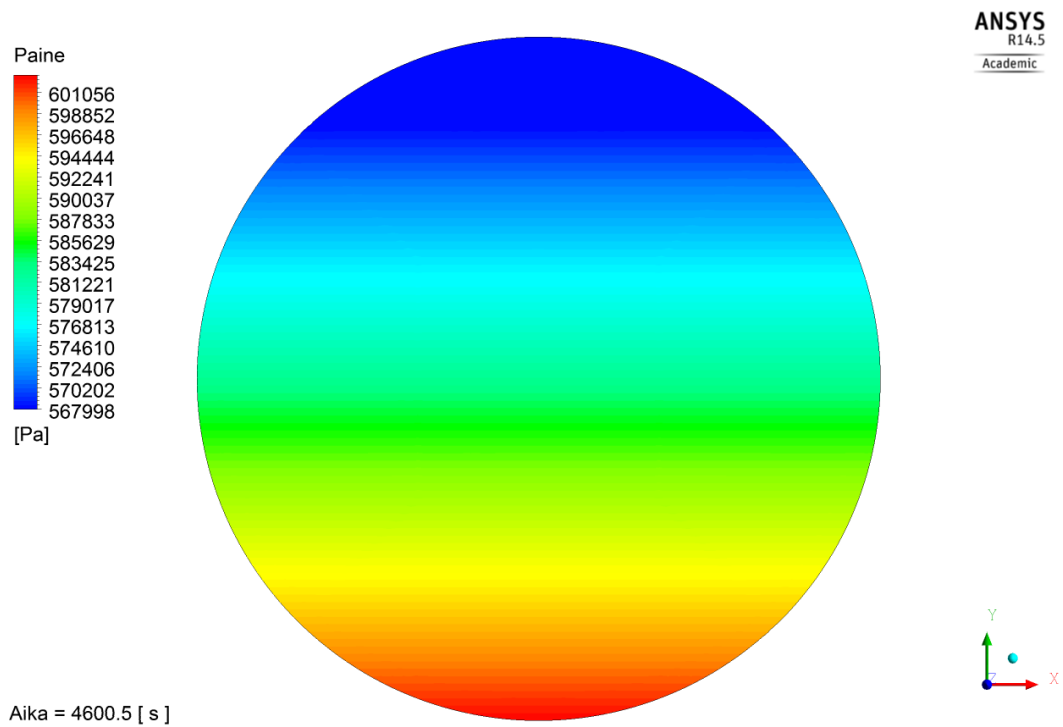


Kuva 38. Sylinterin paine lämmityksen aikana.

Kuvista 39 ja 40 nähdään, että painejakauma sylinterissä on tasainen alusta loppuun saakka. Hydrostaattisen paineen takia sylinterin pohjalla on nesteen oman painon seurauksena suurempi paine kuin sylinterin yläosassa, jossa on pelkästään kaasua.



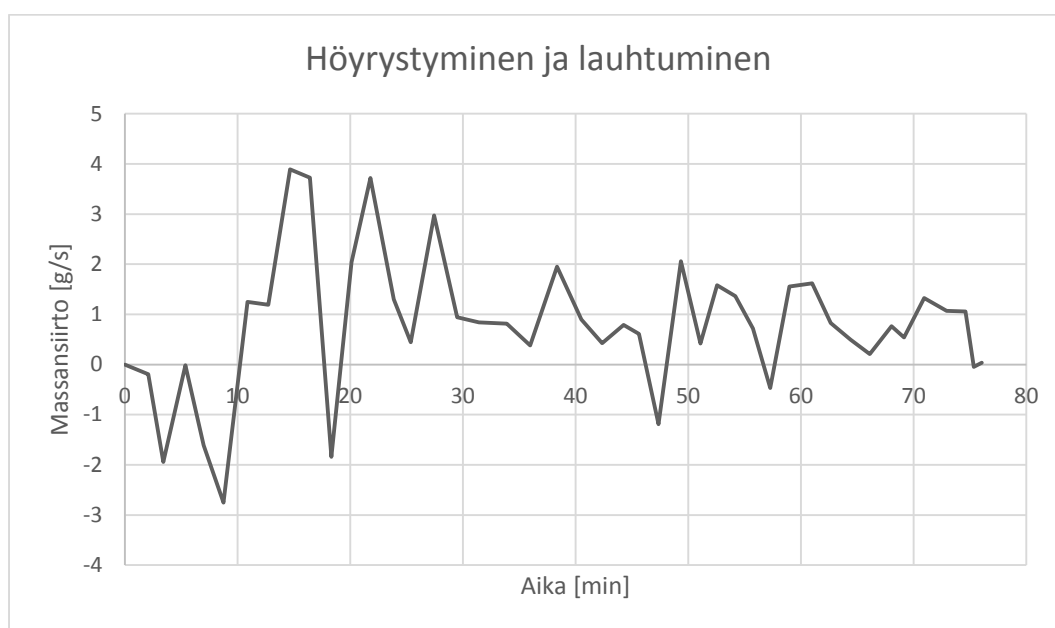
Kuva 39. Painejakauma sylinterissä simuloinnin alussa.



Kuva 40. Painejakauma sylinterissä simuloinnin lopussa.

10.1.5 Höyrystyminen ja lauhtuminen

Analyttinen laskelma ei ota huomioon myöskään höyrystymiseen kuluvaa tai lauhtumisessa vapautuvaa energiaa, jonka numeerinen malli laskee. Kuvassa 41 on esitetty faasien välinen massansiirto simulaation edetessä. Positiivinen suunta tarkoittaa lauhtumista ja negatiivinen viittaa höyrystymiseen.



Kuva 41. Kokonaishöyrystyminen ja –lauhtuminen sylinterissä. Positiivinen luku tarkoittaa lauhtumista ja negatiivinen viittaa höyrystymiseen.

Höyrystyminen alkaa alussa voimistua, mutta muuttuu hyvin nopeasti lauhtumiseksi. Koko simulaation keskiarvoksi saadaan 0,76 g/s, joka on lauhtumista. Höyrystymisen muuttuminen äkillisesti takaisin lauhtumiseksi on seurausta paineen noususta. Paineen noustessa aikavälillä 0 – 10 min arvosta 152 kPa arvoon 200 kPa nousee myös UF_6 :n höyrystymislämpötila (ks. faasidiagrammi osio 3.3). Lämpötila pysyy kuitenkin vielä pitkään samana paineen yhä noustessa.

Lauhtumisessa vapautuva energia on koko simulaation ajalta keskimäärin

$$E = 0,76 \frac{\text{g}}{\text{s}} \cdot 4563 \text{ s} \cdot 80 \frac{\text{kJ}}{\text{kg}} \cdot \frac{1 \text{ kg}}{1000 \text{ g}} = 277 \text{ kJ}. \quad (94)$$

Lauhtumisessa vapautuva energia vastaa siis keskimääräisellä lämmitysteholla sylinteriin tuotua energiamäärää, joka tuodaan sylinteriin ajassa

$$t = \frac{E}{P} = \frac{277 \text{ kJ}}{49 \frac{\text{kJ}}{\text{s}}} = 5,65 \text{ s}. \quad (95)$$

Energiamäärä on siis suhteellisen pieni energiaan, joka sylinteriin tuodaan, joten analyttisen laskennan virhe ei johdu lauhtumisesta tai höyrystymisestä.

10.1.6 Mallin massahävikki

Volume of Fluid – mallin faasirajapinnan interpolointi voi hukata massaa, jos laskentahila on liian harva. Taulukossa 15 on esitetty massaero simulaation alun ja lopun välillä. Tuloksesta voidaan päätellä, että laskentahila on tarpeeksi tiheä ja malli toimii ilman merkittävää massan hukkaamista.

Taulukko 15. Mallin massahävikki simuloinnin aikana.

Massa alussa [kg]	Massa lopussa [kg]	Ero [kg]	Ero [%]
3576,487	3574,671	1,816	-0,051 %

10.1.7 Yhteenveto simulaatiosta

Simulaation antamat tulokset ovat lupaavia. Sylinterin sisällä tapahtuvat ilmiöt on nähtävissä lopputuloksista pääpiirteittäin niin kuin voidaan olettaa. Fysiikanmallinnuksen toimivuudesta kertoo pinnankorkeuden nousu sulamisen edetessä, joka johtuu tiheyden laskua seuraavasta tilavuuden kasvusta. Tilavuuden kasvun seurauksena myös paine nousee huomattavasti alkutilanteeseen verrattuna kaasun pakkautuessa sylinterin yläosaan. Tämän vuoksi simulaatiossa on perusteltua ja välttämätöntä käyttää ratkaisijaa, joka ottaa huomioon muuttuvan paineen (Floating Operating Pressure).

