



РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

Моделирование многофазных систем в экстракционных процессах переработки ОЯТ

Алтынникова У.Ф., Бочкарева А.А., Мастюк Д.А.,
Ганеева Д.Ф., Пигасов Е.Е., Макеева И.Р.

XVII Международная конференция
«ЗАБАБАХИНСКИЕ НАУЧНЫЕ ЧТЕНИЯ»,
г. Снежинск, 19 – 23 мая 2025 г.

Введение

Экстракция – это извлечение вещества из раствора или сухой смеси с помощью растворителя (экстрагента), практически не смешивающегося с исходной смесью.

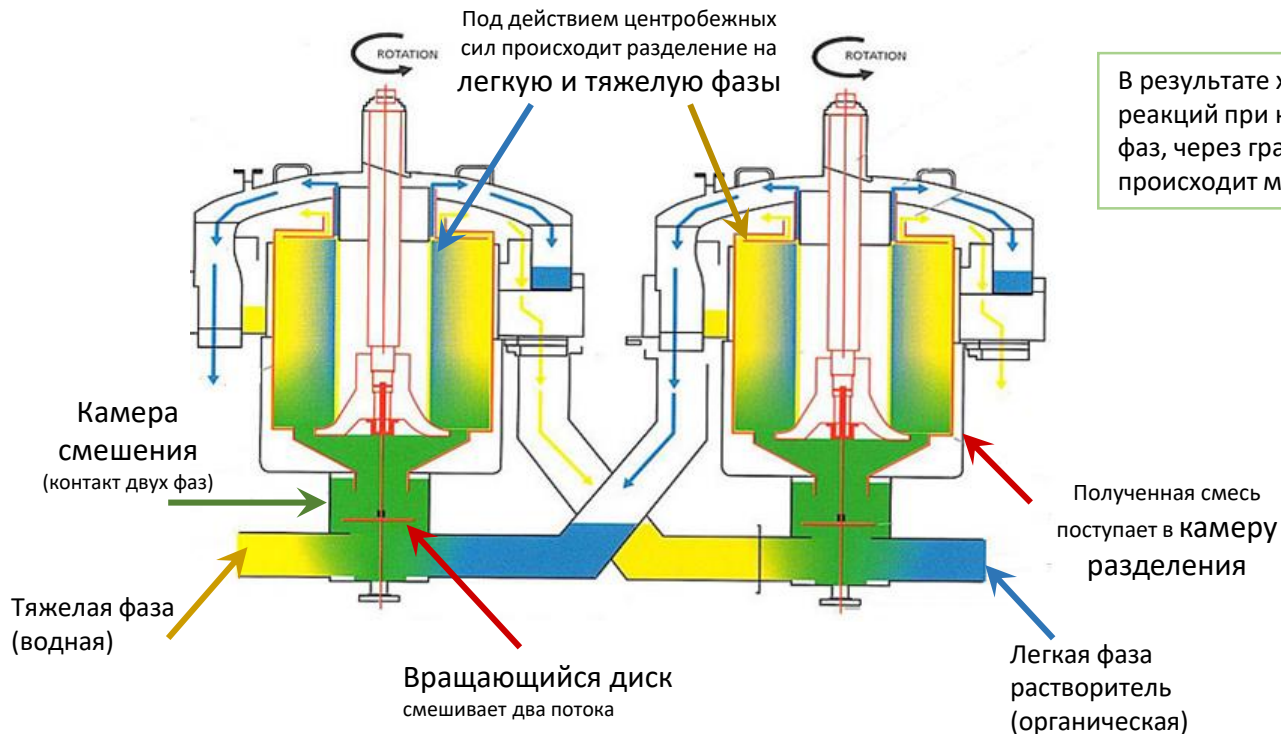
В настоящее время из возможных видов экстракционной аппаратуры все большее внимание уделяется центробежным экстракторам, которые обеспечивают высокую производительность при сравнительно малых размерах аппарата.

Трехмерное гидродинамическое моделирование процессов, происходящих в экстракторе представляет интерес для выбора наиболее предпочтительных технологических решений, а также позволит значительно снизить затраты на макетирование и проведение стендовых испытаний.

Описание работы центробежного экстрактора



РФАЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ



Разработка на основе требований RDD (Requirement Driven Develop)



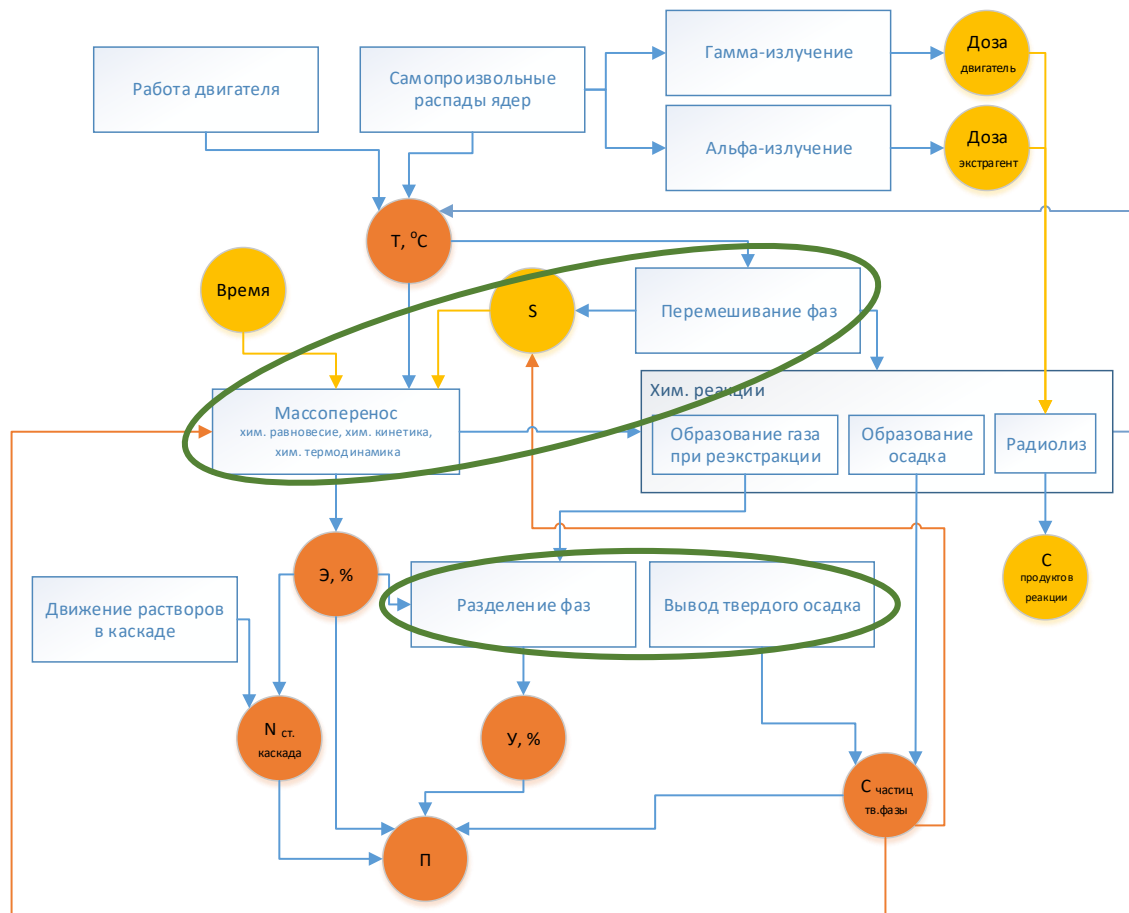
РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ



Связь моделей процессов и целевых параметров



РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ



Работа двигателя - Процесс

$T, ^\circ\text{C}$ - Целевой параметр

S - Расчетный параметр

Обозначения:

- T – температура рабочей среды
- ε – эффективность массопереноса 1 ступени (коэффициент извлечения)
- N – количество ступеней каскада
- C – концентрация (продуктов реакции, частиц твердой фазы)
- P – производительность
- U – унос противоток (эффективность разделения 1 ступени)
- S – площадь межфазной поверхности
- Время – время контакта фаз

Цели и задачи

Цель:

- Создание системы компьютерных моделей учитывающих основные процессы, происходящие в центробежном экстракторе.

