

УДК 532.5.013.2+66.011

**И.М. Васенин, А.Ю. Крайнов, А.А. Шахтин,
Р.Л. Мазур, П.В. Зернаев, М.В. Чуканов**

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ И РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННЫХ РАСЧЕТОВ ПЕРЕЛИВА UF_6 В ПРИСУТСТВИИ МИКРОКОЛИЧЕСТВ ЛЕГКИХ ПРИМЕСЕЙ

Представлены математическая модель и результаты расчетов распределения легких примесей в объеме жидкого UF_6 при его переливе. Математическая модель основана на уравнениях Навье – Стокса для вязкой несжимаемой жидкости с использованием приближения Буссинеска. Система уравнений решалась численно методом Патанкара. Получены зависимости распределения массы легких примесей, испарившихся в емкость и перелитых с жидкостью.

Ключевые слова: *гексафторид урана, примеси, теплоперенос, массоперенос.*

В современной ядерной технологии большое внимание уделяется содержанию примесей не только в конечных продуктах, но и на промежуточных стадиях. На стадии обогащения урана по легкому изотопу уран-235 применяется гексафторид урана UF_6 , в котором постоянно присутствуют разнообразные примеси, молекулярная масса которых меньше массы UF_6 (так называемые легкие примеси): фториды, оксифториды и оксиды различных металлов и неметаллов, а также компоненты воздуха. При этом содержание фтористого водорода HF в гексафториде урана значительно превышает суммарное содержание других примесей [1]. Значительное содержание HF может оказывать влияние на разделяющую способность газовых центрифуг.

При обогащении урана на газоразделительных заводах UF_6 присутствует на различных стадиях технологического процесса в различных агрегатных состояниях. В частности, перелив из технологического баллона в транспортный контейнер осуществляют при таких условиях, когда UF_6 находится в баллоне в жидкой фазе с газовой «шапкой». Для оценки возможности очистки UF_6 от легких примесей при его переливе из технологического баллона в транспортный контейнер возникла необходимость провести термо- и гидродинамические расчеты с учетом конвективного течения в жидкой фазе, поверхностного испарения компонентов смеси и взаимного влияния жидкой и газовой фаз.

В работе [1] получены уравнения, связывающие температуру и давление в баллоне с содержанием легких примесей в жидкой и газовой фазах UF_6 . Эти уравнения показывают значительное отклонение системы от закона Рауля, то есть относительное содержание легких примесей в газовой фазе значительно больше, чем в жидкой.

Практика переливов на заводе разделения изотопов ОАО «СХК» показала, что помимо эффекта неоднородного распределения легких примесей между фазами в технологическом баллоне имеет место эффект неоднородного распределения легких примесей в объеме жидкого UF_6 . Поэтому для проведения всесторонней оценки процесса очистки UF_6 от легких примесей была разработана комплексная математическая модель перелива, проведены численные расчеты и экспериментальные измерения.

При разработке математической модели были приняты следующие исходные данные. Баллон был представлен в виде цилиндрического объема, заполненного вязкой жидкостью до высоты H . В качестве модельной примеси, как и при экспериментальных измерениях, использовался фтористый водород. Жидкость представляла собой смесь двух жидкостей, при этом концентрация растворенного HF в UF_6 небольшая. На поверхности жидкости происходило испарение компонентов смеси жидкостей. На испарение жидкости тратилась теплота. На стенках и дне объема поддерживались изотермические условия. Предполагалось, что плотность жидкости линейно зависит от температуры, при остывании жидкости ее плотность увеличивается. Также предполагалось, что плотность раствора жидкости линейно зависит от концентрации растворенного вещества и при испарении примеси плотность жидкости увеличивается. В связи с этими процессами внутри жидкости будет возникать конвективный тепло- и массоперенос.

Моделирование гидродинамики течения вязкой несжимаемой жидкости было проведено уравнениями Навье – Стокса [2]. Учет температурного расширения жидкости, находящейся в неизотермических условиях, и изменения ее плотности при изменении концентрации растворенного компонента проводился в приближении Буссинеска [2].