Saatuja lämmitystuloksia ei voi suoraan verrata todelliseen sulatusprosessiin. Syynä tähän on alkuoletus, jonka mukaan sylinterissä on sulamisen alkaessa homogeeninen lämpötilakenttä. Todellisuudessa, kun sulaminen alkaa, lämpötila on reunoilla suurempi kuin sylinterin keskellä. Simulointi tulisi aloittaa alkutilanteesta, jossa kiinteä UF₆ on huoneenlämmössä ja alipaineessa. Tämän tyyppiseen simulointiin tarvittaisiin tästä mallista vielä puuttuva sublimaatiota mallintava mekanismi, joka mallintaisi reunoilla kiinteästä aineesta sublimoituvaa kaasua, joka taas lämmittäisi kiinteää uraaniheksafluoridia. Simulointiaika olisi kuitenkin tähän

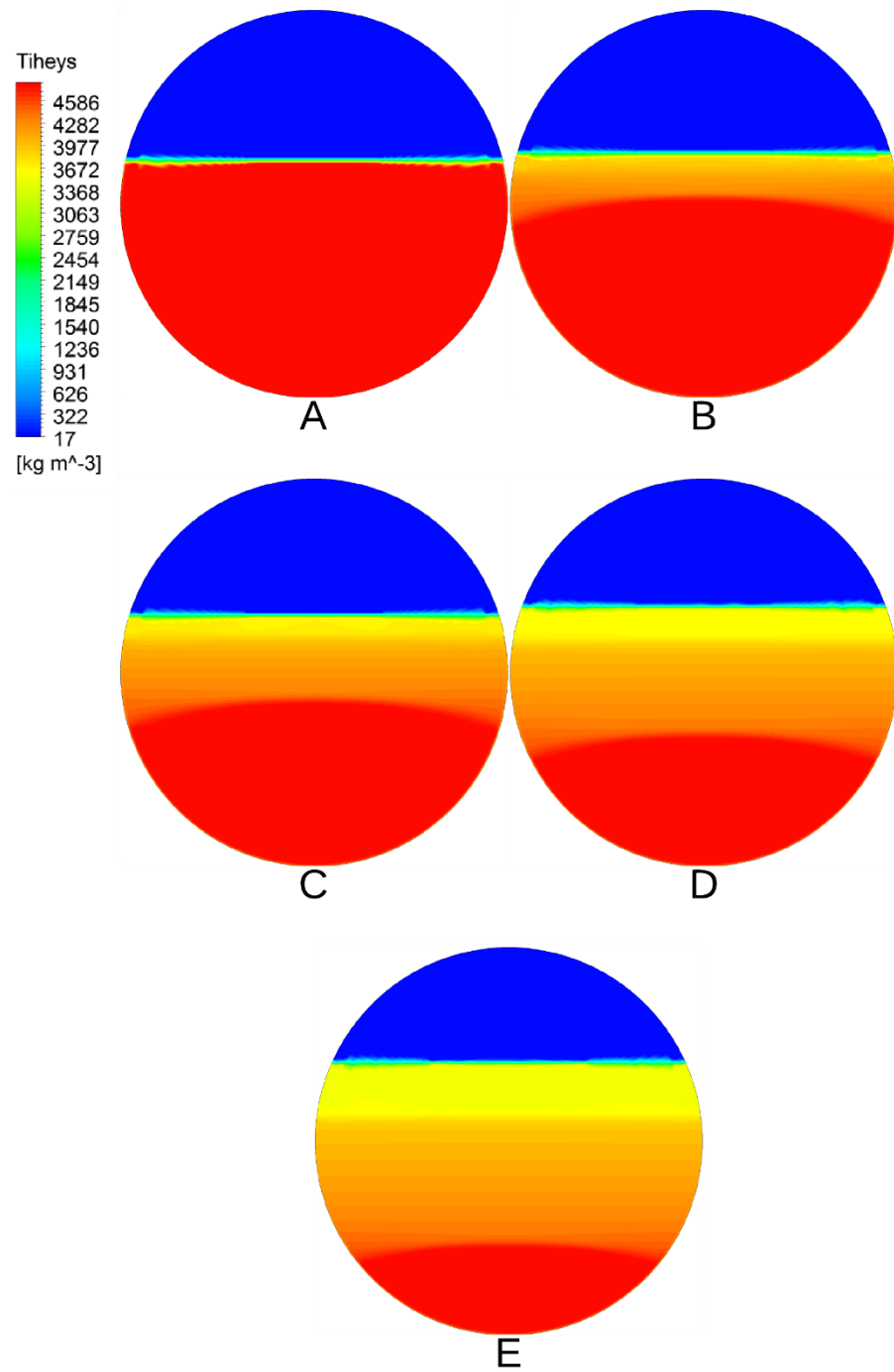
tapaukseen epäkäytännöllisen pitkä. Tässä työssä tehty mallinnus antaa kuitenkin arvokasta tietoa sulamisen etenemisestä lämmityksen aikana.

10.2 Lämmityssimulaatio

Tätä simulaatiota ei ehditty suorittaa loppuun saakka diplomityön aikataulun takia. Sylinteriin jäi 40 % kiinteää ainetta, kun simulaatio keskeytettiin. Jäljellä oleva sulamisaika ekstrapoloitiin ottaen huomioon sulamisen lineaarisuuden, joka testisimulaation perusteella huomattiin.

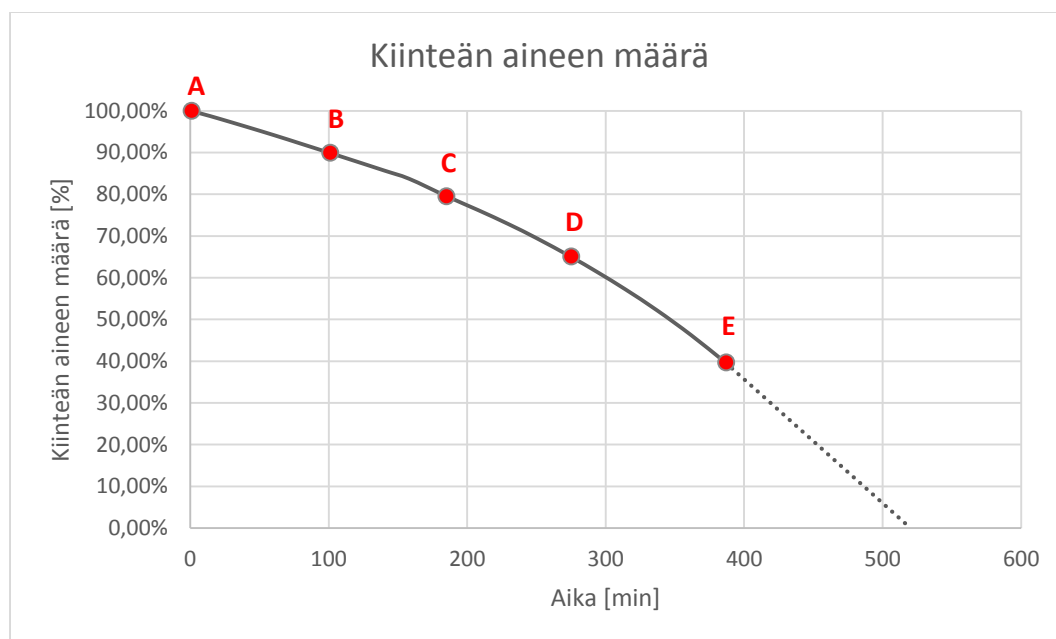
10.2.1 Sulamisaika ja lämmitysteho

Kuvassa 42 on esitetty sulamisen eteneminen simulaation alusta 387 minuuttiin asti. Sulamisen etenemisessä on huomattava ero testisimulaatioon. Sulaminen näyttää olevan tasaisempaa, eikä kiinteään aineeseen synny nesteeseen kaivertamia käytäviä. Pinnankorkeus ei ole vielä noussut simulaation tässä vaiheessa huomattavaa määrää, toisin kuin testisimulaatioissa, jossa sulaminen tapahtui nopeammin. Tämän takia kaasun viemä tilavuus ei ole vielä pienentynyt ja paine ei ole noussut.



Kuva 42. Sulamisen eteneminen A) 1 min, B) 101 min, C) 185 min, D) 275 min, E) 387 min.

Kuvassa 43 on esitetty sulamisen eteneminen. Toisin kuin testisimulaatiossa, sulaminen kiihtyy loppua kohti. Kuvassa 43 loppusimulaatio on ekstrapoloitu olettaen sulamisen pysyvän samanlaisena loppuun asti. Kuvaajan perusteella sylinterissä oleva kiinteä UF_6 , jonka massa on kaksiulotteisessa tapauksessa 3556 kg, sulaisi kokonaan noin 520 minuutissa.



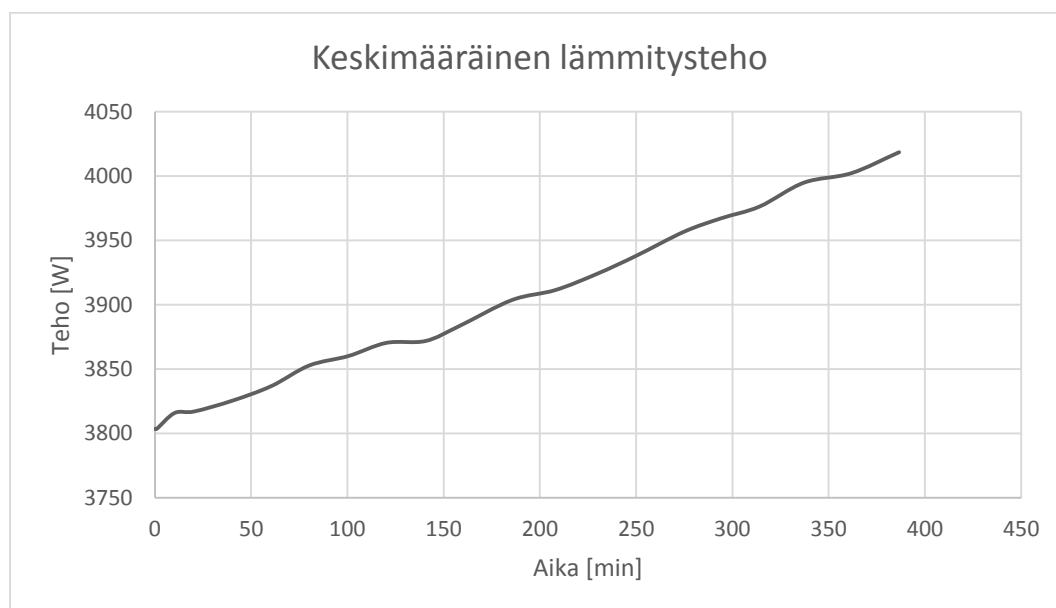
Kuva 43. Kiinteän aineen määrä sylinterissä. Katkoviivalla esitetty osuus on ekstrapoloitu olettaen sulamisen olevan lineaarista.

