

# Разработка гидродинамических и теплофизических моделей технологических процессов ПЯТЦ

Бочкарева А.А., Шереметьева У.Ф., Белоногова Е.А., Макеева И.Р., Пешкичев И.В.

ФГУП «РФЯЦ-ВНИИТФ им. академ. Е.И. Забабахина», г. Снежинск

E-mail: a.a.bochkareva@vniitf.ru

Исследование выполнено при финансовой поддержке  
РФФИ в рамках научного проекта № 170100873

## Введение

Одними из важнейших стадий в цикле радиохимической переработки отработанного ядерного топлива являются стадии растворения, осветления исходных растворов и экстракции компонентов.

В рамках работ по проектному направлению «ПРОРЫВ» в РФЯЦ-ВНИИТФ проводится разработка гидродинамических и теплофизических моделей с целью обоснования безопасности технологических процессов замыкания ядерного топливного цикла (ЗЯТЦ) [1].

## Описание технологических процессов

Аппарат растворения представляет собой емкость с многофазной многокомпонентной смесью, состоящей из дисперсной фазы (порошка оксидов) и сплошной фазы (раствора азотной кислоты). [2].

Осветление проводится с целью удаления частиц не растворенных на этапе растворения [3]. Для осветления используют керамические мембранны.

В центробежном экстракторе ключевые компоненты переводятся из водной в органическую фазу. При контакте двух фаз происходит массообмен между фазами. В камере разделения экстрактора под действием центробежных сил и разности плотностей происходит разделение потока на легкую и тяжелую фазы [4].

## Среда моделирования

Для разработки модели выбран свободно распространяемый программный пакет OpenFOAM [5]. OpenFOAM - программный комплекс для моделирования гидродинамических и теплофизических процессов.

Вместе с кодом поставляется набор программ - решателей, в которых реализованы различные математические модели механики сплошных сред.

Проводилась модификация решателей twoPhaseEulerFoam, reactingParcelFoam, interFoam.

## Моделирование изменения плотности фаз в процессе экстракции

Переход ключевого компонента из водной фазы в органическую учитывается в виде уравнения переноса концентрации компонента. Плотность водной и органической фазы зависит от концентрации ключевого компонента.

## Модель растворения

Модель растворения основана на экспериментальных данных, полученных в работе [6]. Скорость растворения зависит от температуры, концентрации азотной и азотистой кислоты.

## Параметры моделей

- физические свойства компонентов (плотность, теплопроводность, теплоемкость, динамическая вязкость, коэффициент теплопроводности);
- геометрические параметры аппаратов, особенности конструкции;
- технологические параметры (масса загрузки, скорость вращения перемешивающего устройства, скорости на входе в аппарат, концентрации реагентов);
- удельное энерговыделение, обусловленное распадом ядер;
- температура в начальный момент времени;
- размер частиц дисперсной фазы;
- тепловой эффект химической реакции растворения.

## Рассчитываемые параметры

- температура раствора и частиц в течение всего процесса растворения и осветления;
- давление в аппарате растворения, осветления и экстракции;
- состав раствора в любой точке аппарата для каждого процесса;
- продолжительность проведения процесса для достижения заданных параметров;
- зависимость основных параметров процесса (состава, температуры) от режима проведения процесса.