Система уравнений, описывающая движение и тепло- и массоперенос в жидкости, записанная в цилиндрической системе координат, имеет вид

$$\frac{\partial ur}{\partial t} + \frac{\partial ruu}{\partial r} + \frac{\partial ruv}{\partial y} = -\frac{r}{\rho} \frac{\partial p}{\partial r} + \nu \left(\frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial u}{\partial r} \right) + r \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} - \frac{u}{r} \right); \quad (1)$$

$$\frac{\partial vr}{\partial t} + \frac{\partial ruv}{\partial r} + \frac{\partial rvv}{\partial y} = -\frac{r}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} + \nu \left(\frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial v}{\partial r} \right) + r \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) - r g \alpha \Delta T - r g \gamma \Delta c; \quad (2)$$

$$\frac{\partial ru}{\partial r} + \frac{\partial rv}{\partial y} = 0; \quad (3)$$

$$\frac{\partial Tr}{\partial t} + \frac{\partial ruT}{\partial r} + \frac{\partial rvT}{\partial y} = a \left(\frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + r \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right); \quad (4)$$

$$\frac{\partial cr}{\partial t} + \frac{\partial ruc}{\partial r} + \frac{\partial rvc}{\partial y} = D \left(\frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial c}{\partial r} \right) + r \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \right). \quad (5)$$

Начальные условия:

$$u(r, y, 0) = 0, \quad v(r, y, 0) = 0, \quad T(r, y, 0) = T_0, \quad c(r, y, 0) = c_0. \quad (6)$$

Граничные условия:

$$u(0, y, t) = 0, \quad u(R, y, t) = 0, \quad u(r, 0, t) = 0, \quad \frac{\partial u(r, H, t)}{\partial y} = 0,$$

$$\frac{\partial v(0, y, t)}{\partial r} = 0, \quad v(R, y, t) = 0, \quad v(r, H, t) = v_0, \quad v(r, 0, t) = \begin{cases} v_{\text{out}}, & 0 < r < r_{\text{out}}, \\ 0, & r_{\text{out}} < r < R, \end{cases} \quad (7)$$

$$\frac{\partial T(0, y, t)}{\partial r} = 0, \quad T(R, y, t) = T_0, \quad T(r, 0, t) = T_0, \quad \lambda \frac{\partial T(r, H, t)}{\partial y} = -B,$$

$$\frac{\partial c(0, y, t)}{\partial r} = 0, \quad \frac{\partial c(R, y, t)}{\partial r} = 0, \quad \frac{\partial c(r, 0, t)}{\partial y} = 0, \quad D \frac{\partial c(r, H, t)}{\partial y} = -\beta(c(r, H, t) - c_{oc}),$$

$$H = H(t) = H_0 - v_0 t.$$

где t – время; r, y – координаты; u, v – компоненты вектора скорости вдоль осей r, y соответственно; p – давление; ρ – плотность; T – температура; c – концентрация растворенного вещества; ν – кинематический коэффициент вязкости; a – коэффициент температуропроводности; λ – коэффициент теплопроводности; D – коэффициент диффузии; g – ускорение силы тяжести; α – коэффициент температурного расширения; γ – коэффициент концентрационного расширения; β – коэффициент массоотдачи; B – тепловой поток при испарении; R – радиус емкости; H – высота уровня жидкости в емкости; r_{out} – радиус сливного отверстия; c_{oc} – концентрация вещества в газовой фазе; v_0, v_{out} – скорость жидкости на поверхности и в выходном патрубке. Индекс «0» соответствует начальным условиям.

Для проведения численного моделирования системы уравнений использовался метод Патанкара [3 – 5]. Для определения поля скоростей решались уравнения (1) – (3). Затем по полученному полю скоростей определялись поля температуры и концентрации из решения уравнений (4), (5). Расчет проводился в подвижной системе координат, связанной с поверхностью жидкости. В расчетах было условно принято, что баллон имеет диаметр 0,6 м и высоту уровня жидкого UF₆ 1,5 м. Концентрация HF в баллоне задавалась менее 0,1 %.