Taulukossa 16 on vertailtu numeerisen simuloinnin ja analyttisen laskennan tuloksia. Numeerisen simuloinnin keskimääräinen lämmitysteho on laskettu vain simuloitulta ajalta, joten luku on luultavasti suurempi. Analyttisesti laskettu keskimääräinen lämmitysteho poikkeaa tässä simuloitusta numeerisesta lasketusta tehosta 8 %, joka on lähes saman verran kuin testisimulaation tapauksessakin. Sulamisajan laskennassa tulee suurempi virhe, koska sulamisaika on ekstrapoloitu.

Taulukko 16. Lämmitystehon ja –ajan vertailua analyyttisen ja numeerisen mallin välillä.

	Analyttinen ratkaisu	Numeerinen ratkaisu	Ero analyyttiseen	Ero %
Keskimääräinen lämmitysteho	4236 W	3896 W	-339 W	-8,00 %
Sulamiseen käytetty aika	765 min	520 min	-245 min	-32,03 %

Lämmitysteho käyttäytyi tässä simulaatiossa eri tavalla kuin testisimulaatiossa kuten Kuvasta 44 nähdään. Keskimääräinen lämmitysteho kasvoi tasaisesti simulaation edetessä, toisin kuin testisimulaatiossa. Selityksenä ilmiölle on se, että sylinterissä oleva UF₆ pystyisi sitomaan enemmänkin lämpöenergiaa kuin sylinteriin tuodaan, joten teho kasvaa tasaisesti kun nesteen pinnankorkeus ja lämmönsiirtopinta-ala kasvavat.

**Kuva 44.** Keskimääräinen lämmitysteho.

Kuvassa 45 on esitetty keskimääräinen lämpötila sylinterissä. Simulaation alussa tapahtui yhden asteen nousu keskimääräisessä lämpötilassa, joka on johtunut ilmeisesti numeerisesta ongelmasta simulaation alussa. Kuvaajasta nähdään, että lähes kaikki sylinteriin tuotu teho on mennyt sulamisen ylläpitämiseen, koska keskimääräinen lämpötila on pysynyt koko ajan lähes vakiona.

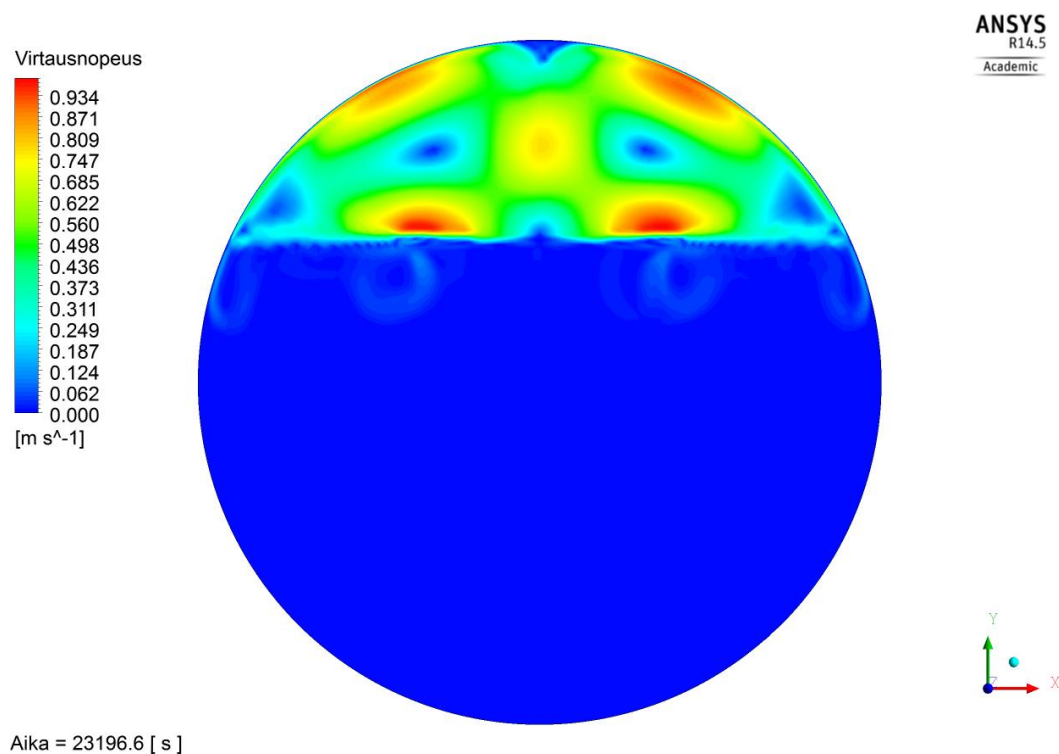


Kuva 45. Keskimääräinen lämpötila sylinterissä.

Analyttisen laskennan oletus siitä, että kaikki sylinteriin tuotu energia kuluu sulamiseen pitää tässä tapauksessa paikkansa. On kuitenkin mahdoton sanoa pitäisikö oletus paikkansa loppuun asti. Testisimulaatiossa sulamisnopeus laski huomattavasti loppua kohti, mikä voi tässäkin olla mahdollista pienentyneen kiinteän aineen lämmönsiirtopinta-alan takia.

10.2.2 Luonnollinen konvektio sylinterissä

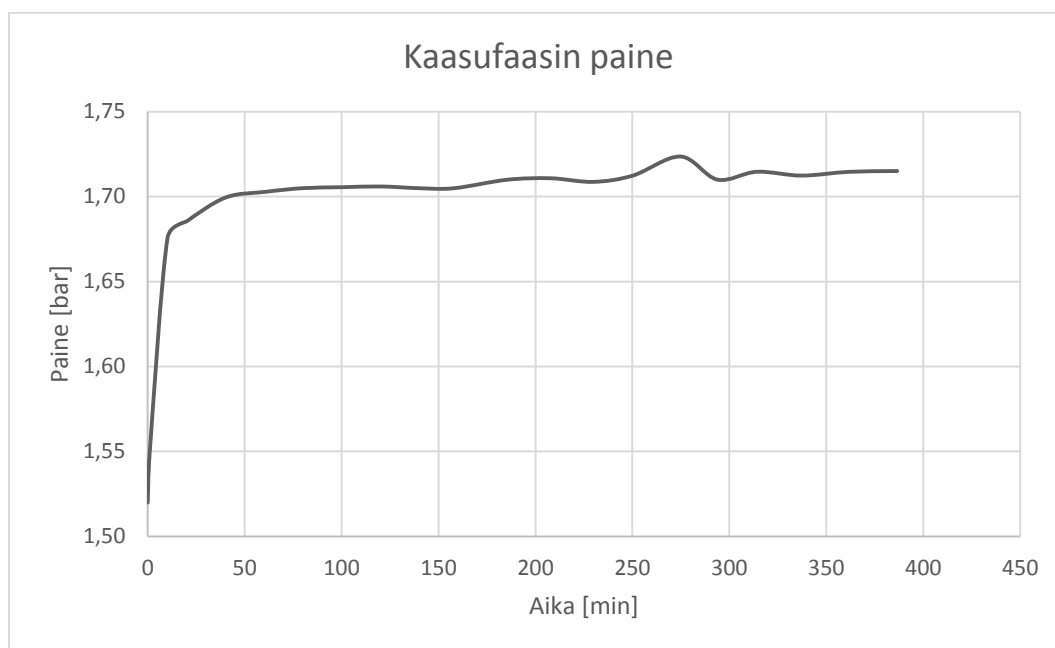
Kuvassa 45 on esitetty virtausnopeudet simulaation lopussa, kun kiinteää ainetta on sylinterissä vielä 40 % jäljellä. Kaasufaasin virtausnopeudet ovat suurimmat aivan kuten testisimulaatiossakin.



Kuva 46. Virtausnopeudet sylinterissä simulaation lopussa.

10.2.3 Paineen nousu

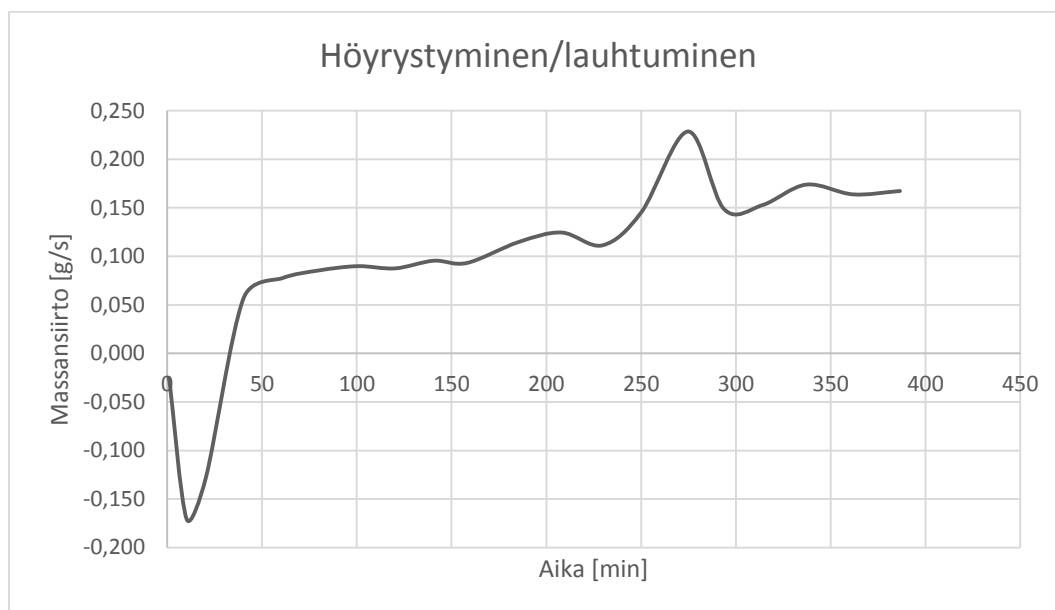
Kuvassa 47 on esitetty paineennousu sylinterissä simulaation ajalta. Paine vastaa testisimulaation käyrää, koska simulaatio ei ole edennyt vielä vaiheeseen, jossa pinnankorkeus alkaa nousta ja paine kasvaa.



Kuva 47. Kaasufaasin paine sylinterissä.