## Постановка задачи. Экстракция

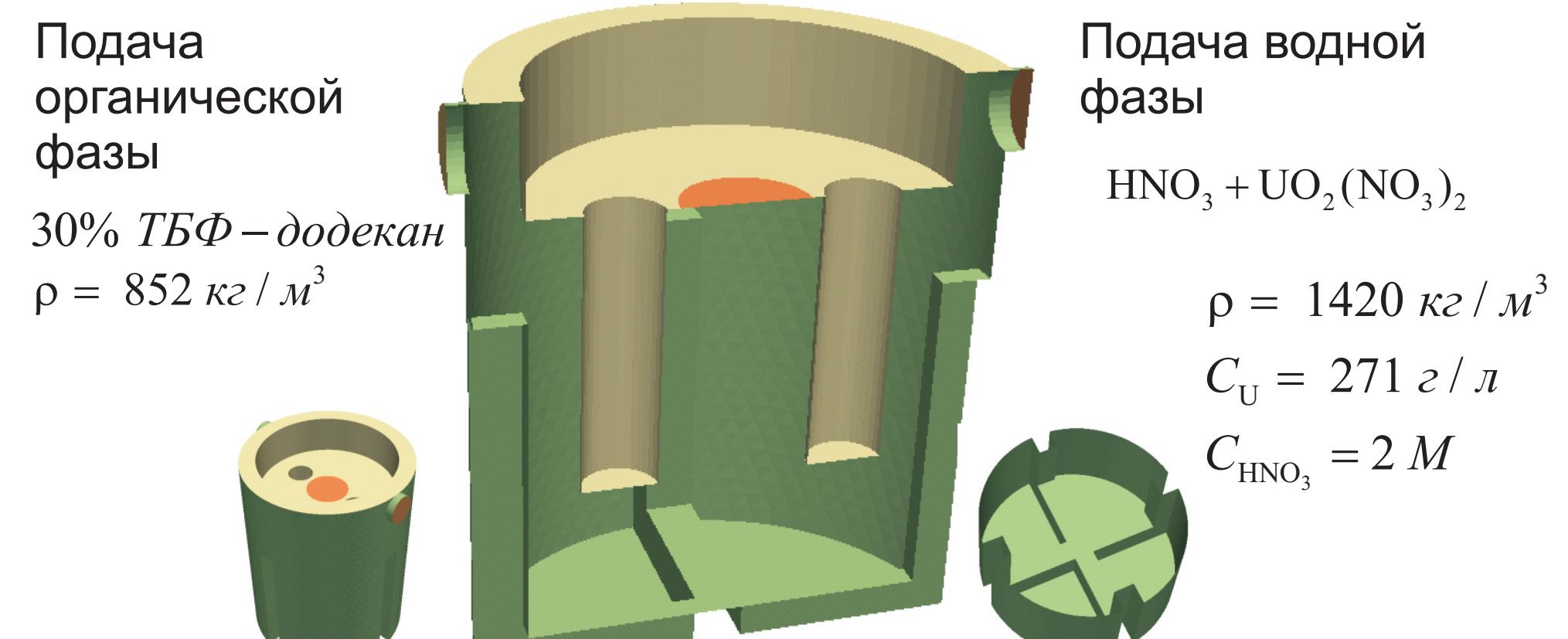


Рисунок 1 - Геометрия Центробежного экстрактора

## Определение площади поверхности раздела

Удельная межфазная поверхность определяет эффективность массообмена. Чем выше значение удельной межфазной поверхности, тем выше коэффициент разделения. Модель позволяет рассчитывать значение поверхности-объемного диаметра капель.

