Технологическое моделирование процесса гидрофторирования оксида урана

О.Б. Громов¹, А.А. Быков², Е.М. Максимов³, П.И. Михеев⁴, С.О. Травин⁵, М.Л. Ахтямова⁴, А.А. Галата⁶, С.А. Котов⁶, А.И. Рудников⁶

¹Акционерное общество «Высокотехнологический научно-исследовательский институт неорганических материалов имени А.А. Бочвара», г. Москва, Россия

²Федеральное государственное унитарное предприятие Научно-производственное объединение

«Техномаш», г. Москва, Россия

³Институт проблем управления им. В.А. Трапезникова РАН, г. Москва, Россия

⁴Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана, г. Москва, Россия

⁵Институт химической физики имени Н.Н. Семенова РАН, г. Москва, Россия

⁶ Акционерное общество «Сибирский химический комбинат им. М.В. Ломоносова», г. Северск Томской обл., Россия

Аннотация. Получение UO_2 и UF_4 - важные шаги в производстве UF_6 . В работе представлены численные исследования распределения потоков материалов основных реагирующих веществ и тепловых потоков по размерам промышленного комбинированного аппарата для гидрофторирования диоксида урана (AKT). Основные потери тепла, которые влияют на температурные поля в реакционных зонах реактора гидрофторирования, происходят в зонах аппарата, которые практически не защищены теплоизоляцией. Рассчитаны температуры процесса гидрофторирования по оси устройства и вблизи его стенки. Показано, что в средней и выходной зонах температурное поле неоднородное, особенно в конечной зоне IV, что будет отрицательно влиять на качество продукта. Разница в значениях температуры достигает 100-180°С. Программное обеспечение ANSYS используется для выполнения расчетов и визуализации результатов. Приведены рекомендации по модернизации конструкции AKT с целью снижения потерь тепла.

Ключевые слова: оксиды урана, тетрафторид урана, гидрофторирование, математическое моделирование, оптимизация процессов и аппаратов, кинетика гидрофторирования.

DOI: 10.14357/20718632180210

Введение

В настоящее время для получения ядерного топлива для АЭС на основе обогащённого по изотопу ²³⁵U используют гексафторид урана единственное пригодное в современных условиях развития техники соединение для разделения изотопов природного урана. Летучий гексафторид природного урана является исходным веществом для заводов разделения изотопов. Гексафторид урана получают фторированием элементным фтором соединений урана – оксидов и тетрафторида. Наиболее распространённым в мировой практике прекурсором при получении UF₆ является тетрафторид урана [1].

Одним из направлений развития сублиматно-разделительного комплекса Топливной компании ГК «Росатом» является оптимизация технологического процесса производства UF₆



Рис. 1. Аппарат комбинированного типа для фторирования оксидов урана [3]

путем введения промежуточной операции высокотемпературного гидрофторирования диоксида урана [2].

В данной работе представлены результаты математического и компьютерного моделирования работы реактора гидрофторирования оксида урана в вертикальной части АКТ (аппарат комбинированного типа) в зонах II, III и IV (Рис. 1).

В горизонтальной зоне I аппарата практически никаких химических процессов не наблюдается, а происходит транспортировка полученного тетрафторида урана до разгрузочного устройства, а также предварительный подогрев фторирующего реагента HF до 150°C. В зону V аппарата подают исходный диоксид урана, заметных химических превращений которого не происходит вследствие практического отсутствия в этой зоне фтороводорода.

В качестве объекта моделирования выбран процесс фторирования диоксида урана безводным фтороводородом в зависимости от условий осуществления процесса. Базовый процесс описывается основной химической реакцией:

$$UO_2 + 4HF \rightleftharpoons UF_4 + 2H_2O + Q$$

Для задач стационарной теплопроводности, неустановившегося температурного режима и расчёта температурных напряжений с помощью программного комплекса ANSYS выполнен тепловой анализ с учётом тепловыделения экзотермической реакции, кинетики, концентрационных характеристик газообразных и твёрдых веществ, образующих данную систему.

1. Тепловой анализ с применением программного комплекса ANSYS

В качестве математической модели принята гидродинамическая модель идеального вытеснения. Основу уравнений математического описания химико-технологического процесса составляют уравнения теплового баланса, записанные с учетом гидродинамических закономерностей движения реагентов.

Для выполнения расчетов и визуализации результатов использовали программный комплекс ANSYS. В данном комплексе реализованы расчетные средства для трех видов теплообмена: кондуктивного, конвективного (свободного и вынужденного) и радиационного. Эти средства используют при проведении стационарного, нестационарного, линейного или нелинейного теплового анализа.

Для конечно-элементного представления системы разрешающее уравнение процесса теплопередачи имеет вид:

$$[C] \cdot \{T'\} + [K] \cdot \{T\} = \{Q\}, \tag{1}$$

где [C] – матрица удельных теплоемкостей; $\{T'\}$ – производная по времени температуры в *i*-ом узле; [K] – матрица эффективной теплопроводности; $\{T\}$ – вектор узловых температур; $\{Q\}$ – вектор эффективного теплового потока в *i*-ом узле.