10.2.4 Höyrystyminen ja lauhtuminen

Simulaatiossa höyrystyminen ja lauhtuminen noudattavat samanlaista trendiä kuin testisimulaatiossakin. Alussa sylinterissä tapahtuu höyrystymistä, mutta kun paine kasvaa tarpeeksi alkaa höyrystyminen vaihtua lauhtumiseksi ja energiaa vapautuu. Syynä massansiirron suunnan vaihtumiselle on höyrystymislämpötilan kasvu paineen nousun seurauksena. Lämpötila ei sylinterissä nouse, joten kaasua alkaa lauhtua takaisin nesteeksi.



Kuva 48. Höyrystyminen ja lauhtuminen sylinterissä.

Koko simulaation keskiarvoksi saadaan 0,084 g/s, joka on lauhtumista. Lauhtumisessa vapautuva energia on koko simulaation ajalta keskimäärin

$$E = 0,084 \frac{\text{g}}{\text{s}} \cdot 23197 \text{ s} \cdot 80 \frac{\text{kJ}}{\text{kg}} \cdot \frac{1 \text{ kg}}{1000 \text{ g}} = 155 \text{ kJ}. \quad (96)$$

Lauhtumisessa vapautuva energia vastaa siis keskimääräisellä lämmitysteholla sylinteriin tuotua energiamäärää, joka tuodaan sylinteriin ajassa

$$t = \frac{E}{P} = \frac{155 \text{ kJ}}{3,9 \frac{\text{kJ}}{\text{s}}} = 40 \text{ s}. \quad (97)$$

Simulaation pituuteen suhteutettuna energiamäärä on siis merkityksetön.

10.2.5 Yhteenveto simulaatiosta

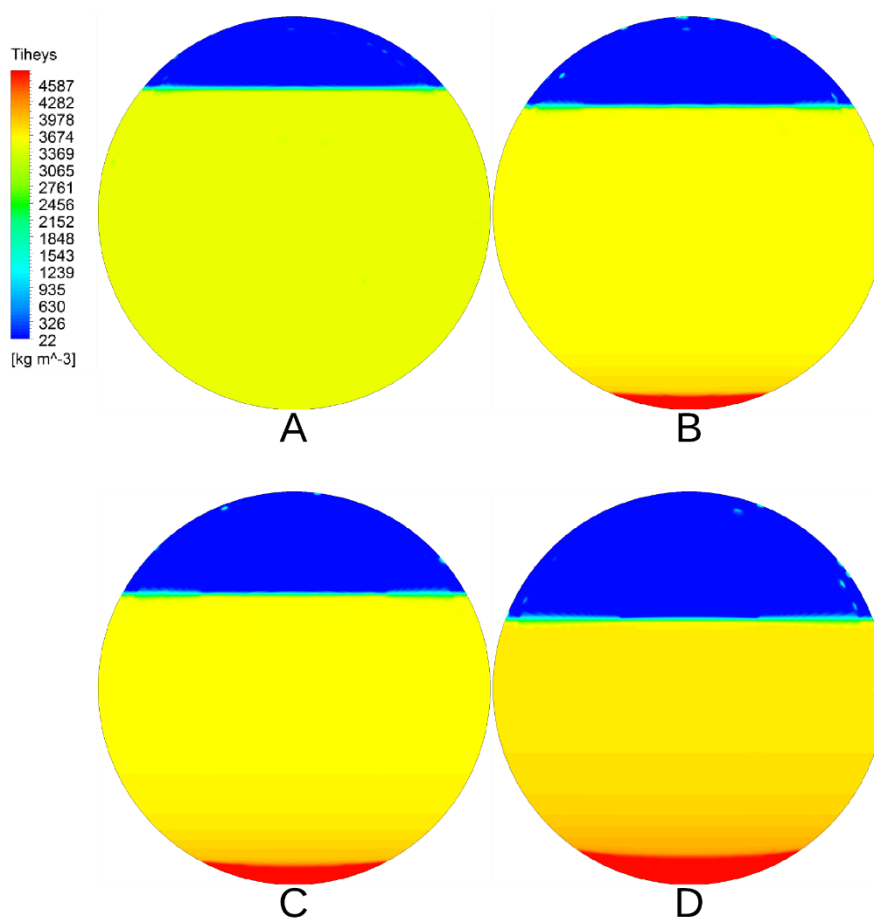
Malli toimi tässäkin simulaatiossa, kuten odotettiin. Vaikka simulaatiota ei viety loppuun, on sylinterissä havaittavissa samat ilmiöt kuin testisimulaatiossakin. Sulamisaikojen vertailu numeerisen ja analyyttisen ratkaisun välillä on hankalaa, koska todellinen numeerisesti laskettu sulamisaika jouduttiin ekstrapoloimaan. Analyyttisesti laskettu lämmitysteho on kuitenkin yhtä tarkka kuin testisimulaatiossakin laskettu lämmitysteho.

10.3 Jäähdytys­simulaatio

Tätä simulaatiota ei ehditty suorittaa loppuun saakka diplomityön aikataulun takia. Sylinterissä oli kiinteytynyt 33 % nestemäisestä aineesta, kun simulaatio keskeytettiin.

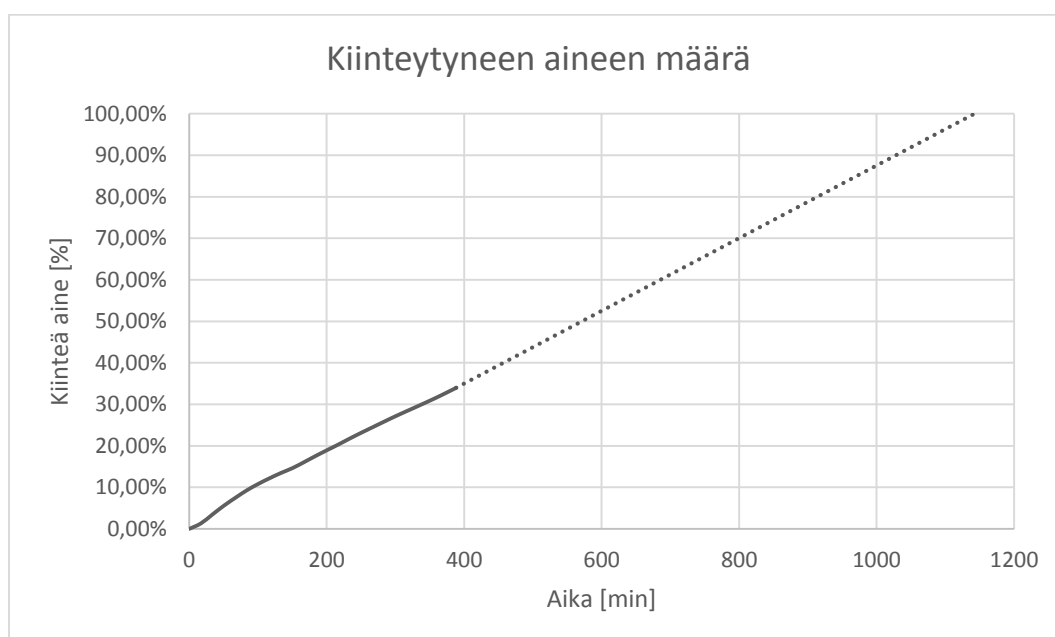
10.3.1 Kiinteytysaika ja jäähdytysteho

Kuvassa 49 on esitetty kiinteytymisen eteneminen simulaation edetessä. Jäähdytminen on hidasta koko mallinnuksen ajan. Aikaa simulaatiossa oli kulunut 388 min, kun nesteestä kiinteytynyttä materiaalia oli sylinterissä 33 %. Jäähdytminen tapahtuu nesteessä tasaisesti ja lopussa on huomattavissa tiheyden kasvu jo osittain jäätyneestä nesteestä.



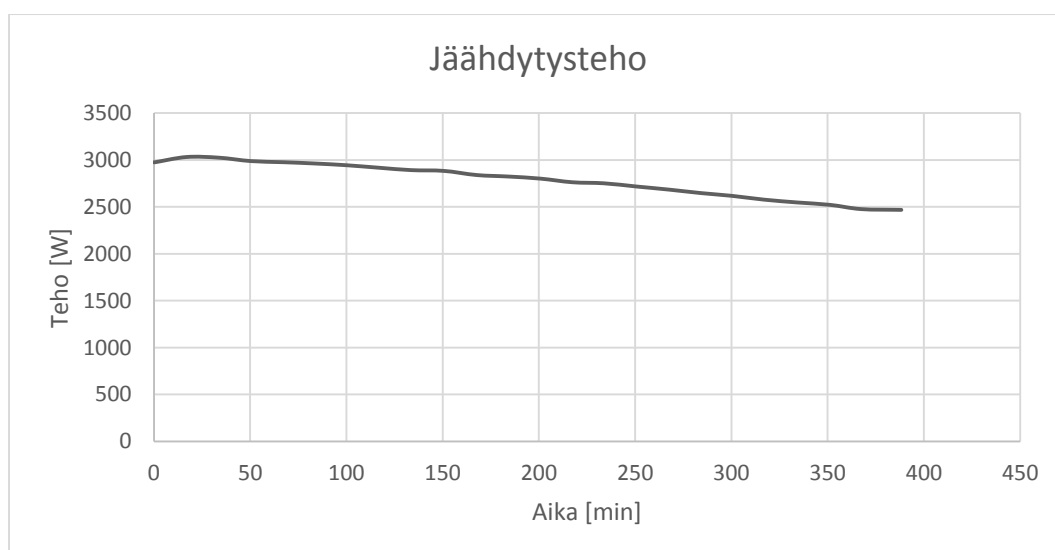
Kuva 49. Kiinteytyminen simulaation edetessä A) 0 min, B) 168 min, C) 250 min, D) 388 min.

Kuvassa 50 on esitetty kiinteytyneen aineen määrä sylinterissä. Kiinteytyminen on simulaation alusta simuloituun pisteeseen asti lineaarista ja alun perusteella ekstrapoloituna kaikki sylinterissä oleva nestemäinen aine kiinteytyisi 1142 minuutissa (noin 20 h).