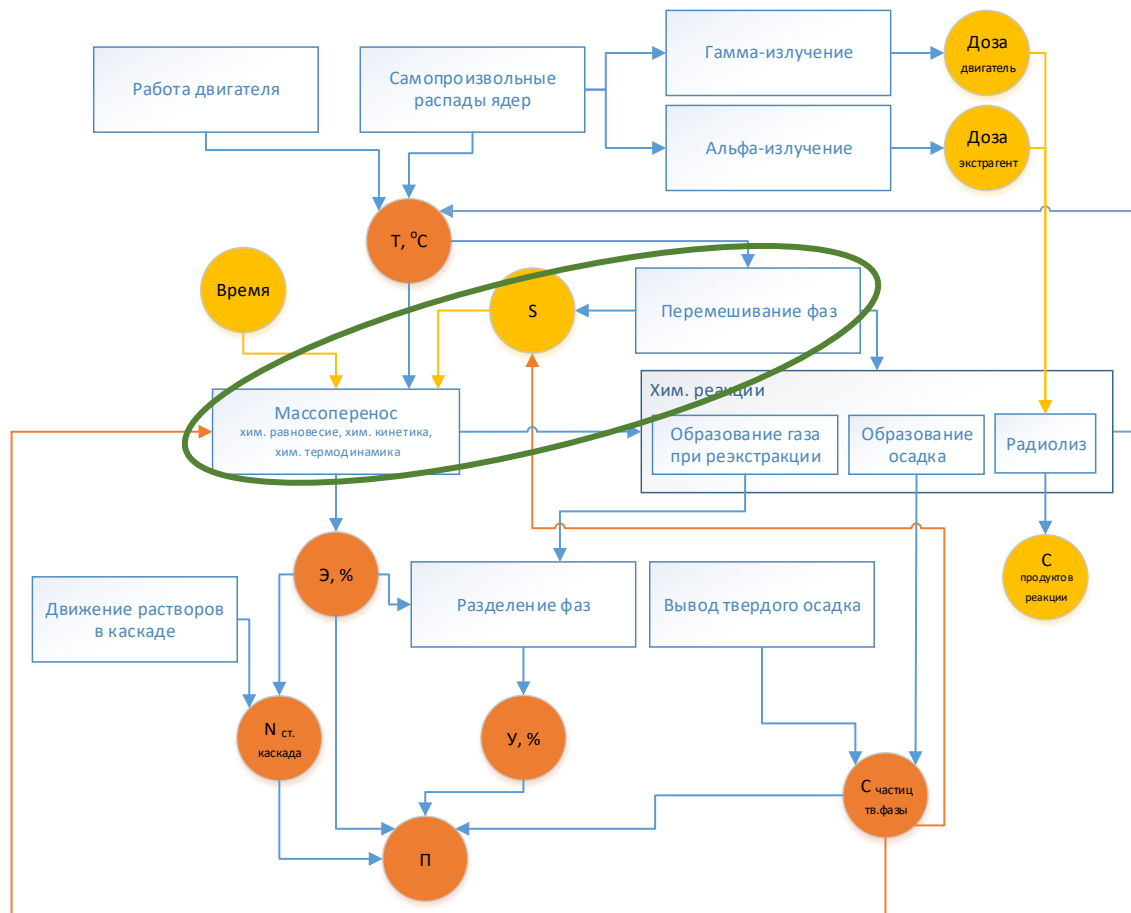
Задачи:

- Моделирование гидродинамических процессов в смесительной камере центробежного экстрактора
- Моделирование массообменных процессов в аппарате (перехода ключевого компонента из водной фазы в органическую)
- Моделирование гидродинамических процессов в камере разделения

Связь моделей процессов и целевых параметров



РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ



Работа двигателя - Процесс

$T, ^\circ\text{C}$ - Целевой параметр

S - Расчетный параметр

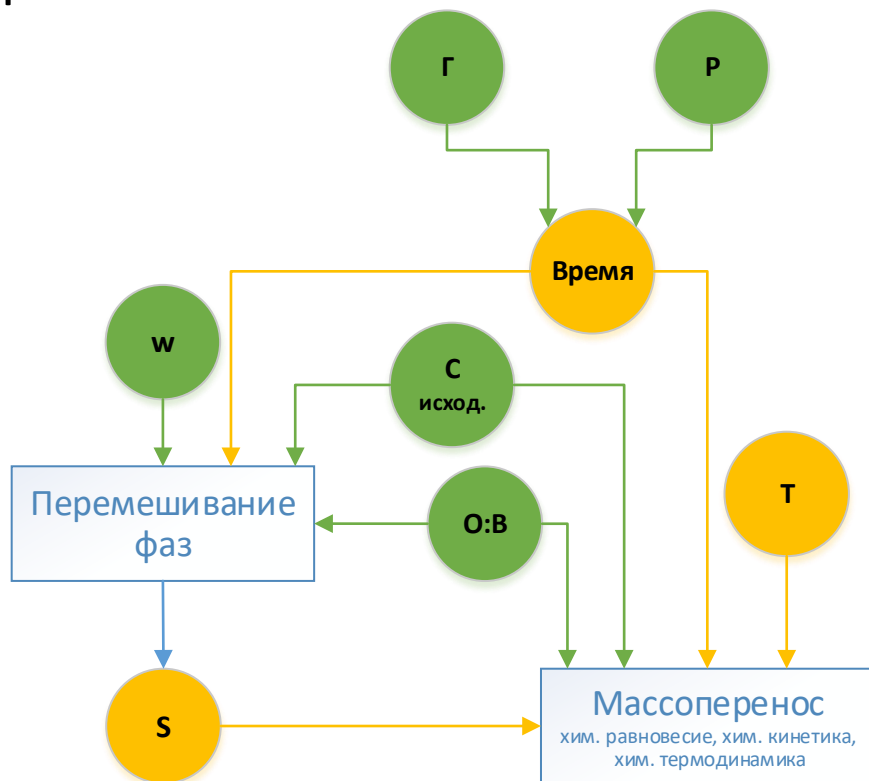
Обозначения:

- T – температура рабочей среды
- ε – эффективность массопереноса 1 ступени (коэффициент извлечения)
- N – количество ступеней каскада
- C – концентрация (продуктов реакции, частиц твердой фазы)
- P – производительность
- U – унос противоток (эффективность разделения 1 ступени)
- S – площадь межфазной поверхности
- Время – время контакта фаз

Моделирование массообменных процессов



РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ



Обозначения:

- Г – геометрия аппарата
- Р – расход фаз
- Время – время контакта фаз
- Т – температура рабочей среды
- О:В – соотношение объемов фаз
- w – угловая скорость вращения
- С исход. – состав исходных продуктов (состав водной и органической фаз)
- S – площадь межфазной поверхности

Работа двигателя - Процесс

Р - Входной параметр

S - Расчетный параметр

Математическое описание многофазных течений



РФАЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

Методы Volume of Fluid (VOF)

Методы Эйлера-Эйлера (Eulerian - Eulerian)

Уравнения неразрывности, количества движения:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U) = 0,$$

$$\frac{\partial (\rho U)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U U) - \nabla \cdot (\mu \nabla U) - \rho g = -\nabla p + F_s$$

где ρ – совместная плотность двух фаз; U – совместная скорость двух фаз; g – ускорение свободного падения; p – давление; F_s – сила поверхностного натяжения.

$$\nabla U_k = 0,$$

$$\frac{\partial (\rho_k \gamma_k U_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_k \gamma_k U_k U_k) - \nabla \cdot (\mu_k \gamma_k \nabla U_k) - \rho_k g = -\gamma_k \nabla p + F_{s,k}$$

где ρ_k – плотность фазы k , кг/м³; U_k – скорость фазы k , м/с; γ_k – фазовая объемная доля фазы k ; μ_k – динамическая вязкость фазы k , Па·с; $F_{s,k}$ – вектор внешних сил фазы k , Н.

Уравнение переноса фаз:

$$\frac{\partial \gamma}{\partial t} + \nabla \cdot (\gamma U) + \nabla \cdot [\gamma (1 - \gamma) U_r] = 0$$

определяет толщину переходного слоя γ поверхности раздела фаз

где γ – объемная доля фазы,
 U_r – «скорость сжатия»
межфазной поверхности.

$$U_r = \min(c_\gamma |U|, \max(|U|)) \cdot n$$

где c_γ – коэффициент управляющий величиной сжатия, является параметром модели и может принимать значения $0 < c_\gamma < 2$.

Физические свойства единого континуума:

$$\rho = \rho_1 \gamma + \rho_2 (1 - \gamma), \quad \mu = \mu_1 \gamma + \mu_2 (1 - \gamma)$$

$$\frac{\partial \rho_k \gamma_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_k \gamma_k U_k) + \nabla \cdot [\rho_k \gamma_k (1 - \gamma_k) U_r] = 0$$

где γ_k – объемная доля фазы k ,
 U_r – «скорость сжатия» межфазной поверхности.

$$U_r = \frac{\nabla \gamma_k}{|\nabla \gamma_k|}$$

Платформа OpenFOAM

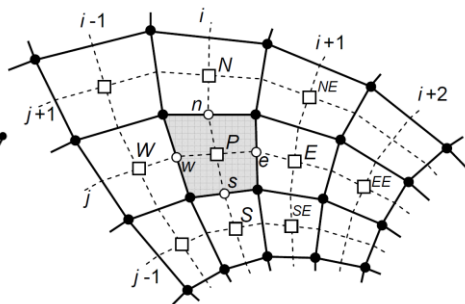
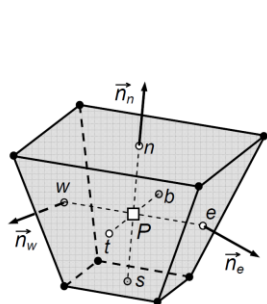
interFoam

multiPhaseEulerFoam

Метод конечного объема (МКО)

для аппроксимации слагаемых [1]

- Наиболее полно отвечает нуждам вычислительной гидро-, аэро- и газодинамики



- Балансовые соотношения записываются для небольшого контрольного объема. Их дискретный аналог получается суммированием по всем граням выделенного объема потоков массы, импульса и т.д., вычисленных по каким-либо квадратурным формулам.

1. Е.М. Смирнов, Д.К. Зайцев, Метод конечных объемов в приложении к задачам гидрогазодинамики и теплообмена в областях сложной геометрии, Научно-технические ведомости, 2004.