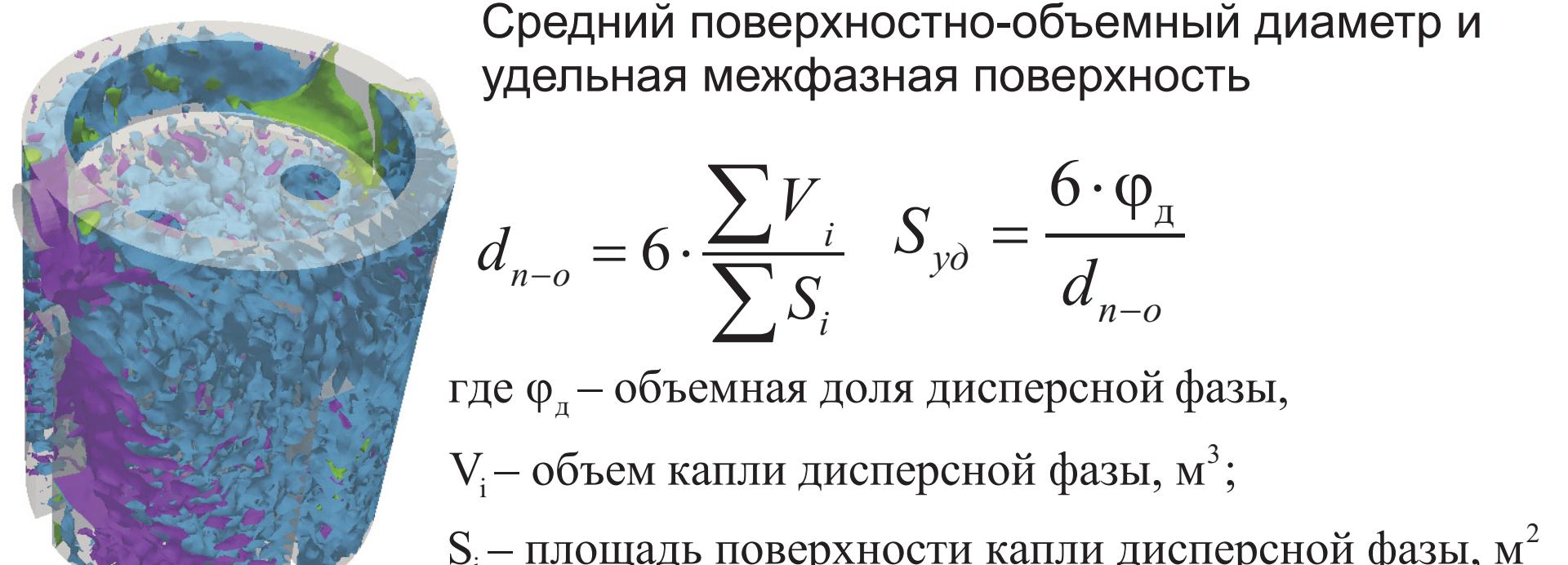


Рисунок 2 - Поверхность раздела водной и органической фазы

## Влияние скорости вращения перемешивающего устройства

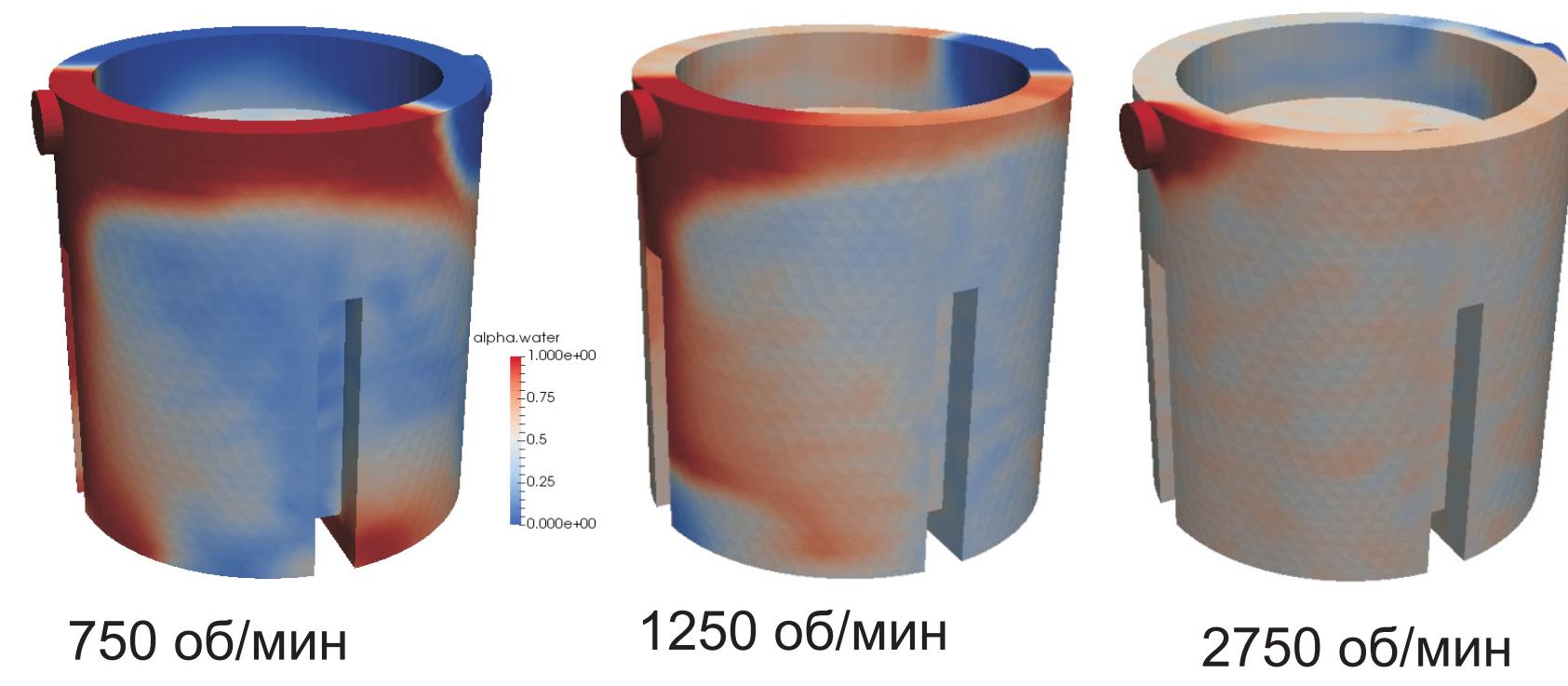


Рисунок 3 - Распределение объемной доли водной фазы при скорости вращения 750, 1250, 2750 об/мин

## Сравнение полученного диаметра капель с экспериментальными данными

Автор	d, мкм
Kent E. Wardle [9]	10-100
Nick Wyatt, [8]	60-900
М. Ф. Пушленков [7]	50-200
Результаты моделирования	75-220

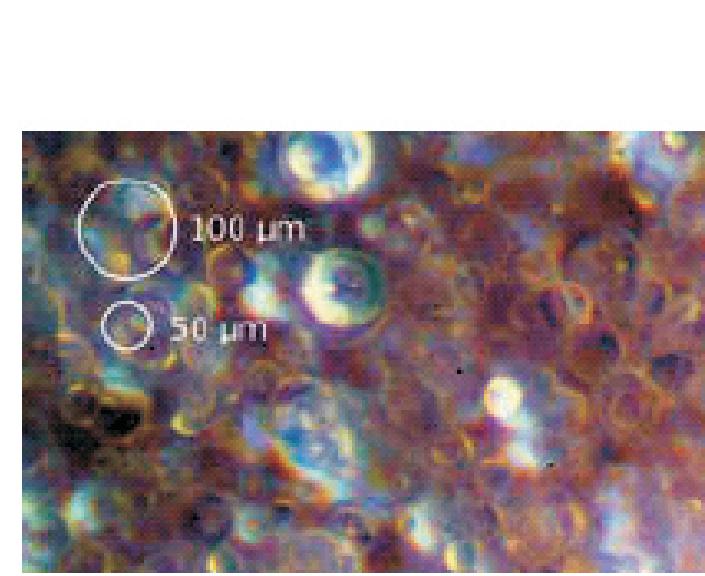


Рисунок 5 - Фотография капель в камере смешения и фотография установки [9]

## Сравнение результатов расчета плотности органической и водной фазы по модели с результатами ПК ВИЗАРТ [10]

В ПК ВИЗАРТ реализована модель экстракционного аффинажа в динамическом режиме.