Kuva 50. Kiinteytymisen eteneminen. Kuvaajassa katkoviivalla merkitty osa on ekstrapoloitu simulaation alun perusteella olettaen kiinteytymisen olevan lineaarista.

Kuvassa 51 on esitetty jäähdytysteho simulaation ajalta. Kuvaajasta nähdään, että teho laskee tasaisesti. Laskevan tehon selittää sylinterin reunalle kertyvä kiinteä aine, joka toimii eristeen tavoin kiinteytymisen edetessä. Odotettavissa olisi jäähdytystehon laskeminen edelleen loppua kohti.



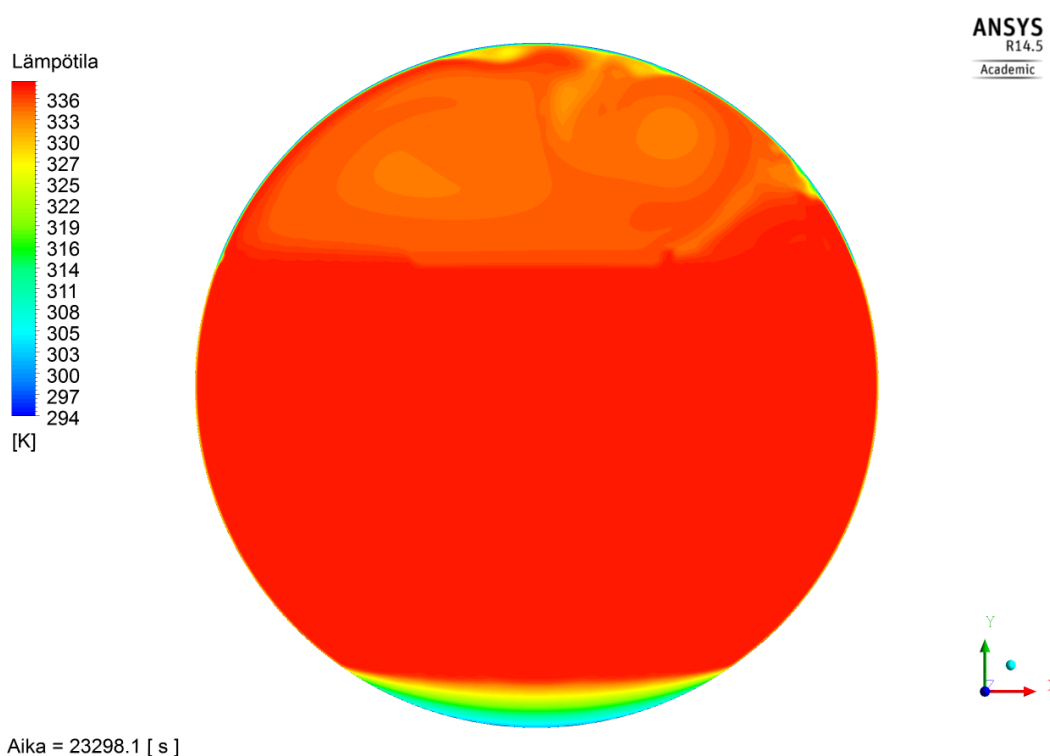
Kuva 51. Jäähdytysteho simulaation ajalta.

Kuvassa 52 on esitetty keskimääräinen lämpötila sylinterissä. Lämpötila sylinterissä laskee tasaisesti. Tämä kertoo siitä, ettei kaikki jäähdysteho mene kiinteytymiseen vaan osa kiinteästä aineesta muodostaa eristävän kerroksen sylinterin pohjalle. Osa tästä tehosta menee tämän kiinteytyneen kappaleen lämpötilan laskemiseen.



Kuva 52. Keskimääräinen lämpötila sylinterissä.

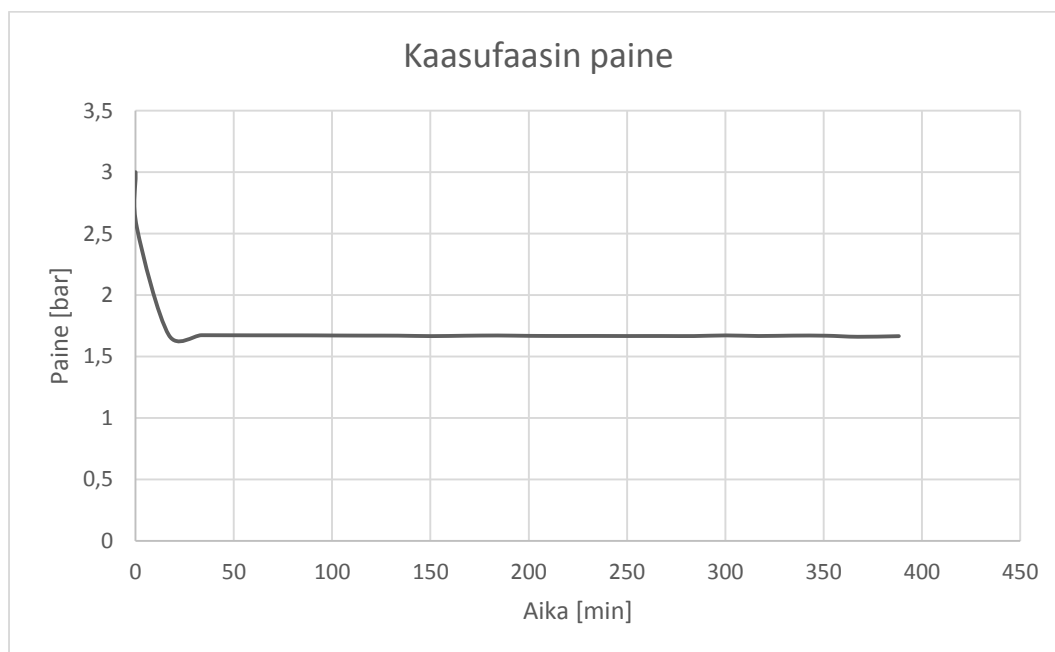
Kuvassa 53 on esitetty lämpötilat sylinterissä simulaation lopussa. Edellä esitetty kuvaaja keskimääräisestä lämpötilasta tukee kuvan esittämää ilmiötä kiinteän aineen eristävästä vaikutuksesta.



Kuva 53. Lämpötilat sylinterissä simulaation lopussa ($t = 338$ min).

10.3.2 Paineen lasku

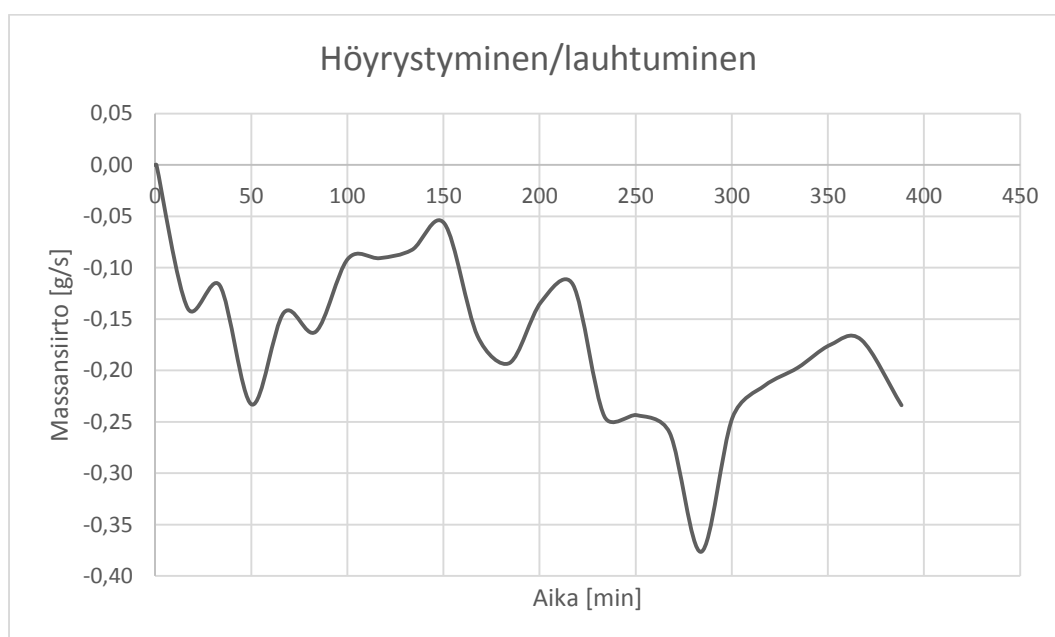
Simulaatiosta huomattiin, että aloituspaine arvioitiin liian alhaiseksi. Paine laskee heti simulaation alkupuolella arvosta 3 bar arvoon 1,7 bar. Oikea arvo alkupaineeksi olisi ollut lähellä 6 bar, joka saadaan lämmityssimuloinnin loppupaineesta kun kaikki kiinteä on sulanut. Simulaatiot käynnistettiin kuitenkin yhtä aikaa, joten lämmityssimulaation tuloksia ei ollut saatavilla. Väärä alkupaine ei kuitenkaan tee simulaatioon merkittävää virhettä, koska paine vaikuttaa osaltaan vain höyrystymiseen ja lauhtumiseen. Edelliset kaksi simulaatiota osoittivat höyrystymisen ja lauhtumisen vaikutuksen energiatasapainoon olevan merkityksettömän pieni sulamisen aikana. Sama oletus pätee myös kiinteytymisen tapauksessa. Kuvassa 54 on esitetty simulaation aikainen paineenlasku.



Kuva 54. Kaasufaasin paine simuloinnin ajalta.

10.3.3 Höyrystyminen ja lauhtuminen

Väärä alkuarvaus paineelle vaikutti simulaatiossa massansiirtoon kaasun ja nesteen välillä. Kuvassa 55 on esitetty viitteellinen kuvaaja, jonka perusteella sylinterissä tapahtuu pelkästään höyrystymistä eli energiaa sitoutuu kaasuun.