2. Крапошин М.В., Математическое моделирование сжимаемых течений с использованием гибридного метода аппроксимации конвективных потоков.

Алгоритм PIMPLE

Метод расщепления для решения системы уравнений метода VOF [2]

- основан на разделении влияния различных слагаемых на изменение импульса в расчетной сетке



Решатель interFoam

- основан на методе VOF
- предназначен для моделирования двух несжимаемых, изотермических несмешивающихся жидкостей

Решатель multiPhaseEulerFoam

- предназначен для моделирования нескольких несжимаемых, изотермических несмешивающихся жидкостей
- Для описания межфазного взаимодействия в уравнении переноса фаз используется двоичный переключатель C_α

$$C_\alpha = 1$$

Метод Эйлера-Эйлера
(Eulerian - Eulerian)

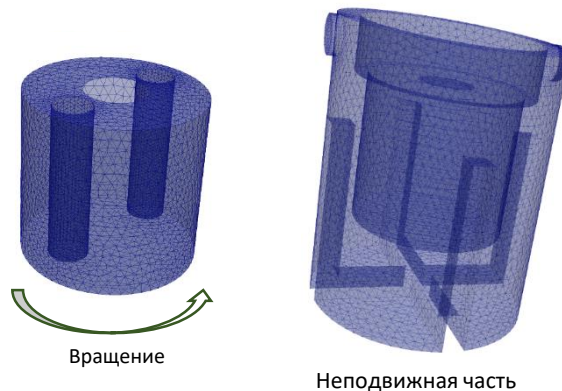
$$C_\alpha = 0$$

Метод VOF
(Volume of Fluid)

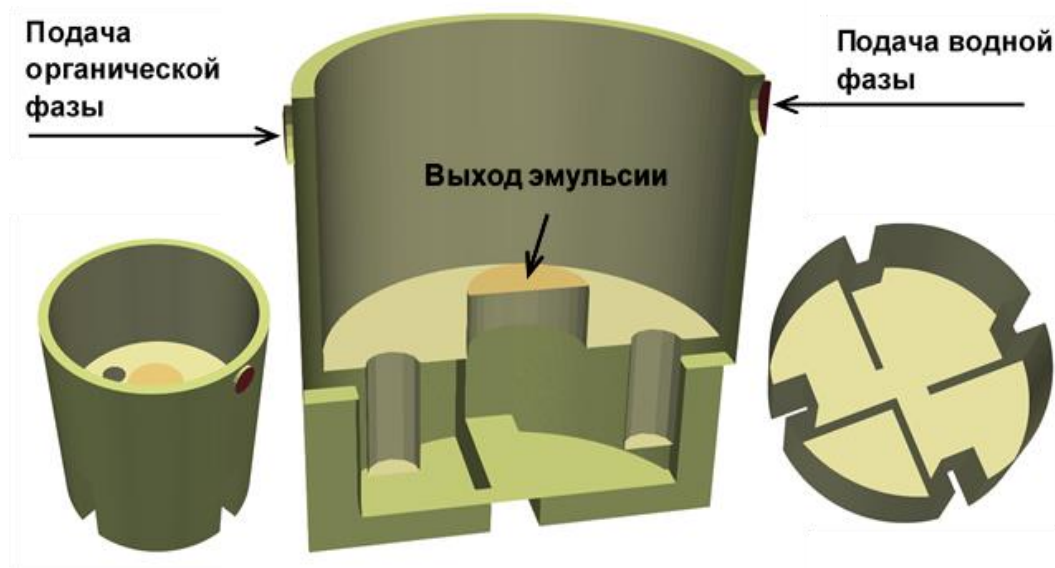
Моделирование вращения Метод Multiple Reference Frame

вращение стенки без перемещения сетки

- Основан на создании двух сеток, идентичных на поверхности раздела. Для одной из сеток задается вращение, другая остается неподвижной. Свойства потока между неподвижной и подвижными зонами передаются поверхностью между ними



Описание исходных данных



Данные необходимые для расчета [3]:

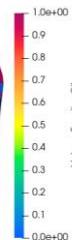
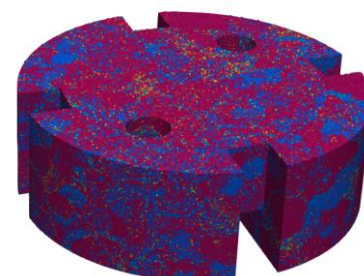
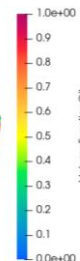
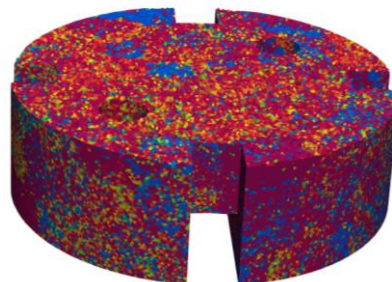
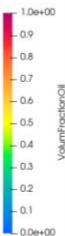
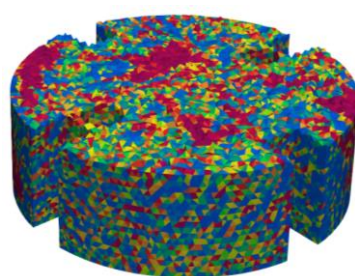
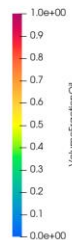
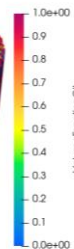
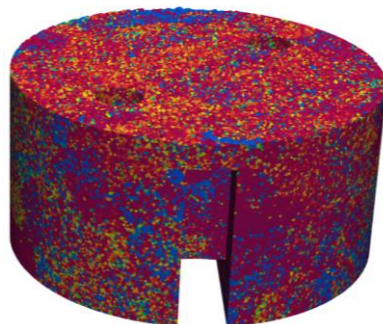
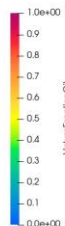
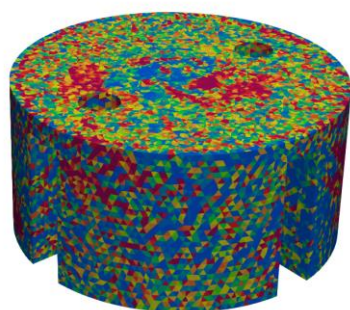
Параметр	Значение
Кинетическая вязкость для водной фазы, $\text{м}^2/\text{с}$	$3,44 \cdot 10^{-6}$
Кинетическая вязкость для органической фазы, $\text{м}^2/\text{с}$	$2,33 \cdot 10^{-6}$
Коэффициент поверхностного натяжения Н/м	0.0124

Влияние расчетной сетки на результат моделирования



РФАЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

Количество ячеек сетки		
629 тыс.яч.	3 749 тыс.яч.	27 372 тыс.яч.
Средний объем ячеек сетки		
$2.5 \cdot 10^{-11} \text{ м}^3$	$4.2 \cdot 10^{-12} \text{ м}^3$	$5.7 \cdot 10^{-13} \text{ м}^3$
Средний эквивалентный радиус ячейки сетки		
180.8 мкм	99.7 мкм	51.4 мкм



Определение площади поверхности раздела

Удельная межфазная поверхность раздела является параметром, определяющим эффективность массообмена.

Средний поверхностно-объемный диаметр

$$d_{n-o} = 6 \cdot \frac{\sum V_i}{\sum S_i}$$

Удельная межфазная поверхность

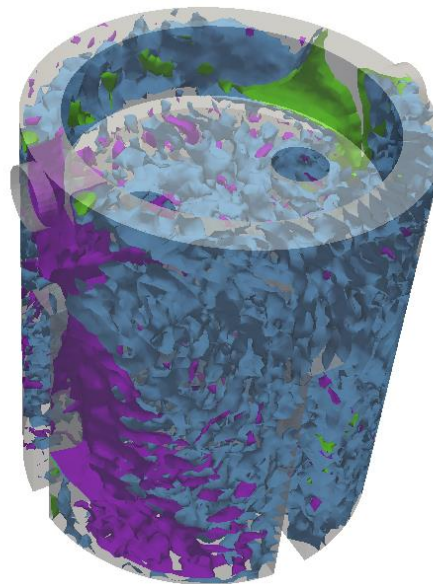
$$S_{y\partial} = \frac{6 \cdot \varphi_d}{d_{n-o}}$$