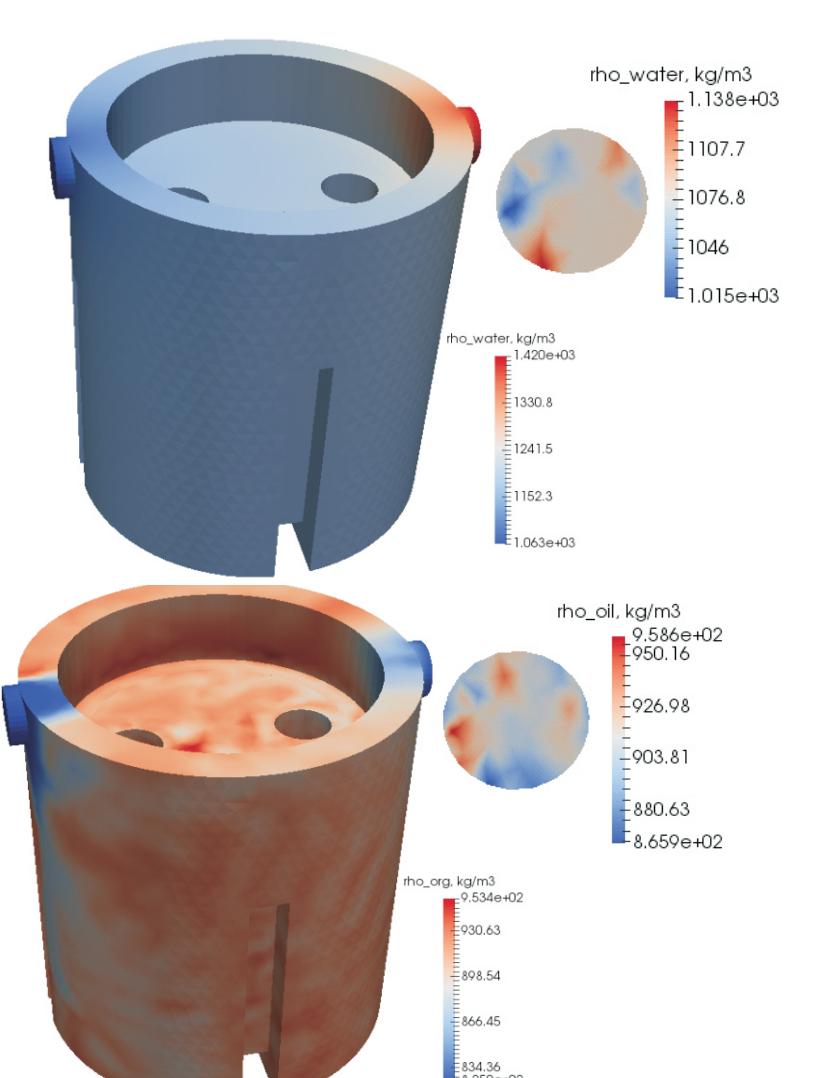


Рисунок 6 - Распределение плотности органической и водной фазы

Плотность фаз изменяется в процессе перехода ключевого компонента из водной фазы в органическую. В модели учитывается переход компонента и зависимость плотности фаз от его концентрации.

## Постановка задачи. Растворение

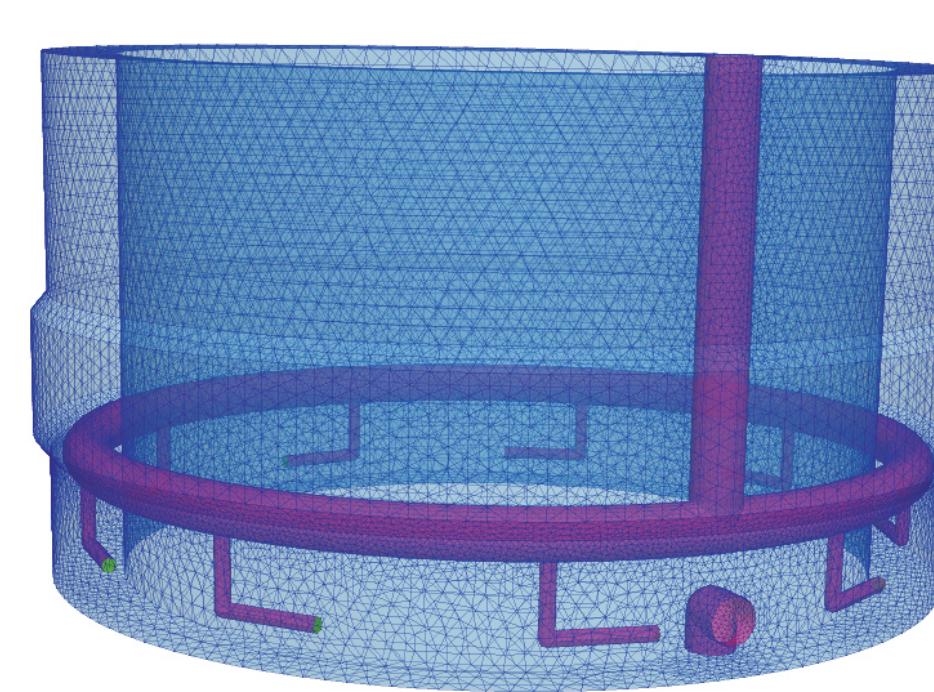


Рисунок 7 - Геометрия Аппарата растворения

Объем аппарата 50 литров  
Масса порошка 7.5 кг  
Размер частиц 100 мкм  
Перемешивание осуществляется под действием насоса свободно-вихревого типа.