Kuva 55. Höyrystyminen ja lauhtuminen simulaation aikana.

10.3.4 Yhteenveto simulaatiosta

Malli toimi odotetulla tavalla myös kiinteytyssimulaatiossa. Ainoastaan huono alkuarvaus paineelle aiheutti höyrystymis- ja lauhtumismekanismissa virhettä höyrystymispisteen laskiessa alemmas kuin se todellisuudessa oli, mutta kuten jokainen tässä työssä tehty simulaatio osoitti, ei höyrystyminen ja lauhtuminen sulaessa tai kiinteytyessä aiheuta merkittävää muutosta energiatasapainoon. Simulaation ekstrapoloitu kiinteytymisaika on luultavasti liian lyhyt. Syynä tähän on se, että oletettavasti kiinteytyminen hidastuu loppua kohti huomattavasti kun kiinteä massa alkaa toimia eristeenä.

10.4 Jatkotutkimuskohteet

Simulaatiot osoittavat mallin olevan toimiva tarvittavalle lämpötila-alueelle, mutta mallin antamien tulosten vertailu mittaustuloksiin olisi kuitenkin tärkeää mallin validoinnin kannalta. Lämmityksen ja jäähtymisen aikana sylinterin pintalämpötilaa ja kaasufaasin painetta mitataan. Jos näitä mittaustuloksia saadaan tulevaisuudessa tutkittavaksi, saadaan malli validoitua vertaamalla paineen todellisia arvoja mallin antamiin arvoihin ja tarpeen mukaan hienosäädettyä vastaamaan todellisia arvoja. Paineen avulla pystytään esimerkiksi arvioimaan nesteen pinnan korkeus, jonka avulla sulaneen materiaalin määrä voidaan myös laskea.

Jatkotutkimuksena malliin olisi tarpeellista lisätä sublimaatio ja härmistyminen. Tämän lisäämiseen on kaksi vaihtoehtoa. Sublimaatio voidaan mallintaa erillisellä mallilla, jossa kiinteä aine asetetaan nestemäiseksi, mutta aine mallinnetaan kiinteänä esimerkiksi asettamalla viskositeetti suureksi tai asettamalla faasiin suuri negatiivinen liikemäärän lähdetermi. Tällöin kiinteässä aineessa ei esiinny virtausnopeuksia. Tällainen malli ei kuitenkaan sovellu sellaisten tapausten mallintamiseen, jossa paine voi nousta yli 152 kPa, koska tällöin esiintyy myös nestemäistä uraaniheksafluoridia. Parempi vaihtoehto olisikin lisätä sublimaatio mukaan jo olemassa olevaan malliin ohjelmoimalla sulamismalli uudestaan. Tässä simulaatiossa käytetty ohjelmiston tarjoama sulamismalli toimii pelkästään lämpötilan perusteella ja malliin tulisi lisätä myös paineriippuvuus. Tästä johtuen malli ei osaa ennustaa alle 152 kPa paineessa olevan kaasun faasimuutosta oikein,

kun lämpötila laskee alle kolmoispisteen. Todellisuudessa kaasu muuttuisi suoraan kiinteäksi, mutta nykyisellään mallissa tapahtuu vain lauhtumista takaisin nesteeksi.

Tässä työssä luodulla mallilla pystytään mallintamaan sulaminen, jäätyminen, höyrystyminen ja lauhtuminen millä tahansa geometrialla. Mallin toiminta ei ole siis rajoitettu pelkästään kaksiulotteiseen geometriaan. Mielenkiintoisia mallinnuksen kohteita olisivat uraaniheksafluoridin siirrot esimerkiksi sylinteristä toiseen tai sylinteristä prosessiin. Siirtoja voidaan suorittaa nestemäisenä tai kaasumaisena, mutta vain nestesiirto on mahdollista mallintaa tällä mallilla.

11 YHTEENVETO

Tämän diplomityön tarkoituksena oli luoda käyttäjän määrittelemä aine uraaniheksafluoridista kaupallisen CFD-ohjelmiston tietokantaan. Ohjelmistoon oli myös tarkoitus luoda malli, jolla UF_6 :n olomuodon muutoksia voidaan mallintaa. Aineen määrittelyssä ja siirrossa CFD-ohjelmistoon ei esiintynyt ongelmia, mutta mallin luominen osoittautui haasteelliseksi kolmen aineen olomuodon esiintyessä yhtä aikaa. Olomuotojen välille luotiin mekanismit, joilla lämmön- ja massansiirto faasien välillä saatiin toimimaan.

Työn teoriaosassa esiteltiin uraaniheksafluoridin sijoittuminen ydinpolttoaineketjussa ja tutustuttiin tarkemmin aineen kemiallisiin, fysikaalisiin ja termodynaamisiin ominaisuuksiin. Uraaniheksafluoridin faasimuutoksista ei löytynyt aiempaa tutkimustietoa, mutta aineen ominaisuuksista on olemassa kattavat korrelaatiot niin kiinteälle, nestemäiselle kuin kaasumaisellekin olomuodolle. Aineen määrittelyssä käytettiin hyväksi uraaniheksafluoridista aiemmin tehtyjä tutkimuksia, joiden avulla aineen jokaisen olomuodon termodynaamiset ominaisuudet saatiin sovitettua polynomisovitteiksi lämpötilan funktioina. Aineominaisuudet lisättiin CFD-ohjelmistoon erillisinä lisäosina käyttäen C-ohjelmointikieltä.

Työn tutkimusosassa CFD-ohjelmistoon luotiin malli, jonka avulla tutkittiin uraaniheksafluoridin sulamista numeerisella lähestymistavalla. Malliin kuuluu faasimuutosmekanismit, joiden avulla pystytään mallintamaan sulaminen ja jäätyminen sekä höyrystyminen ja lauhtuminen. Faasimuutoksista sublimaatio ja härmistyminen eivät ole mallissa mukana ohjelmiston rajoitusten takia. Mallinnus suoritettiin kaksiulotteisena ja mallin geometriaan kuului pelkästään 48G uraaniheksafluoridisylinterin poikkileikkaus. Ensimmäinen testisimulaatio suoritettiin niin, että lämmitysteho oli suurin mahdollinen. Mallia varten luodun aineen polynomisovitteet toimivat vain kriittiseen pisteeseen asti, joten aineen lämpötila ei saa kohota yli kyseisen arvon. Suurimmalla mahdollisella teholla lämmitettynä faasimuutokset saatiin tapahtumaan nopeammin ja simulaatioaika pieneni, jonka ansiosta mallin toimivuus voitiin todeta suhteellisen nopealla simulaatiolla. Kaksi seuraavaa simulaatiotapausta suoritettiin todellisilla

lämmitys- ja jäähdytystehoilla. Näitä simulaatioita ei saatu simuloitua loppuun asti diplomityön aikataulun takia, joten lopulliset sulamis- ja jäätymisajat jouduttiin ekstrapoloimaan.

Mallinnuksen tulokset olivat odotusten mukaisia, joten malli toimii periaatteeltaan kuten pitääkin. Mittausarvoja lämmitysvaiheesta ei ollut saatavilla, joten tuloksia verrattiin analyttisesti laskettuun keskimääräiseen lämmitystehoon ja sulamisaikaan. Numeerinen simulointi paljasti analyttisen laskennan alkuoletuksissa virheitä, joiden takia analyttisen ratkaisun keskimääräinen lämmitysteho oli suurempi kuin numeerisen ratkaisun keskimääräinen teho. Syynä liian suureen laskettuun tehoon olivat liian suuriksi arvioidut lämmönsiirtopinta-alat, jotka muuttuivat simulaation eri vaiheissa muun muassa pinnannousun ja kiinteän kappaleen sulamisen takia. Huolimatta suuremmasta tehosta, numeerisesti laskettu testisimulaation sulamisaika oli suurempi kuin analyttisesti laskettu sulamisaika. Todellisella teholla analyttinen laskenta antoi päinvastoin suuremman sulamisajan kuin numeerinen ratkaisu, joka luultavasti johtuu ekstrapoloitusta sulamisajasta. Sulamisajan analyttisessä laskennassa oletettiin, että kaikki sylinteriin tuotu energia kuluu sulamiseen. Tämä oletus osoittautui testisimulaatiossa vääräksi, koska simulaation puolella välissä sylinterin keskimääräinen lämpötila alkoi nousta. Lämpötilan nousu kertoo siitä, että osa energiasta on mennyt nestemassan lämpötilan nostamiseen. Realistisen tehon tapauksessa oletus piti paikkansa ainakin siihen asti kun simulaatitietoja saatiin. Lämpötila sylinterissä pysyi vakiona eli kaikki teho kului faasimuutokseen. Simulaatioiden avulla analyttistä laskentaa on mahdollista tarkentaa, jonka jälkeen sulamisaikoja voidaan tarkastella nopeasti tekemättä kokonaista pitkää simulaatiota.

Jäähdytys­simulaation tulokset olivat myös jokseenkin odotetun mukaisia. Vääränlainen alkuarvaus paineelle aiheutti höyrystymis- ja lauhtumismekanismiin virheitä, joiden takia höyrystymispiste laski alemmas kuin se todellisuudessa oli. Virhe ei jäätymisilmiön kannalta ollut kuitenkaan merkittävä, koska jo aiemmat simuloinnit osoittivat höyrystymisessä ja lauhtumisessa tapahtuvan lämpöenergian siirron olevan merkityksetöntä varsinaisen tutkimuskohteen eli nestemäisen aineen faasimuutoksen kannalta.