где φ_d – объемная доля дисперсной фазы,

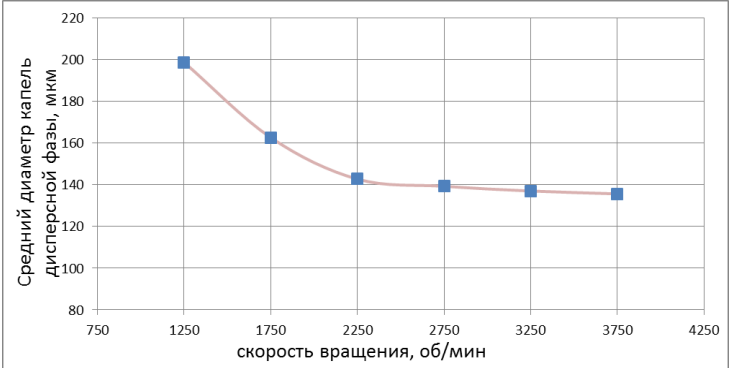
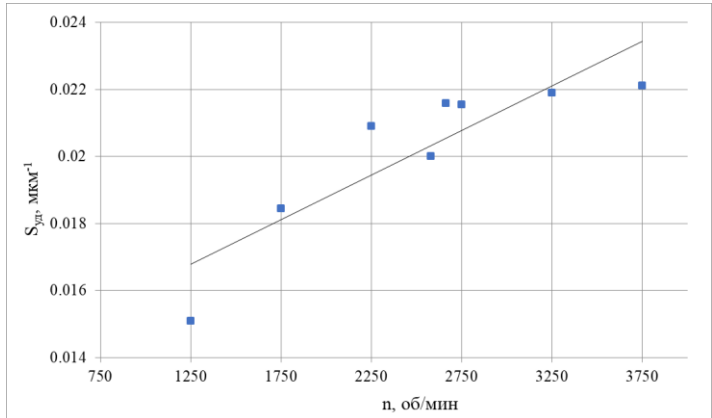
V_i – объем капли дисперсной фазы, м^3 ;

S_i – площадь поверхности капли дисперсной фазы, м^2

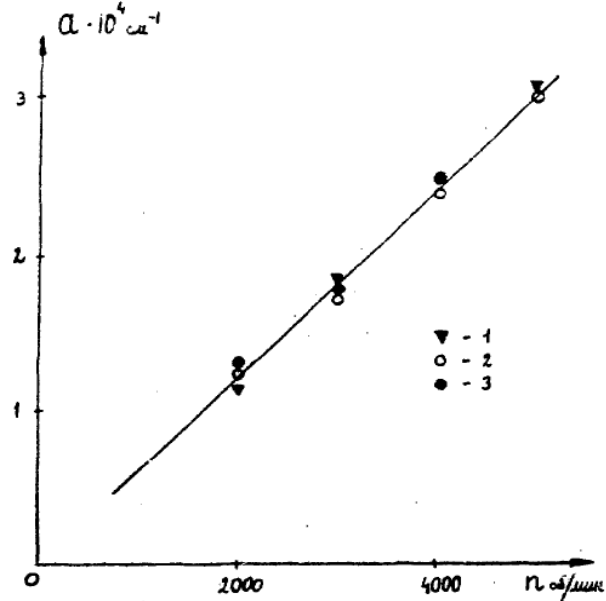
Обработка результатов расчета в ParaView [4] позволяет выделять застойные зоны и изоповерхности с заданной долей водной и органической фазы.



Результаты моделирования



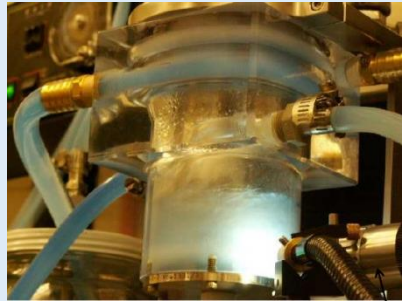
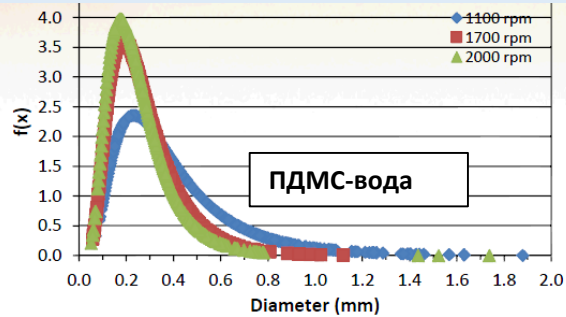
Зависимость удельной межфазной поверхности и среднего диаметра капель от скорости вращения перемешивающего устройства, результаты расчета по модели



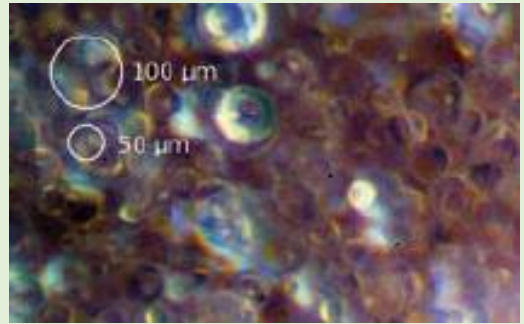
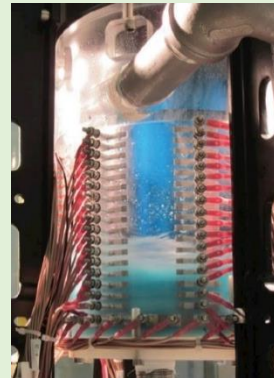
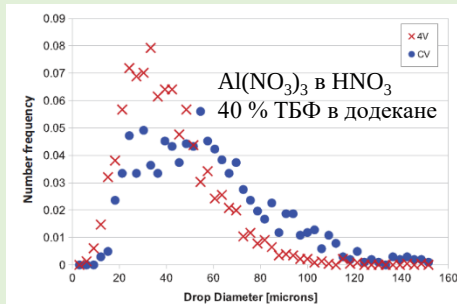
Зависимость удельной межфазной поверхности от скорости вращения перемешивающего устройства при различных концентрациях урана: 1 – 0.129 М, 2 – 0.319 М, 3 – 0.630 М [5]

Сравнение с экспериментальными данными

Функция распределения капель по размерам [6]

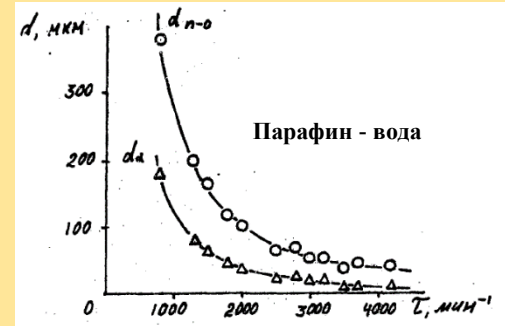


Функция распределения капель по размерам [7]
скорость 1800 об/мин



Система	d, мкм
$\text{Al}(\text{NO}_3)_3$ в HNO_3 – 40 % ТБФ в додекане [7]	10-100
ПДМС – вода [6]	60-900
Парафин – вода [8]	50-200
Результаты моделирования	75-220

Зависимость $d_{\text{ср.}}$ и $d_{\text{п-о}}$ от скорости вращения
перемешивающего устройства [8]



6. Nickolace Wyatt, Tim O'Hern, Bion Shelden, Determination of Drop Size Distribution in a Centrifugal Contactor Sandia National Laboratories, 2011

7. Kent E. Wardle, Liquid-Liquid Mixing Studies in Annular Centrifugal Contactors Comparing Stationary Mixing Vane Options, 2015

8. М. Ф. Пушленков, Г.И.Кузнецов, Н. Н. Щепетильников, Коэффициент массопередачи и межфазная поверхность при перемешивании жидкости в центробежном экстракторе., 1982

Моделирование массоперехода через границу раздела фаз



РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

Уравнение сохранения концентрации химического компонента k в фазе j :

$$\frac{\partial C_{k,j}}{\partial t} + \nabla \cdot (U_k C_{k,j}) = -\nabla \cdot (J_{k,j}) + W_{k,j}$$

где U_k – локальная скорость фазы k , м/с;

$J_{k,j} = -D_{k,j} \nabla C_{k,j}$ – поток концентрации компонента k , кг/(м²с);

$D_{k,j}$ – коэффициент диффузии компонента k в фазе j , м²/с;

$W_{k,j}$ – изменение концентрации компонента в результате химических реакций

Граничные условия на границе раздела фаз

$$J_{1,j} = J_{2,j}, \quad He_j = \frac{C_{2,j}^0}{C_{1,j}^0}$$

где $C_{2,j}^0$ – равновесная концентрация компонента j в жидкости 2,

$C_{1,j}^0$ – равновесная концентрация компонента j в жидкости 1

He_j – скачек концентрации компонента j на границе раздела фаз.