Предполагалось, что в начале слива UF₆ из технологического баллона легкие примеси распределены в объеме UF₆ равномерно. В расчетах варьировался коэффициент массоотдачи, величина которого является неизвестной.

На рис. 1 представлены поля концентраций и скоростей в баллоне в моменты времени с периодичностью 15 000 секунд. При испарении UF₆ и легких примесей вблизи поверхности жидкости возникает неоднородное распределение температуры и концентрации примеси, вызывающее из-за действия сил плавучести конвективное движение внутри баллона. Более тяжелая жидкость (с меньшей температурой и концентрацией легких примесей) перемещается вниз на дно баллона. Она движется в центре баллона и вдоль стенок (рис. 1, а). С течением времени возникает дополнительная конвективная колонка в промежутке между центром и стенкой (рис. 1, б, в, г), блуждающая по поверхности. В жидкости возникает сложная картина течения (см. поля скоростей на рис. 1), однако прослеживается тенденция к тому, что обедненная легкими примесями жидкость движется к месту расположения сливного канала. Такое течение приводит к частичному уменьшению концентрации легких примесей в жидком UF₆, сливаемом из баллона.

На рис. 2 представлена динамика изменения относительной массы легкой примеси: испарившейся в газовую «шапку» в баллоне, находящуюся в жидкости в баллоне и слившейся из баллона вместе с UF₆ при трех значениях коэффициента массоотдачи при испарении легких примесей на поверхности жидкости.

Из рисунков видно, что с увеличением коэффициента массоотдачи массовая доля легких примесей, слившихся из баллона, уменьшается. При небольшом значении коэффициента массоотдачи вначале сливается UF₆, обедненный легкими примесями, а затем, в конце перелива, доля слившихся с UF₆ легких примесей начинает превышать величину, испарившуюся в газовую «шапку» (рис. 2, а).

Было проведено моделирование очистки UF₆ от легких примесей в предположении неоднородного распределения примесей в объеме жидкого UF₆.