$$C_{HNO_3} = 2 \text{ M}, \text{ расход раствора } 6 \text{ м}^3/\text{ч}$$

Расчет константы скорости растворения [6]

$$U_3 O_8 + 8HNO_3 \rightarrow 3UO_2(NO_3)_2 + 2NO_2 + 4H_2O$$

$$k_{dis} = A_1 \exp\left(\frac{-5.58 \cdot 10^4}{RT}\right) [HNO_3] + 2 \cdot 10^{-4} \exp\left(\frac{-6.60 \cdot 10^4}{RT}\right) [HNO_2][HNO_3]^2$$

где  $A_1$  – параметр модели;  
 $R$  – газовая постоянная, Дж/(моль·К);  
 $[HNO_3]$  – концентрация азотной кислоты, моль/л;  
 $[HNO_2]$  – концентрация азотистой кислоты, моль/л;  
 $k_{dis}$  – константа скорости растворения, моль/(см²·мин)

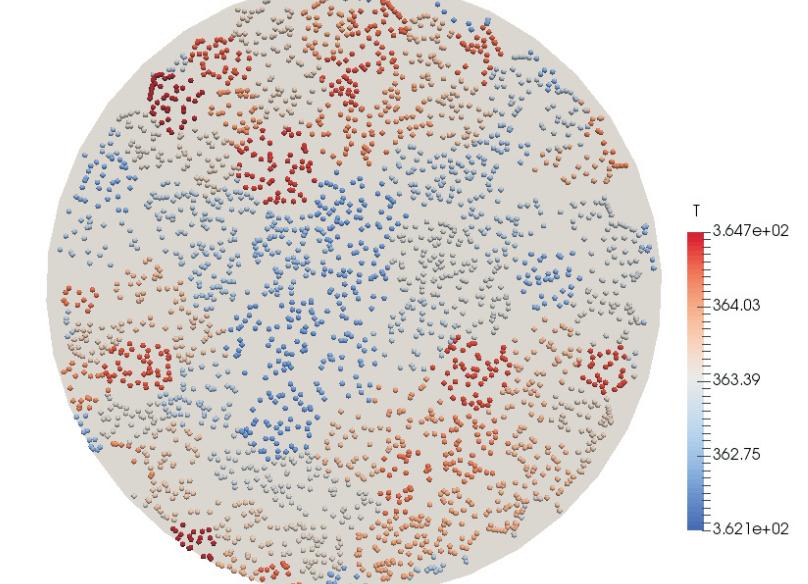


Рисунок 8 - Поле скоростей в аппарате растворения

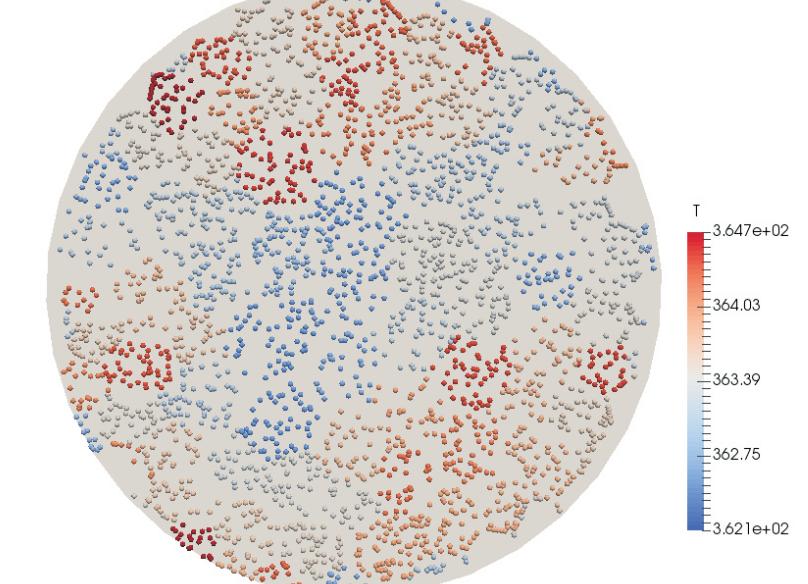


Рисунок 10 - Температура частиц