Переход к методу VOF

(единый континуум, свойства которой определяются объемной долей фазы)

$$C_j = \gamma C_{1,j} + (1-\gamma) C_{2,j} \quad D_j = \gamma D_{1,j} + (1-\gamma) D_{2,j}$$

$$W_j = \gamma W_{1,j} + (1-\gamma) W_{2,j} \quad J_j = \gamma J_{1,j} + (1-\gamma) J_{2,j}$$

Уравнение сохранения концентрации компонента в приближении «одной жидкости» [9]:

$$\frac{\partial C_j}{\partial t} + \nabla \cdot (U C_j) = \nabla \cdot \left(D_j \nabla C_j - D_j \left(\frac{C_j (1 - He_j)}{\gamma + He_j (1 - \gamma)} \right) \nabla \gamma \right) + W_j$$

$$\text{где } D_j = \frac{D_{1,j} D_{2,j}}{\gamma D_{1,j} + (1-\gamma) D_{2,j}}$$

Зависимость плотности фаз от концентрации компонента [10]:

$$\rho_{\text{водн}} = 0,997 + (0,033 - 0,004 \cdot C_U / M_U) \cdot C_{HNO_3} + 0,318 \cdot C_U / M_U$$

$$\rho_{\text{орг}} = \rho_0 + (1,655 \cdot 10^{-3} - 3,61 \cdot 10^{-4} \rho_0) \cdot C_U + (0,063 - 0,046 \cdot \rho_0) C_{HNO_3}$$

где ρ_0 – плотность чистого экстрагента в кг/м³

C_U – концентрация ключевого компонента кг/м³,

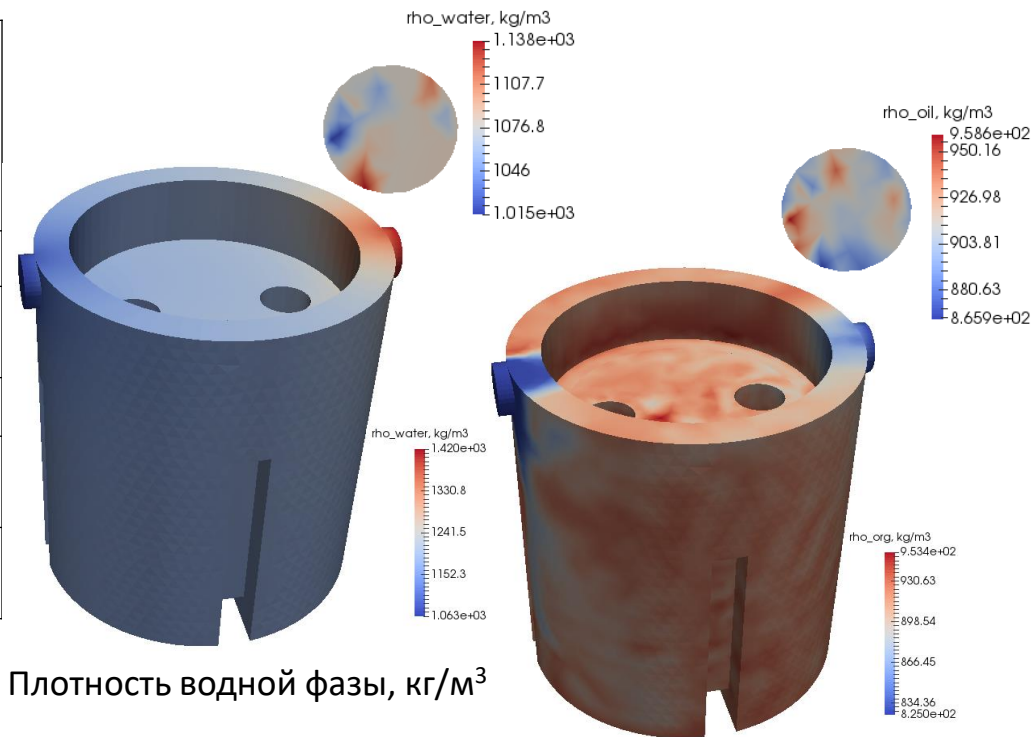
M_U – молярная масса ключевого компонента, г/моль

9. Y. Haroun, D. Legendre, L. Raynal, 2010b. Volume of fluid method for interfacial reactive mass transfer: application to stable liquid film. Chem. Eng. Sci. 65, 2896–2909.

10. Воронцовская Е.В., Розен А.М. Плотность, вязкость, поверхностное натяжение и коэффициенты диффузии веществ в системе H₂O-UO₂(NO₃)₂-HNO₃ – ТБФ. Сборник «Экстракция. Теория, применение, аппаратура» Вып. 2, М., Госатомиздат, 1962. с. 199-208

Зависимость плотности фаз от концентрации компонента

Значение	Плотность водной фазы, кг/м ³	Плотность органической фазы, кг/м ³
	<i>На входе в камеру</i>	
Исходные данные	1420	825
	<i>На выходе из камеры</i>	
ПК ВИЗАРТ [11]	1087	920
Среднее значение на выходе (OpenFoam)	1076	912



Плотность водной фазы, кг/м³

Плотность органической фазы, кг/м³

Выводы:

Разработана модель камеры смешения центробежного экстрактора, учитывающая изменение плотности фаз при переходе компонента из водной фазы в органическую

Получены зависимости удельной межфазной поверхности от скорости вращения перемешивающего устройства, которые согласуются с экспериментальными данными

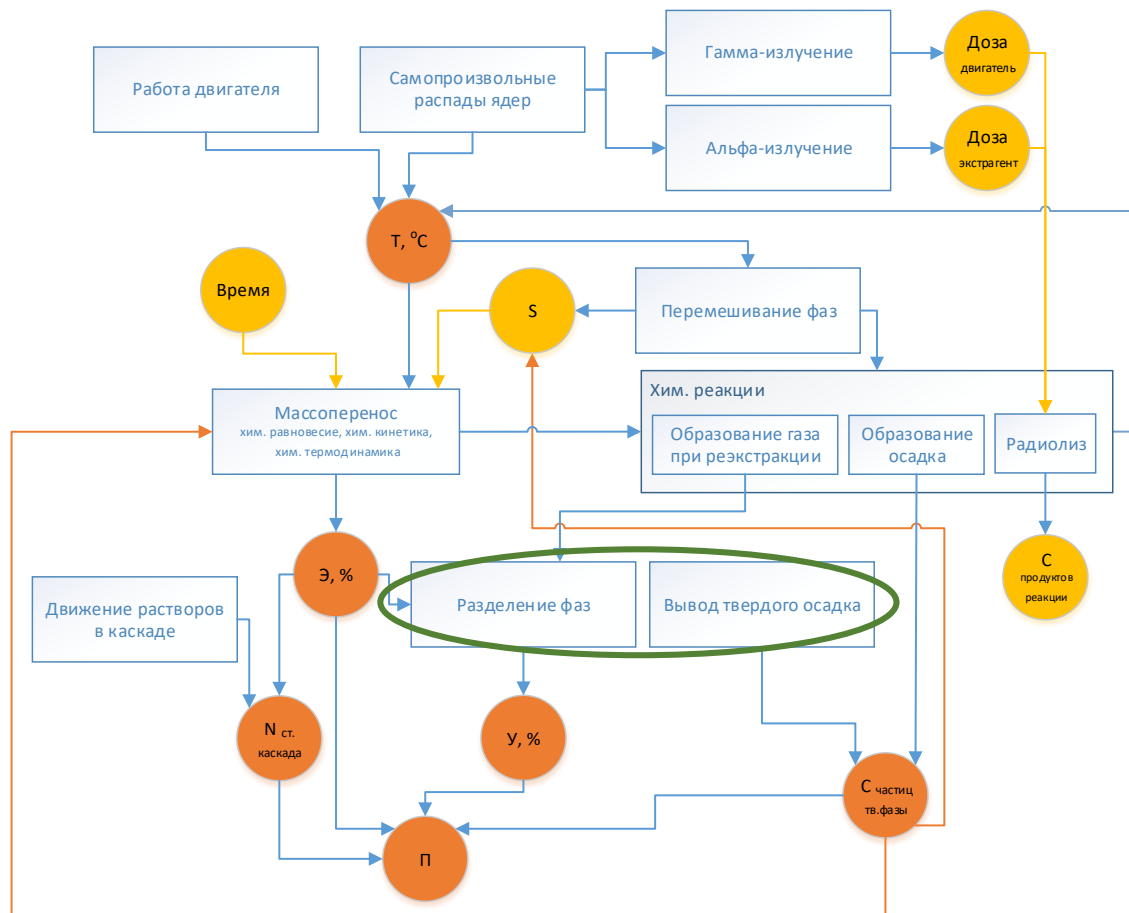
Модель позволяет оценивать образование застойных областей, что может быть использовано для оценки проведения процесса экстракции

Определение удельной межфазной поверхности, плотности фаз и концентрации ключевого компонента в органической фазе на выходе позволяет оценивать эффективность экстракции, и ее зависимость от геометрических параметров аппарата и режима проведения процесса

Связь моделей процессов и целевых параметров



РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ



Обозначения:

- T – температура рабочей среды
- ε – эффективность массопереноса 1 ступени (коэффициент извлечения)
- N – количество ступеней каскада
- C – концентрация (продуктов реакции, частиц твердой фазы)
- P – производительность
- U – унос противоточной (эффективность разделения 1 ступени)
- S – площадь межфазной поверхности
- Время – время контакта фаз