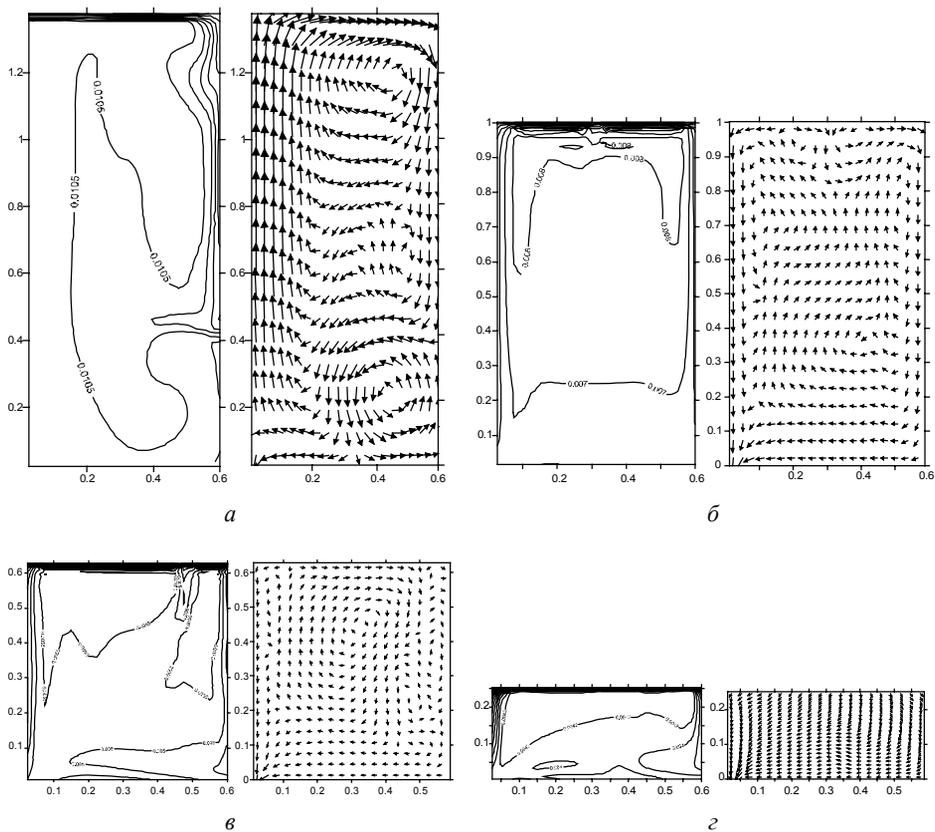


Рис. 1. Поля концентрации и скорости в моменты времени t, c :
 $a - 5\ 000$; $б - 20\ 000$; $в - 35\ 000$; $г - 50\ 000$; $\beta = 2 \cdot 10^{-4} \text{ кг}/(\text{м}^2 \cdot \text{с})$

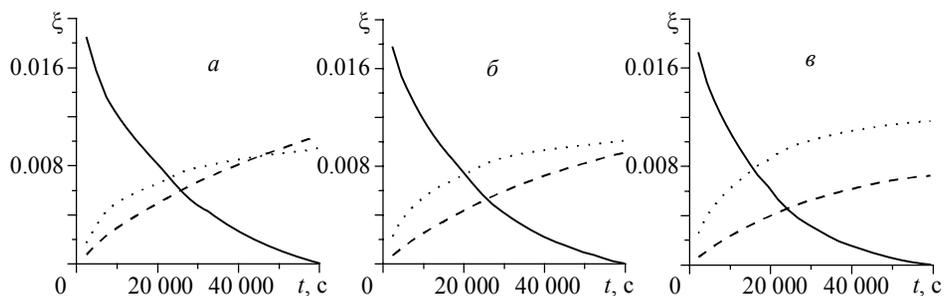


Рис. 2. Зависимость относительной массы легкой примеси: испарившейся (пунктирная линия), слитой (штриховая линия) и оставшейся в емкости (сплошная линия) для $\beta, \text{ кг}/(\text{м}^2 \cdot \text{с})$:
 $a - 2 \cdot 10^{-4}$; $б - 5 \cdot 10^{-4}$; $в - 5 \cdot 10^{-3}$

Предполагалось, что легкие примеси расположены в баллоне в виде концентрических колец. В расчеты была заложена следующая циклограмма расчета. Первые три часа происходит испарение легких примесей. В последующие два часа испарение с поверхности UF_6 отсутствует – произошло насыщение газовой

шапки над поверхностью жидкого UF_6 . После пяти часов процесса начинается слив UF_6 , при этом параметры в газовой шапке отклоняются от равновесия и с поверхности UF_6 вновь начинается испарение. Коэффициент массоотдачи в расчетах считался постоянной величиной. На рис. 3 представлены поля относительной концентрации легких примесей в объеме в фиксированные моменты времени. Окончание испарения в момент времени 10 800 с. Окончание «отстоя» в момент времени 18 000 с, затем начинается слив с испарением.