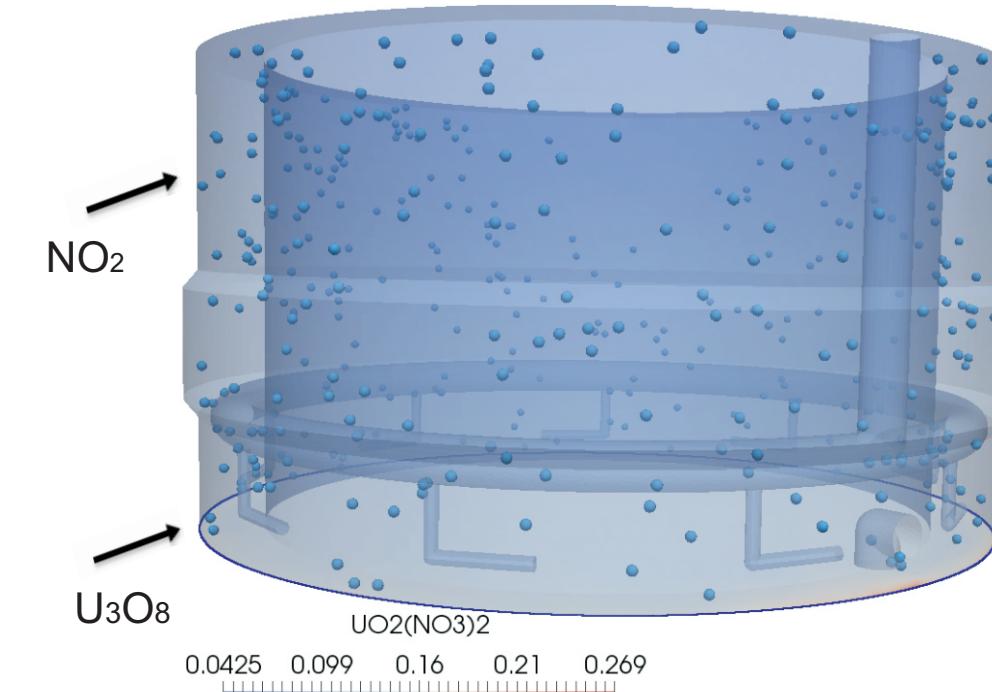


Рисунок 9 - Поле концентраций, г/л

В модели учитывается газовая фаза (оксиды азота), твердая фаза (порошок ОЯТ), жидккая фаза (раствор азотной кислоты).

Энерговыделение в процессе растворения обусловлено распадом ядер и протеканием химических реакций. Модель позволяет проводить оценку максимальных температур в аппарате в течение всего цикла растворения.

## Постановка задачи. Осветление

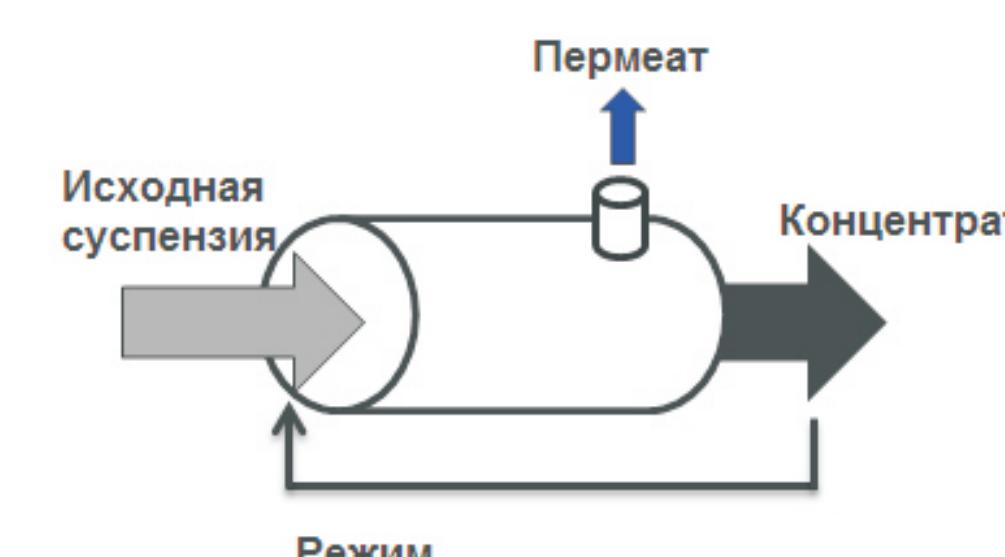


Рисунок 11 - Принцип работы аппарата осветления

В теплофизической модели учитывается энерговыделение, обусловленное распадом ядер, протеканием химической реакции и трением частиц дисперсной фазы.

В результате проведения процесса получают очищенный раствор (пермеат) и концентрат.