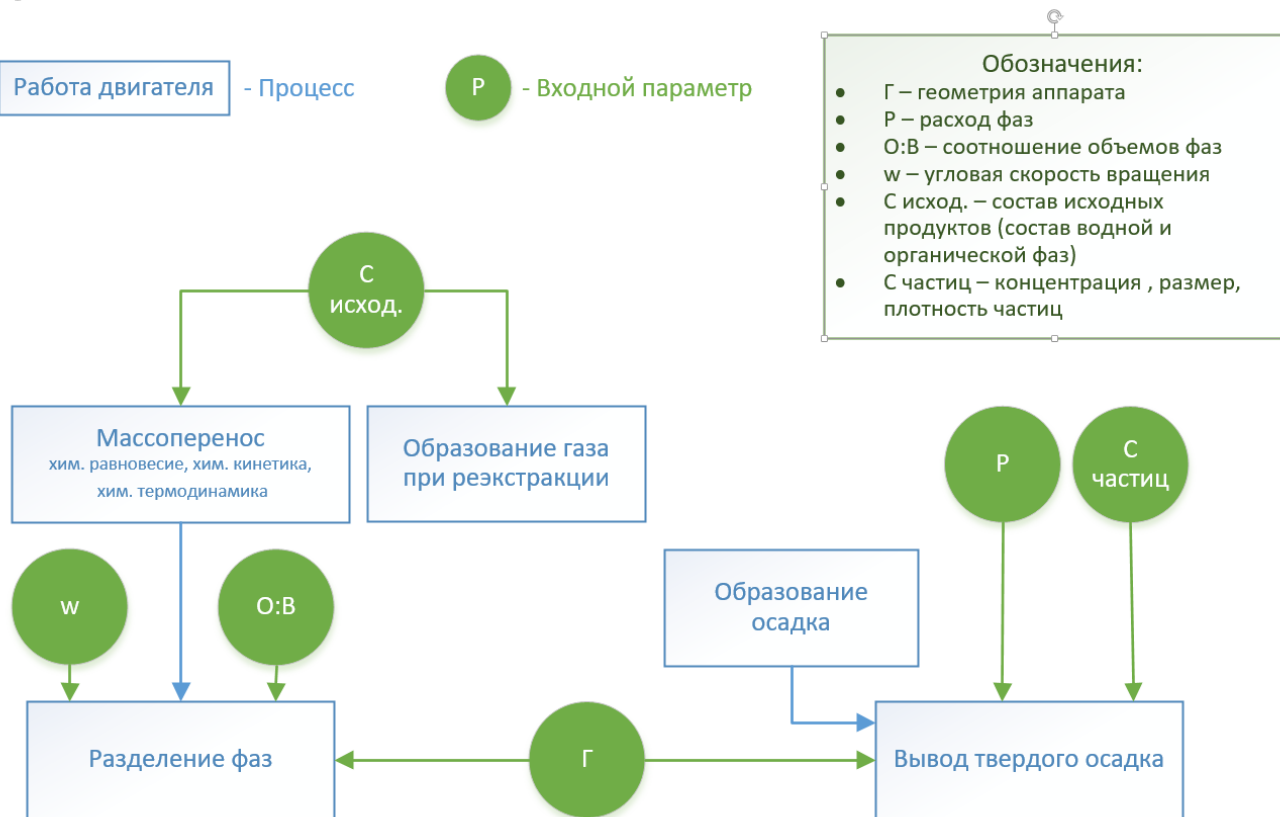
Моделирование процессов в камере разделения



РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

Работа двигателя - Процесс

Р - Входной параметр

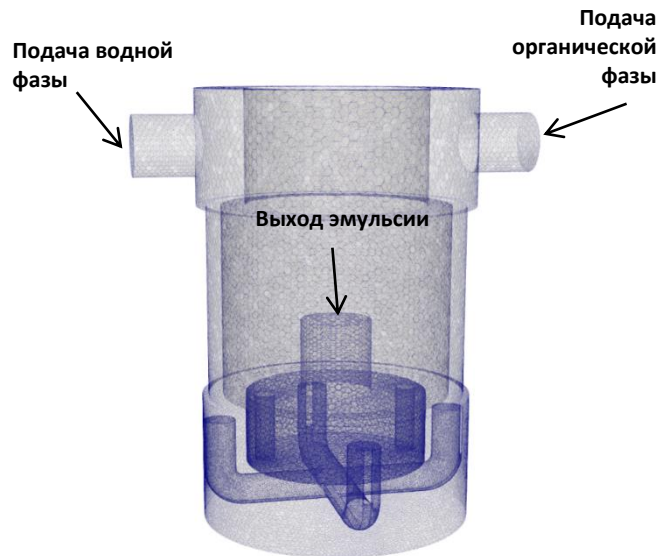


Описание исходных данных



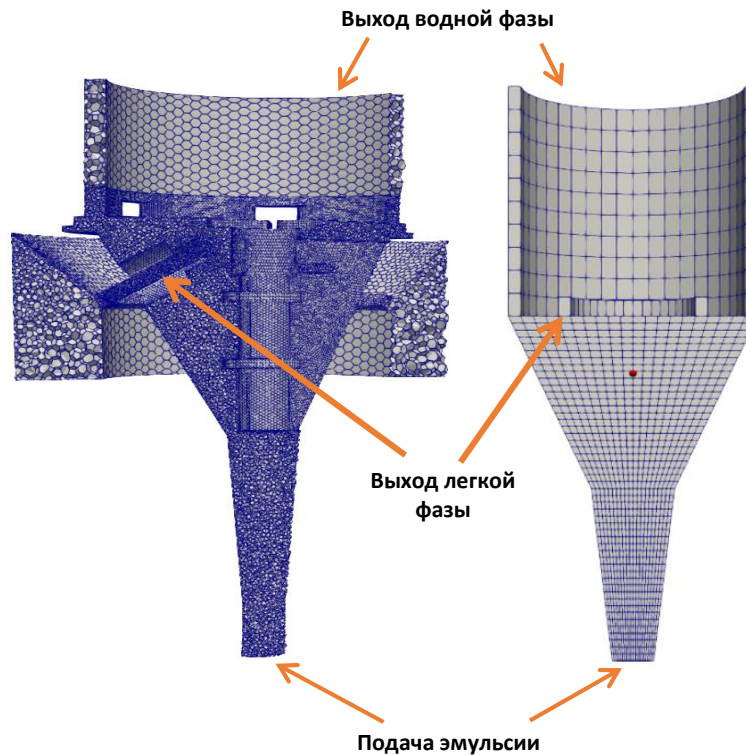
РФАЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

Камера смешения



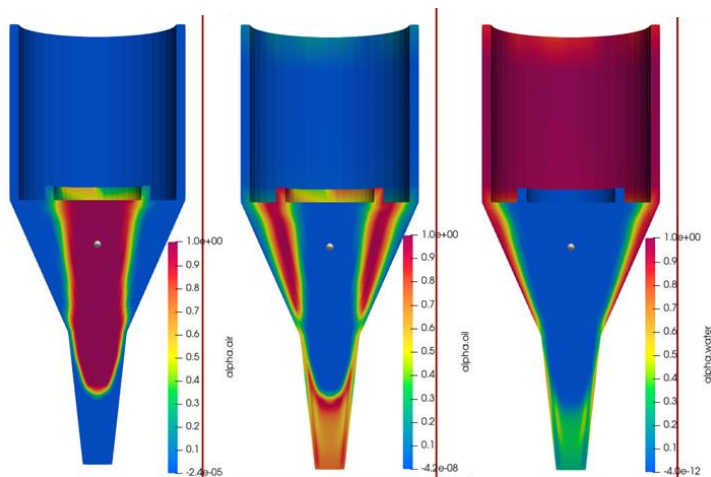
Камера разделения

Подробная и упрощенная модели



Решатель multiPhaseEulerFoam

Метод Volume of Fluid (VOF)

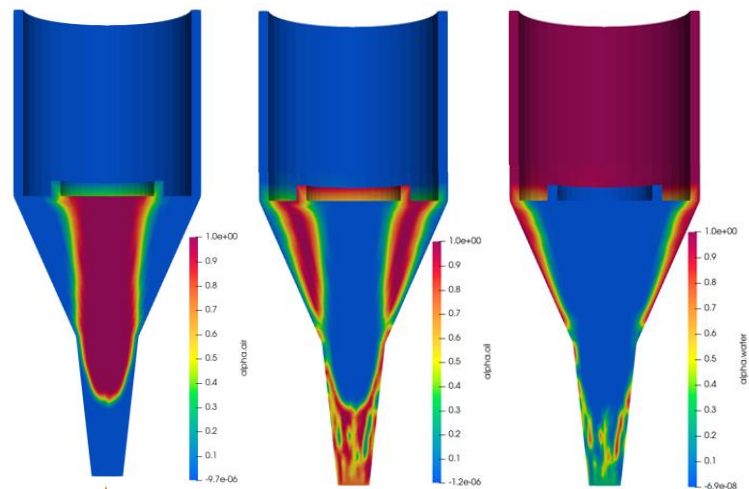


объемная доля
газовой фазы

объемная доля
органической фазы

объемная доля
водной фазы

Метод Эйлера-Эйлера (Eulerian - Eulerian)