Tulevaisuudessa malliin olisi hyödyllistä tehdä jatkotutkimuksena mekanismit sublimaation ja härmistymisen mallintamiseen. Tällöin mallilla pystyttäisiin mallintamaan koko lämmitys- tai jäähdytysvaihe tai jopa putkistoissa virtaava UF₆. Valmiilla sublimaation ja härmistymisen sisältävällä mallilla olisi myös mahdollista mallintaa UF₆:n siirrot sylinterien välillä, siirrot sylinteristä prosessiin tai sylinterin täyttötilanne. Lisäksi kolmiulotteinen simulaatio antaisi entistä tarkempia tuloksia. Lisätutkimus mallin validointiin olisi myös tarpeen, mutta se vaatisi mittaustietoja lämmitys- ja jäähdytysvaiheessa. Kyseisiä tietoja ei tällä hetkellä ole julkisesti saatavilla.

12 LÄHDELUETTELO

Anderson, J. C, 1996. Correlation of heat transfer in a cylinder containing uranium hexafluoride engulfed in fire. Oak Ridge National Lab. [Tutkimusraportti]. Saatavilla: <http://www.osti.gov/scitech/biblio/10189028>

Anderson, J. C., Kerr, C. P. & Williams, W. R., 1994. Correlation of the thermophysical properties of uranium hexafluoride over a wide range of temperature and pressure.

Ansys Inc., 2009. Fluent UDF Manual, Canonsburg.

Ansys Inc., 2012a. Ansys Fluent Theory Guide, Canonsburg.

Ansys Inc., 2012b. Ansys Fluent User Guide, Canonsburg.

Argonne National Laboratory, 2000. Depleted UF₆ Storage. [verkkojulkaisu] Saatavilla: <http://web.ead.anl.gov/uranium/mgmtuses/storage/index.cfm> [Viitattu 17.5.2013].

ASC process systems, 2013. Autoclaves. [verkkojulkaisu] Saatavilla: <http://www.aschome.com/index.php/en/products/autoclaves> [Viitattu 16.5.2013].

Cochran, R. G. & Tsoulfanidis, N., 1992. The Nuclear Fuel Cycle: Analysis. La Grange Park (Illinois).

DeWitt, R., 1960. Uranium hexafluoride: A survey of the physico-chemical properties, Portsmouth: Goodyear Atomic Corporation.

IAEA, 2009. Nuclear Fuel Cycle Information System: A Directory of Nuclear Fuel Cycle Facilities. Wien: IAEA.

Incropera, F. P., DeWitt, D. P., Bergman, T. L. & Lavine, A. S., 2007. Fundamentals of heat and mass transfer. Kuudes painos

Krass, A. S., Boskma, P., Elzen, B., Smit, W. A., 1983. Uranium Enrichment and Nuclear Weapon Proliferation

Platom Oy, 2011. Platom's interest group magazine. [verkkojulkaisu]
Saatavilla: http://www.platom.fi/pdf/Platom_sidosryhmalehti_eng_2011.pdf
[Viitattu 16.5.2013].

Platom Oy, 2013. Company presentation, Mikkeli: Ei julkinen.

Rahimi, P. & Ward, C. A., 2005. Kinetics of Evaporation: Statistical Rate Theory Approach. *International Journal of Thermodynamics*, Vol. 8, pp.1-14.

Stuk, 2010. Ydinturvallisuus, Polttoainekierto. [verkkojulkaisu]
Saatavilla:
http://www.stuk.fi/ydinturvallisuus/polttoainekierto/fi_FI/polttoainekierto/
[Viitattu 24.4.2013].

U.S. Department of energy, 1999. Final Plan for the Conversion of Depleted Uranium Hexafluoride.

Urenco, 2003. Uranium Enrichment. [verkkojulkaisu]
Saatavilla: <http://www.urengo.de>

USEC, 2006. The UF₆ Manual: Good Handling Practises for Uranium Hexafluoride. Bethesda(Washington): USEC Inc.

Wilson, N., 2012. Yale Scientific: Enriching uranium. [verkkojulkaisu]
Saatavilla: <http://www.yalescientific.org/2012/12/enriching-uranium/>
[Viitattu 2013].

World Nuclear Association, 2010. Storage and Disposal Options. [verkkojulkaisu]
Saatavilla: <http://world-nuclear.org/info/Nuclear-Fuel-Cycle/Nuclear-Wastes/Appendices/Radioactive-Waste-Management-Appendix-2--Storage-and-Disposal-Options/#.UZRpX8p0vcx>
[Viitattu 4/2013].

World Nuclear Association, 2012a. In Situ Leach Mining of Uranium. [verkkojulkaisu]
Saatavilla: <http://world-nuclear.org/info/Nuclear-Fuel-Cycle/Mining-of->

[Uranium/In-Situ-Leach-Mining-of-Uranium/#.UXeyUsp0vcw](#)

[Viitattu 24.4.2013].

World Nuclear Association, 2012b. The Nuclear Fuel Cycle. [verkkójulkaisu]

Saatavilla: <http://world-nuclear.org/info/Nuclear-Fuel-Cycle/Introduction/Nuclear-Fuel-Cycle-Overview/#.UXegLcp0vcx>

[Viitattu 24.3.2013].

World Nuclear Association, 2013a. Conversion and Deconversion. [verkkójulkaisu]

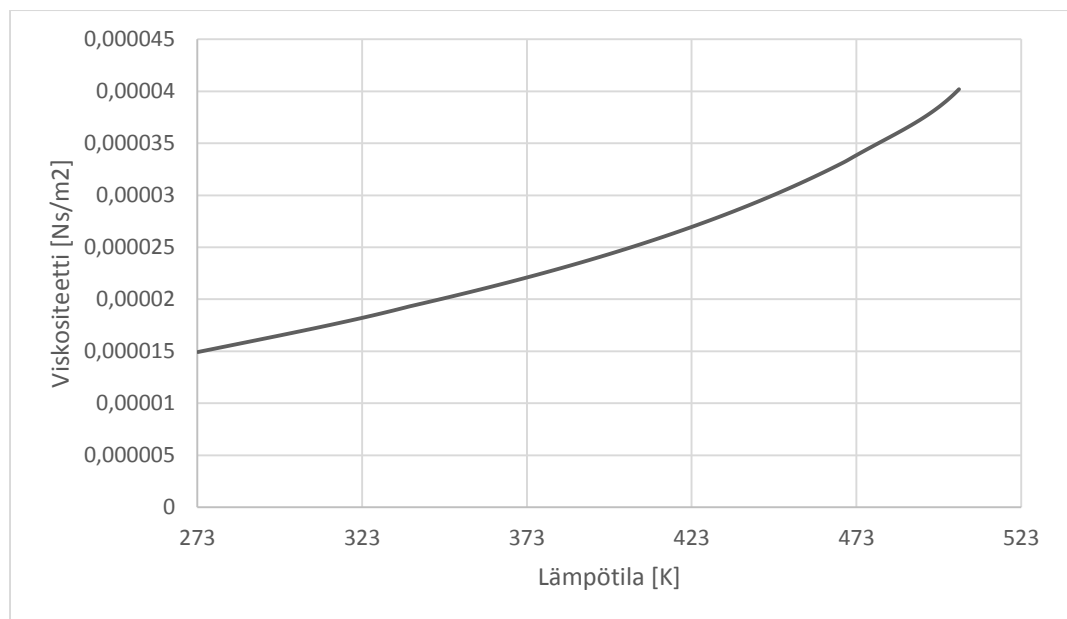
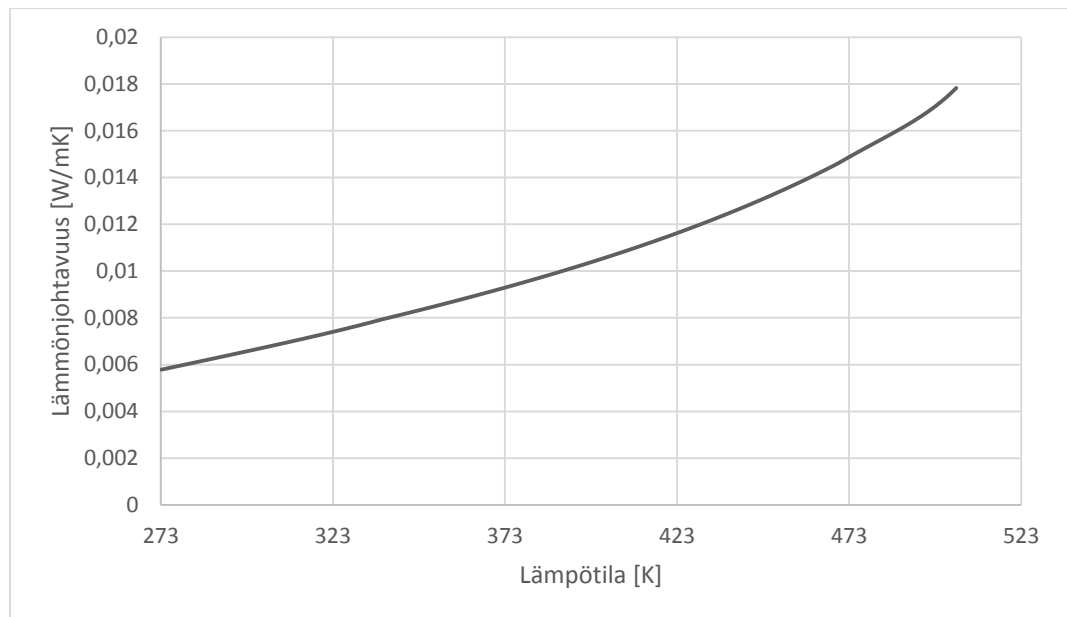
Saatavilla: <http://world-nuclear.org/info/Nuclear-Fuel-Cycle/Conversion-Enrichment-and-Fabrication/Conversion-and-Deconversion/#.UXfGRsp0vcx>