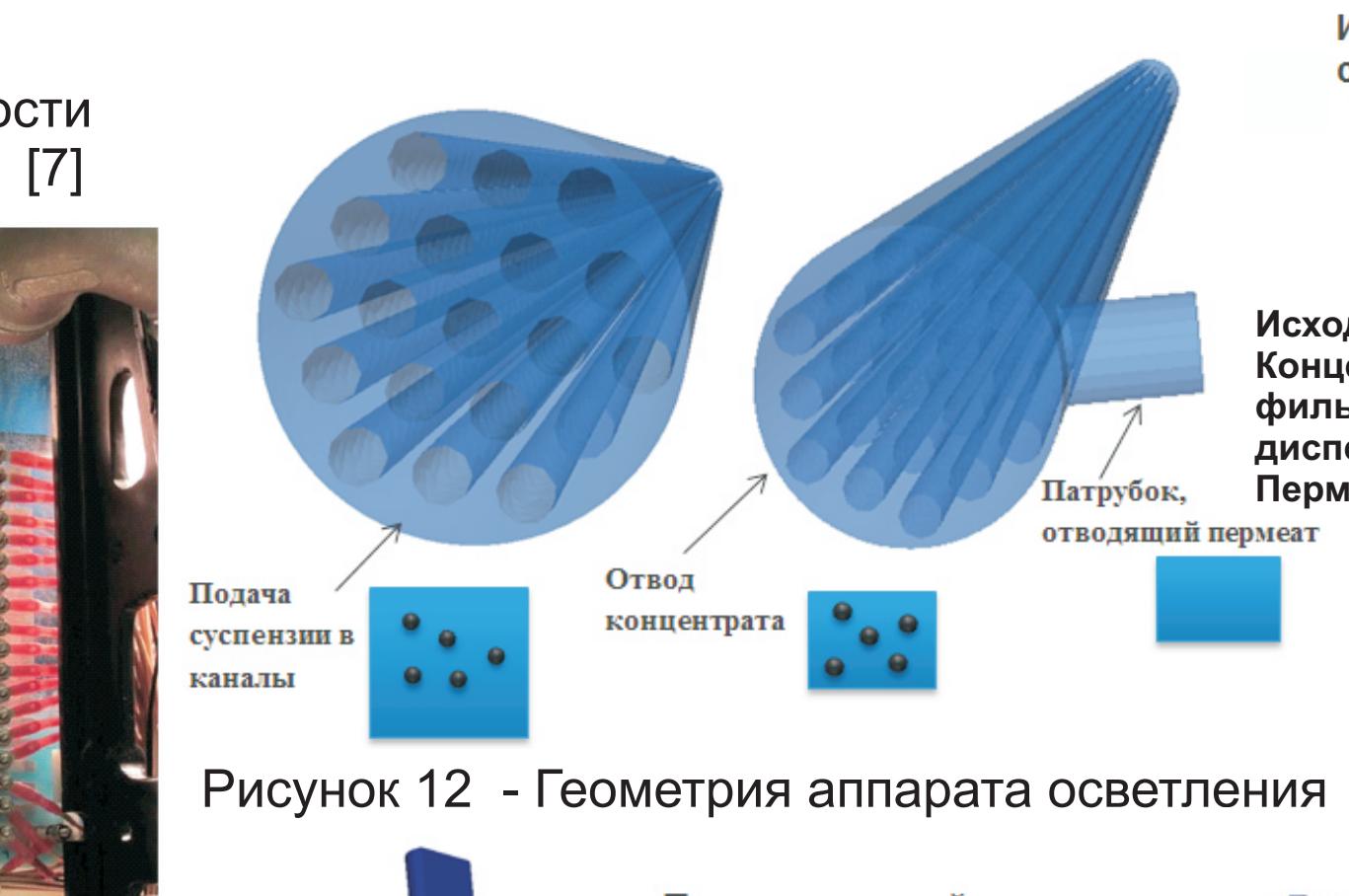


Рисунок 12 - Геометрия аппарата осветления

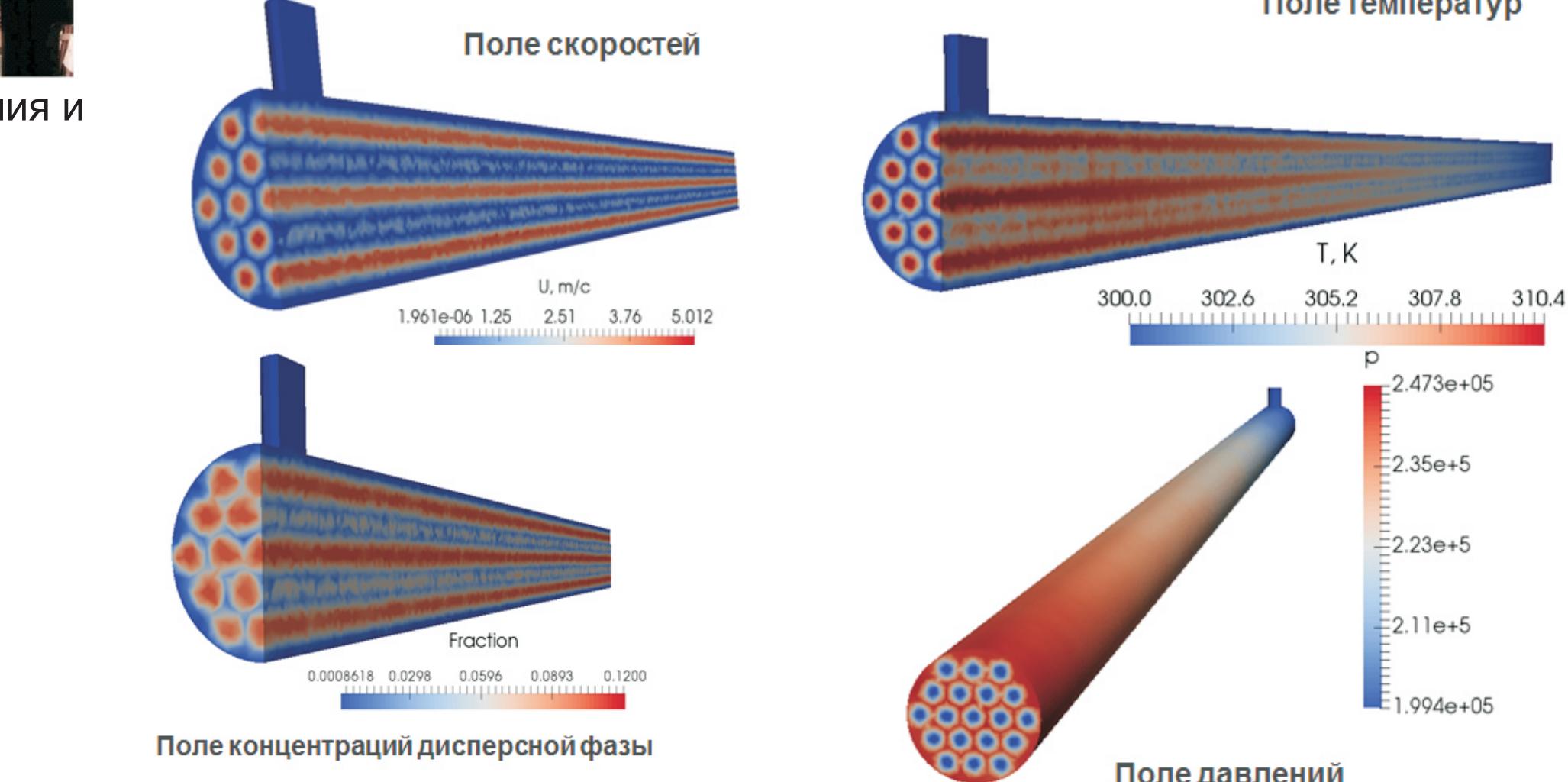


Рисунок 13 - Результаты расчетов: поле скоростей, температур, концентраций дисперсной фазы и давлений.