объемная доля
газовой фазы

объемная доля
органической фазы

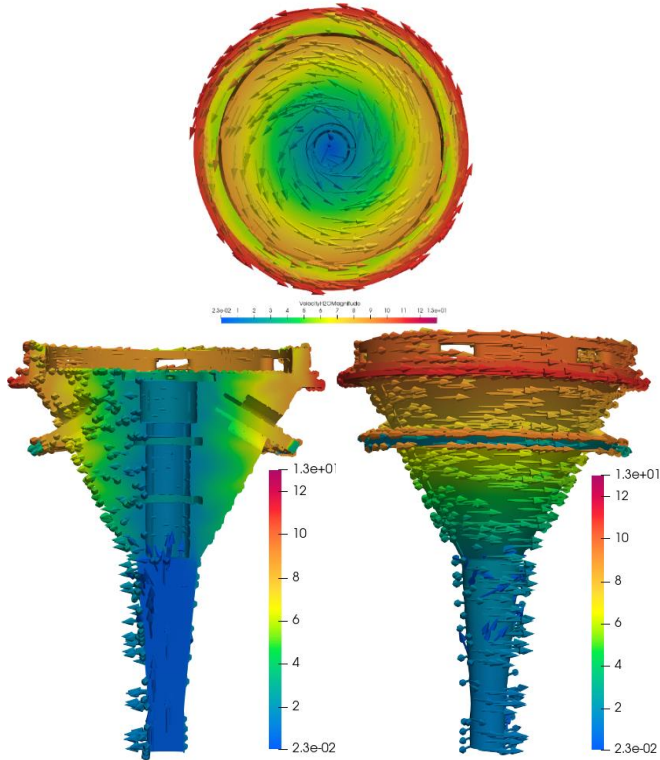
объемная доля
водной фазы

Результаты моделирования камеры разделения

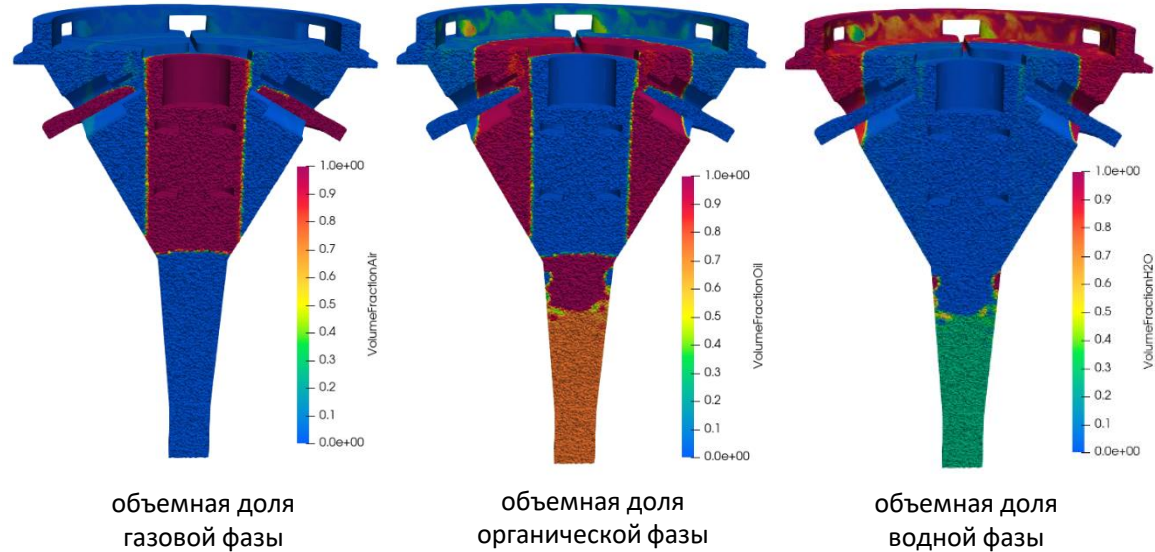


РФАЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

Распределение скоростей и
направление движения фаз



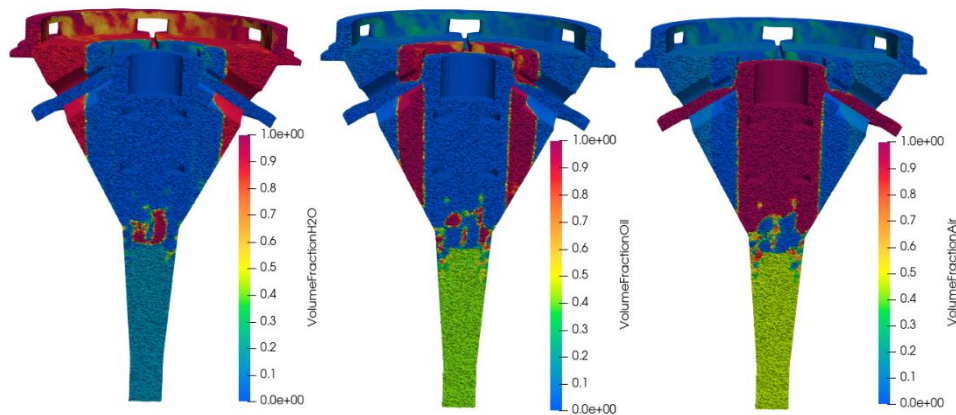
Распределение фаз по камере



Влияние газовыделения на расположение границы раздела фаз



РФАЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ



объемная доля
водной фазы

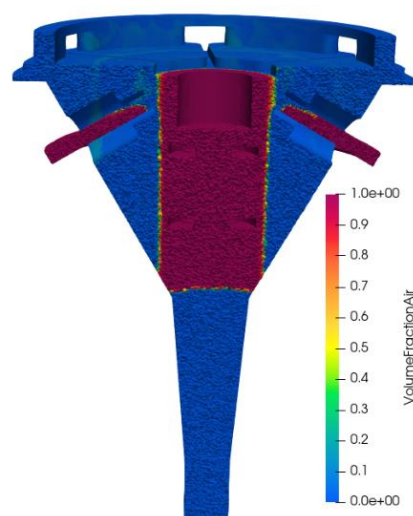
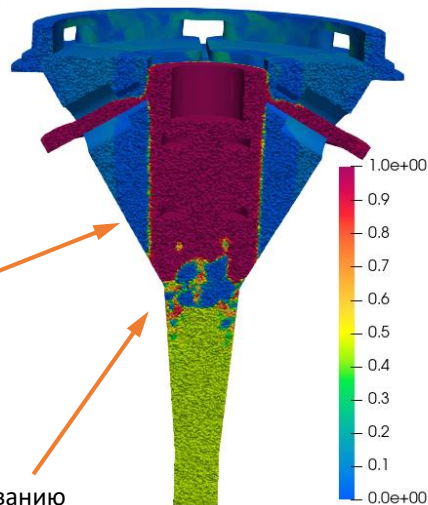
объемная доля
органической фазы

объемная доля
газовой фазы

Объемная доля газовой фазы

с учетом
газовыделения

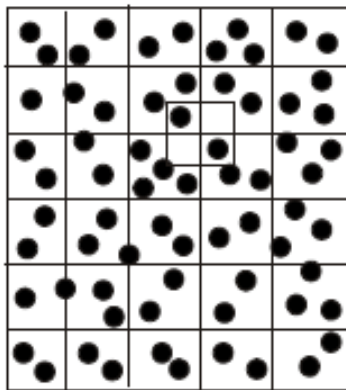
без учета
газовыделения



Газовыделение не сдвигает границу раздела
между газовой и органической фазами

Газовыделение приводит к образованию
пузырей в нижней части ротора

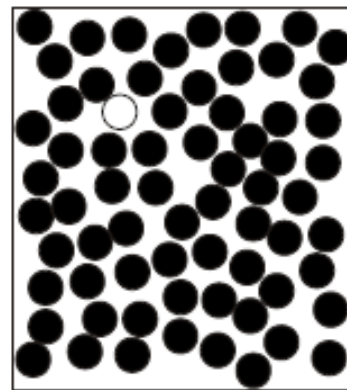
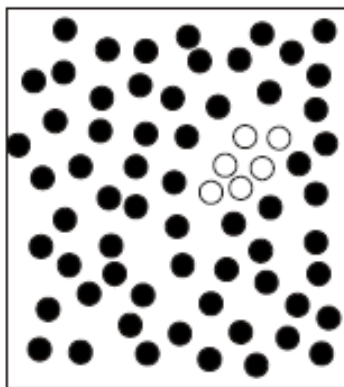
Подходы к моделированию многофазных систем (твердые частицы - жидкости)



Eulerian-Eulerian approach
(Multi-fluid and mixture models)



multiPhaseEulerFoam

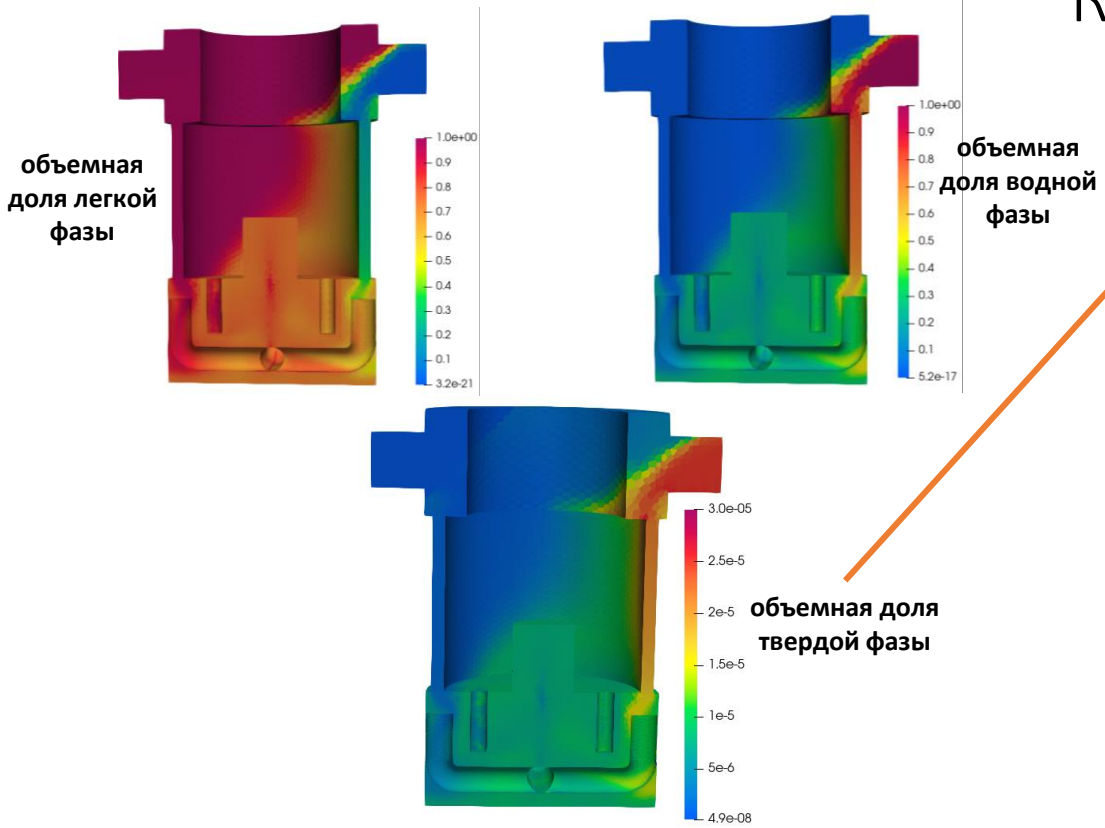


Eulerian-Lagrangian approach
(Particle tracing)