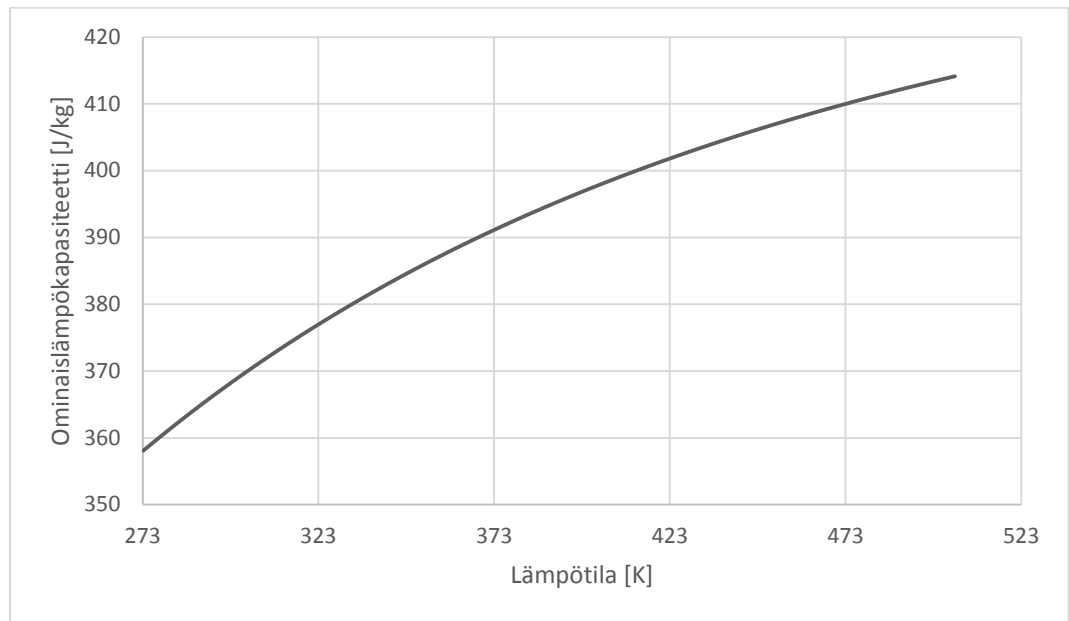
[Viitattu 24.4.2013].

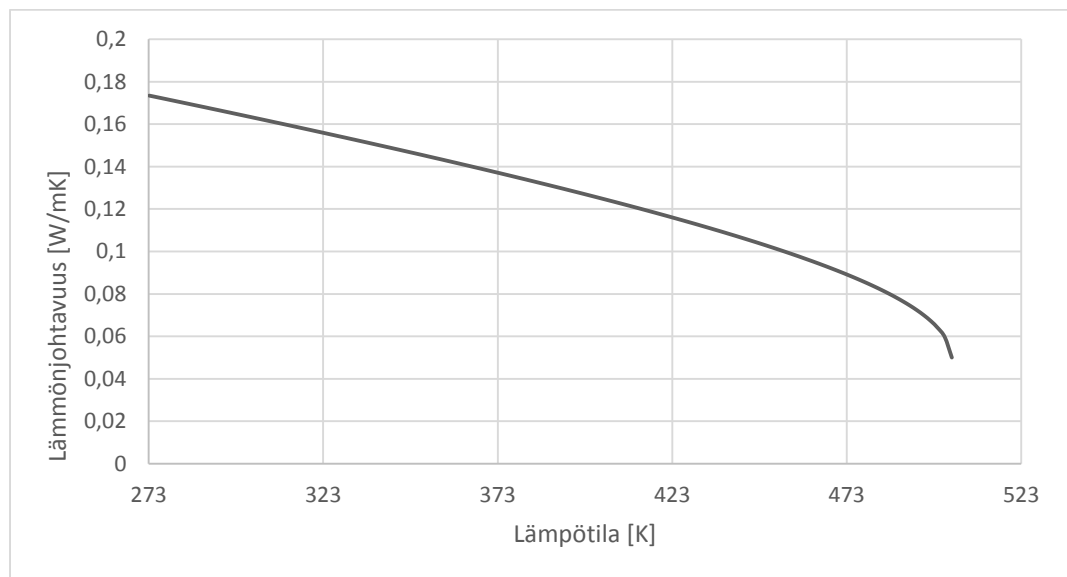
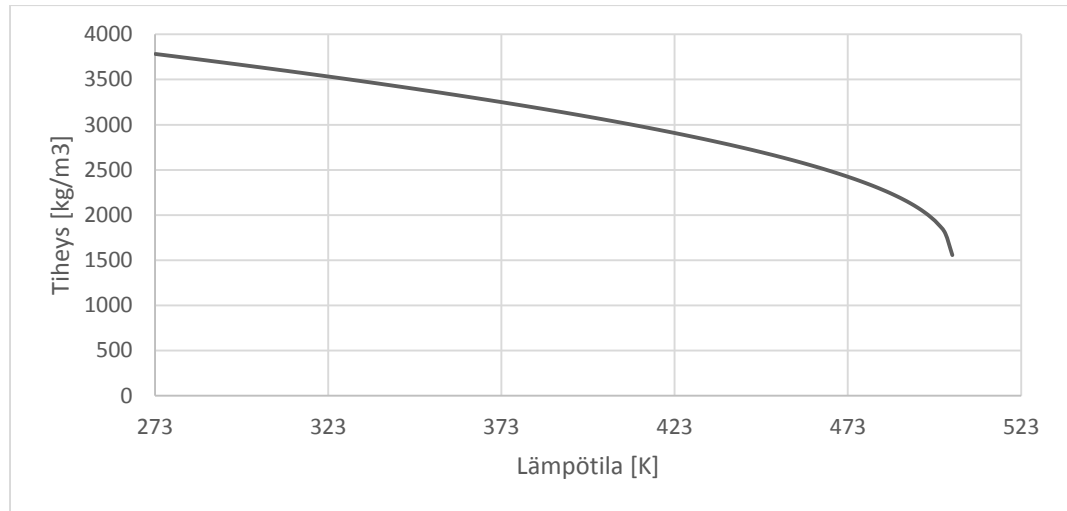
World Nuclear, 2013b. Nuclear Fuel Fabrication. [verkkójulkaisu]

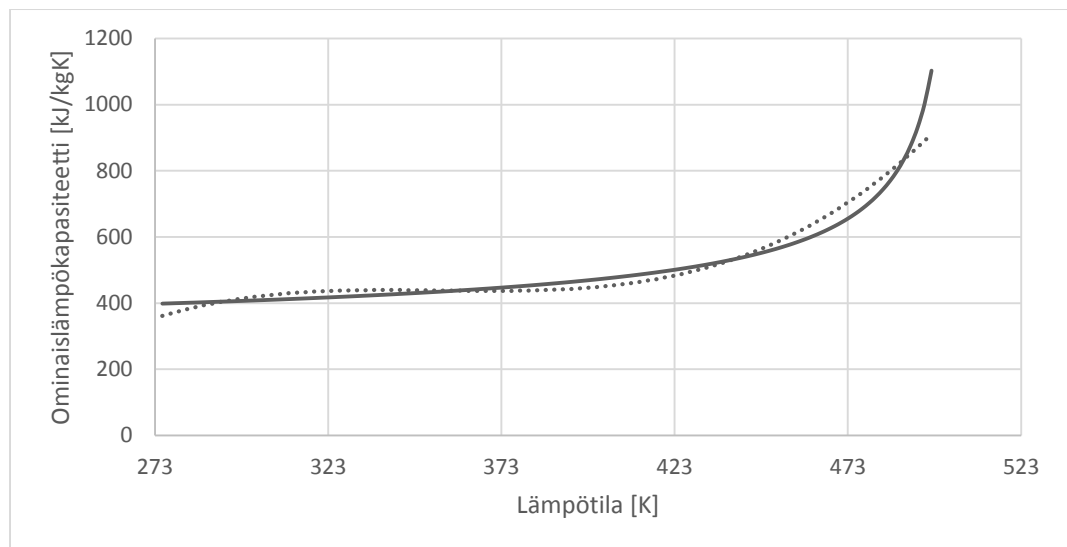
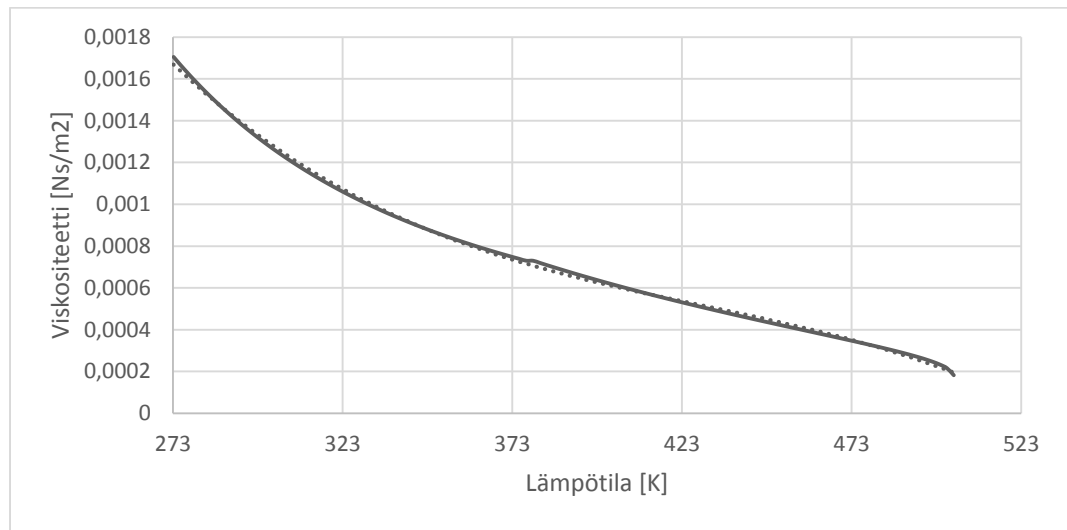
Saatavilla: <http://world-nuclear.org/info/Nuclear-Fuel-Cycle/Conversion-Enrichment-and-Fabrication/Fuel-Fabrication/>

[Viitattu 2013]

LIITE 1: Kaasumaisen UF₆:n aineominaisuussovitteet



LIITE 2: Nestemäisen UF₆:n aineominaisuussovitteet



LIITE 3: Kiinteän UF₆:n aineominaisuussovitteet