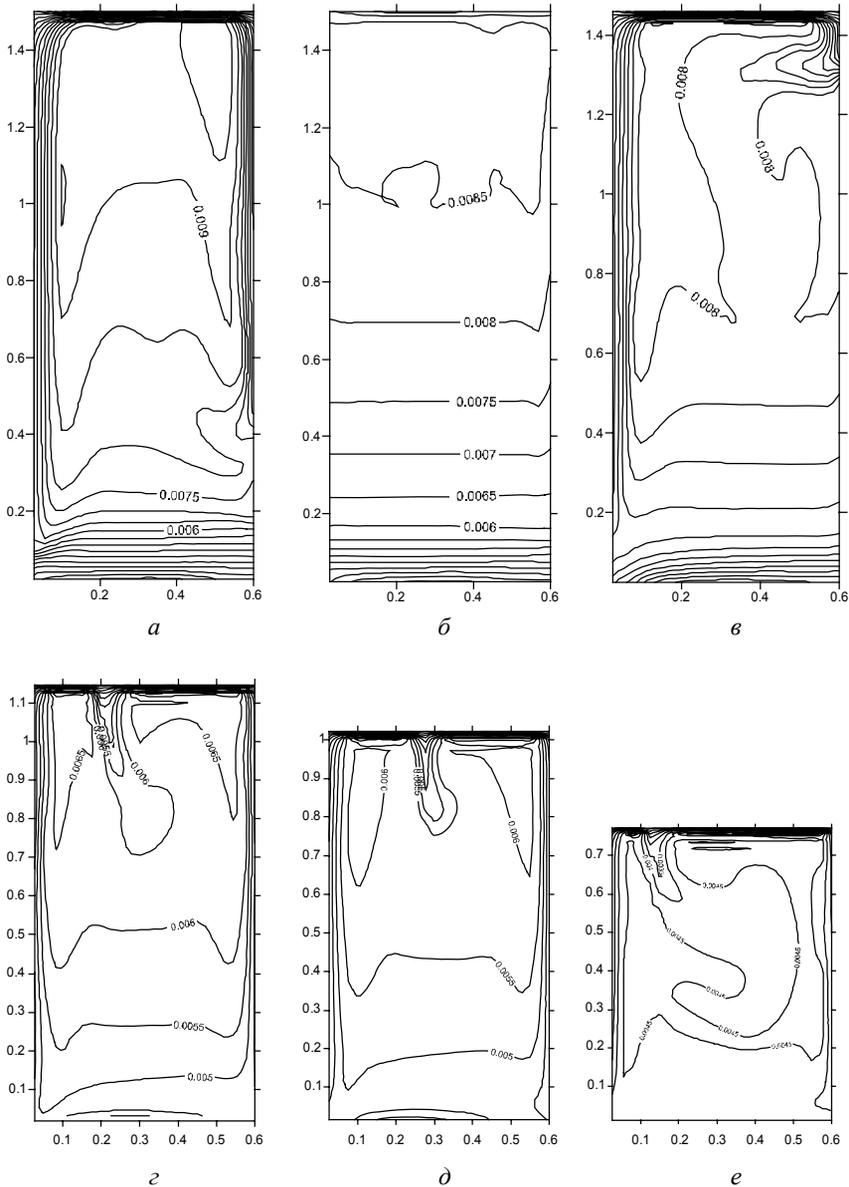


Рис. 3. Поля относительной концентрации легких примесей в моменты времени t , с: а – 9 700; б – 17 000; в – 22 000; г – 32 000; д – 37 000; е – 47 000; $\beta = 2 \cdot 10^{-4}$ кг/(м²·с)

Из проведенных расчетов видно, что при заданной величине и структуре начальной неоднородности распределения легких примесей достаточно быстро происходит стратификация UF_6 по плотности. Преимущественное испарение легких примесей с поверхности UF_6 приводит к возникновению конвективного движения, когда после испарения легкой примеси в тонком слое возникает более тяжелая жидкость. Такая стратификация неустойчива и более тяжелая жидкость конвективными колонками вдоль оси баллона опускается с поверхности вниз (рис. 3, а). После прекращения испарения, т.е. после насыщения газовой «шапки» парами UF_6 и легкой примеси, конвективное течение успокаивается, устанавливается нормальная стратификация жидкости по плотности (см. рис. 3, б).

С момента начала слива и одновременно испарения легкой примеси и UF_6 в баллоне развивается конвективное течение, обусловленное сливом и возникновением тяжелого слоя жидкости в тонком слое вблизи ее поверхности. Из-за неустойчивости тяжелая жидкость конвективными колонками опускается вниз. При этом помимо осевой конвективной колонки периодически возникают и исчезают колонки в стороне от оси. Положение мест возникновения этих дополнительных конвективных колонок от поверхности «блуждает» по поверхности (см. рис. 3, в – е). Наблюдается некоторое увеличение концентрации легкой примеси на поверхности в виде слоя, который частично разрушается за счет конвективного течения.

На рис. 4 представлена динамика изменения относительных масс легкой примеси, испарившейся в газовую «шапку» в баллоне, находящуюся в жидкости в баллоне, и слившейся из баллона вместе с UF_6 для двух значений коэффициента массоотдачи при испарении легкой примеси с поверхности жидкости.