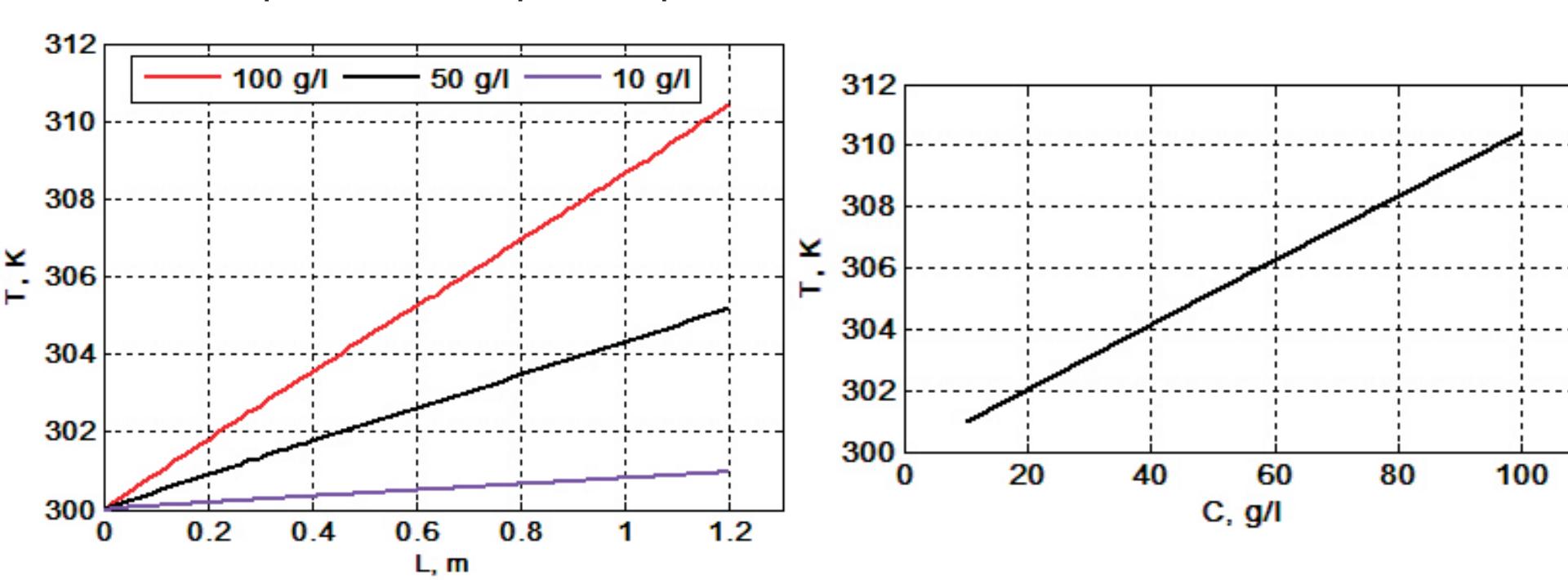


Рисунок 14 - Распределение температуры по длине канала

Рисунок 15 - Зависимость максимальной температуры от концентрации дисперсной фазы