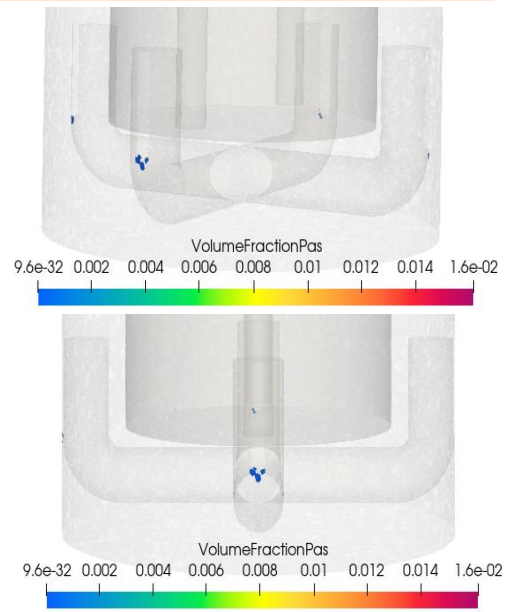
MPPICInterFoam

Распределение фаз по объему



Камера смешения

Образование застойных зон



Результаты моделирования Камера разделения

Распределение
тяжелой фазы по
объему



$C = 0.1 \text{ г/л}, \rho = 4 \text{ г/см}^3$

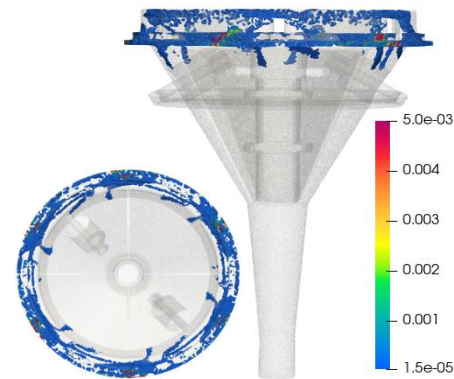
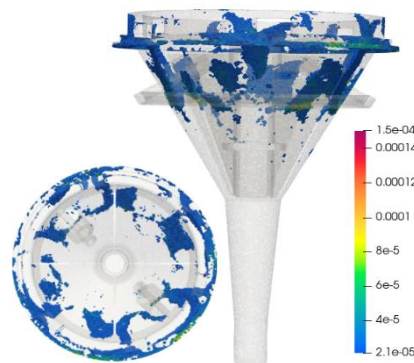
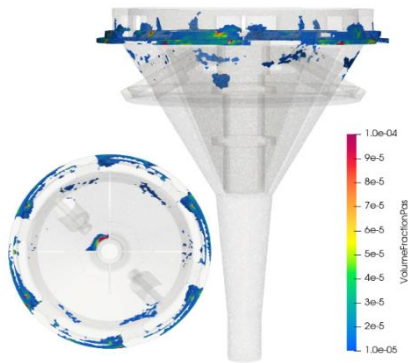


$C = 1 \text{ г/л}, \rho = 4 \text{ г/см}^3$



$C = 0.1 \text{ г/л}, \rho = 10 \text{ г/см}^3$

Образование
застойных зон



Выводы

Получено распределение скоростей фаз по экстрактору соответствующее ожидаемому.

Проведены расчеты влияния газовыделения на распределение фаз по камере разделения центробежного экстрактора. Показано, что в рассмотренном режиме газовыделение не оказывает влияния

Получено распределение скоростей фаз по экстрактору соответствующее ожидаемому.

Получено распределение фаз по камере смешения и разделения. На выходе из камеры смешения получается равномерно перемешанная эмульсия. В камере разделения эмульсия разделяется на тяжелую и легкую фазы и из камеры выходят легкая и водная фазы без примесей.

Получено распределение нерастворенного осадка по экстрактору. Найдены зоны накопления твердой фазы – узкие части конструкции экстракта.

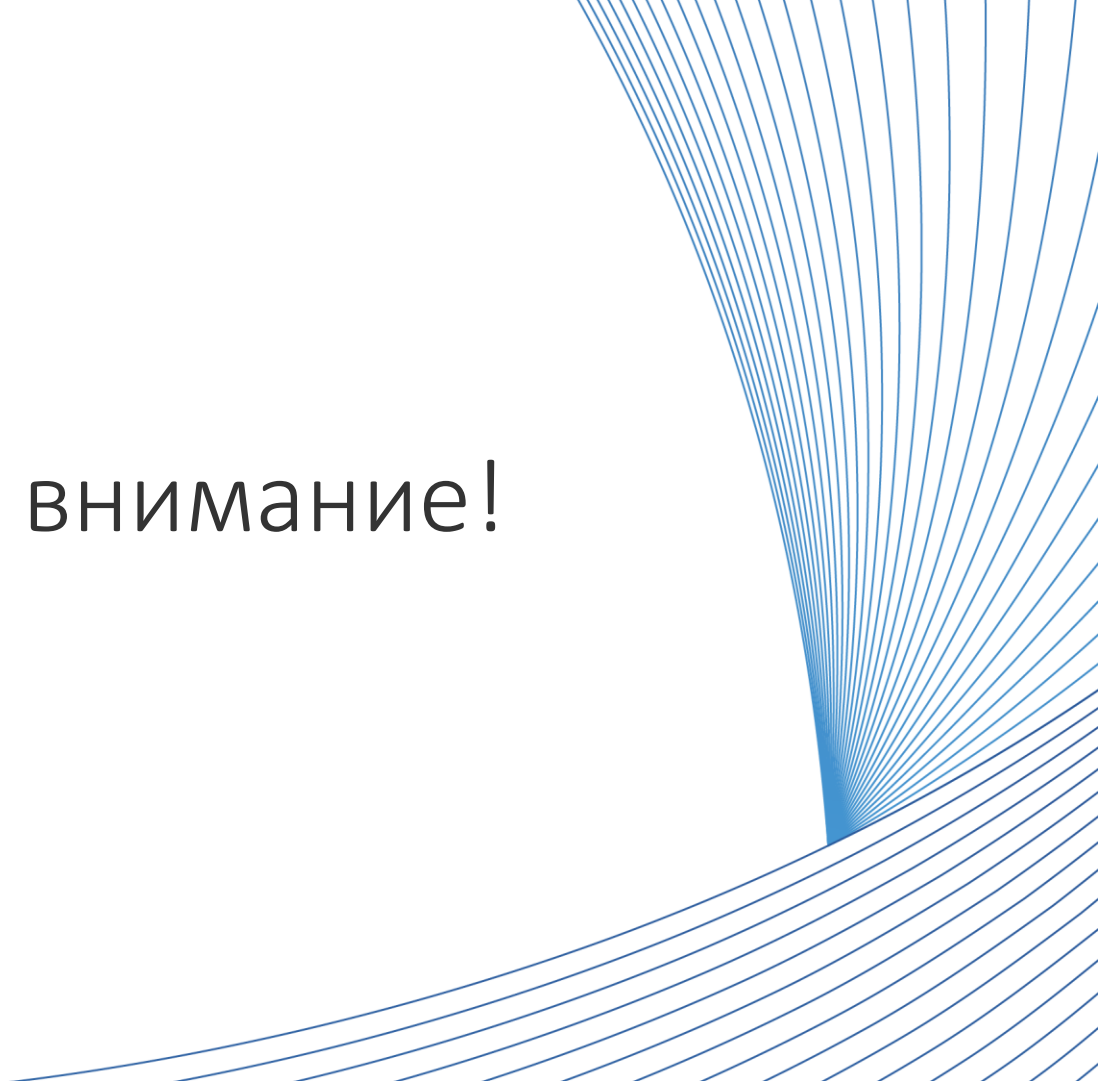
Заключение

Впервые с помощью трехмерной гидродинамики моделируются процессы, происходящие в центробежном экстракторе.

Полученные модели процессов могут быть использованы:

- при проектировании оборудования и оптимизации технологических режимов,
- как основа для создания цифрового двойника аппарата

Спасибо за внимание!



Связь моделей процессов и исходных параметров