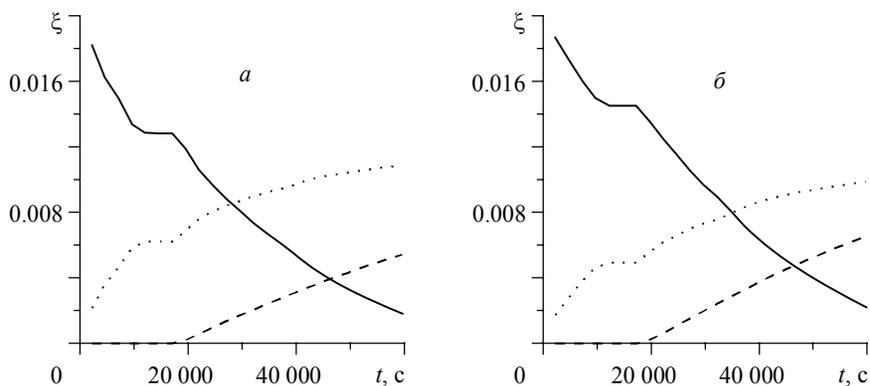


Рис. 4. Зависимость относительной массы легкой примеси: испарившейся (пунктирная линия), слитой (штриховая линия) и оставшейся в емкости (сплошная линия) при β , $kg/(m^2 \cdot s)$: $a - 2 \cdot 10^{-4}$; $b - 1 \cdot 10^{-4}$

Из рисунков видно, что с учетом возможной неоднородности расположения легкой примеси ее количество, слившееся из баллона, уменьшается, по сравнению со случаем однородного распределения примеси в баллоне.

Таким образом, эффект очистки UF_6 за счет неоднородности расположения легких примесей в объеме UF_6 в баллоне и их стратификации при гомогенизации моделируется с помощью математической модели (1) – (7). Однако для получения количественных характеристик этого процесса необходимо знать коэффициент массоотдачи и масштаб возможных неоднородностей в объеме UF_6 .

ЛИТЕРАТУРА

1. *Васенин И.М., Крайнов А.Ю., Мазур Р.Л. и др.* Определение степени ассоциации малых количеств фтористого водорода в системе HF – UF₆ // Изв. вузов. Физика. 2009. № 7/2. С. 44 – 48.
2. *Лойцянский Л.Г.* Механика жидкости и газа. М.: Наука, 1987. 840 с.
3. *Патанкар С.* Численные методы решения задач теплообмена и динамики жидкости. М.: Энергоатомиздат, 1984. 152 с.
4. *Андерсен Д., Таннехилл Дж., Плетчер Р.* Вычислительная гидромеханика и теплообмен: в 2 т. М.: Мир. 1990. 728 с.
5. *Пејре Р., Тейлор Т.* Вычислительные методы в задачах механики жидкости. Л.: Гидрометеоздат, 1986. 352 с.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ:

ВАСЕНИН Игорь Михайлович – профессор, доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой прикладной аэромеханики Томского государственного университета. E-mail: akrainov@ftf.tsu.ru

КРАЙНОВ Алексей Юрьевич – профессор, доктор физико-математических наук, профессор кафедры математической физики Томского государственного университета. E-mail: akrainov@ftf.tsu.ru

ШАХТИН Андрей Анатольевич – лаборант кафедры прикладной аэромеханики Томского государственного университета. E-mail: vestnik_tgu_mm@math.tsu.ru

МАЗУР Роман Леонидович – заместитель главного инженера, ОАО «Сибирский химический комбинат». E-mail: vestnik_tgu_mm@math.tsu.ru

ЗЕРНАЕВ Петр Васильевич – инженер-физик ОАО «Сибирский химический комбинат». E-mail: zernaevp@mail.ru

ЧУКАНОВ Михаил Викторович – инженер-конструктор, ОАО «Сибирский химический комбинат». E-mail: chukanov2008@yandex.ru

Статья принята в печать 15.04.2010 г.