Стационарный тепловой анализ определяет установившееся распределение температур в конструкции и кондуктивные тепловые потоки. Можно задавать такие "нагрузки", как конвективная теплоотдача с поверхности, тепловые потоки, плотность тепловых потоков, мощность тепловых источников и заданные температуры. Анализ может быть линейным или нелинейным. В линейном установившемся процессе теплопередачи отсутствует влияние тепла от компонентов системы (удельных теплоемкостей) и не учитывается зависимость теплофизических свойств материала от температуры. Производная температуры по времени $\{T'\}$ равна нулю, а коэффициенты матрицы эффективной теплопроводности постоянны. В этом случае разрешающее уравнение (1) сводится к виду:

$[K] \cdot \{T\} = \{Q\}.$

В нелинейном стационарном анализе теплопередачи не рассматривают эффекты, зависящие от времени, вследствие отсутствия теплового обмена между компонентами. Но следует учитывать, что теплофизические свойства веществ системы, например, коэффициент конвективной теплоотдачи с поверхности, могут флуктуировать при изменении температуры процесса. Необходимо также учитывать, что в системе может присутствовать лучистый или радиационный теплообмен.

Механизм радиационного теплообмена описывается различными способами; в нашем случае мы используем матричный генератор, поскольку необходимо решить задачу, относящуюся к нескольким поглощающим и излучающим поверхностям. В этом случае имеется возможность учесть полное или частичное перекрытие поверхностей и задать узел в пространстве, который поглощает или излучает энергию. В общем случае переноса тепла излучением плотность радиационного теплового потока {Q} является функцией T^4 , а не функцией T, т.е. характер процесса явно нелинейный.

В нелинейном анализе матрица теплопроводности является функцией температуры, и решение задачи достигается применением итераций. В комплексе ANSYS итеративная процедура основана на методе Ньютона-Рафсона, который предполагает решение последовательности линейных задач для получения нелинейного приближения. Таким образом, уравнение для нелинейной стационарной задачи теплопроводности имеет вид:

$$[K]_i \cdot \{\Delta T\}_{i+1} = \{Q^A\} - \{Q^{NR}\}_i,$$

где i – номер итерации, $\{Q^A\}$ и $\{Q^{NR}\}_i$ - векторы плотности тепловых потоков.

Результаты решения как для линейного, так и нелинейного анализа представляют собой значения температуры и плотности теплового потока в узлах. Эти данные могут быть использованы при постпроцессорной обработке для построения картины изотерм в расчётной модели. Средства постпроцессора можно использовать для получения такой специфической информации, как значения температурных градиентов или потоков в узлах и в центре элемента, а также плотность теплового потока через поверхности излучения (поглощения).

Численный алгоритм расчёта включает в себя следующие шаги, программная реализация которых осуществлена в программном комплексе ANSYS.

1. Построение расчётной схемы вертикальной части реактора с использованием языка APDL, расчётная схема вертикальной части реактора выполнена согласно [3] и приведена на Рис. 1.

2. Построение неупорядоченного разбиения (free meshing) расчётной схемы вертикальной части реактора гидрофторирования диоксида урана (Рис. 2).



Рис. 2. Неупорядоченное разбиение расчётной схемы вертикальной части реактора гидрофторирования [10]

3. Задание граничных условий: к одной и той же расчётной схеме могут быть заданы разные граничные условия для определения установившегося распределения температуры и кондуктивных тепловых потоков в вертикальной зоне реактора при различных режимах работы нагревателей.

4. Выполнение расчёта: для решения системы линейных алгебраических уравнений, составленной программой-обработчиком исходных данных, был выбран способ сопряжённого градиента, позволяющий значительно сократить время выполнения расчёта при использовании многопроцессорных ЭВМ.

5. Вывод и сохранение результатов расчёта, включающих в себя распределение температуры, тепловых и материальных потоков и их изображение в графическом виде.

Параметры процесса гидрофторирования в аппарате АКТ для расчётной и численной интерпретации математической модели

Принцип численного метода компьютерного моделирования химико-технологического процесса гидрофторирования диоксида урана в аппаратах АКТ описан в работе [4].

Реакция гидрофторирования диоксида урана описывается уравнением:

 $UO_2 + 4HF \rightleftharpoons UF_4 + 2H_2O + 266,5$ кДж/моль (2)

Реакция (2) экзотермичная и обратимая, константа равновесия $K_p = 1$ при температуре 427°С. По мере продвижения газовой фазы по высоте реактора температура постепенно повышается для увеличения скорости процесса гидрофторирования, но не достигает значений, при которых обратная реакция становится превалирующей. Для поддержания целевого процесса заданную электронагревателями температуру по зонам II, III и IV вертикальной части реторты (Рис. 1) принимали равной 350, 400, 450°С соответственно. Необходимо отметить, что заданные величины температуры выбраны с учётом содержания HF в газовой фазе, т.к. выделение тепла за счет химической реакции в нижней части реторты максимальное. Температура фтороводорода, поступающего из горизонтальной части I аппарата АКТ (Рис. 1) в зону II вертикальной части равна 150°С.

Массовые расходы реагентов приняты в интервале: $G_{UO_2} = 750 - 1000 \text{ кг/ч}$ и $G_{HF} = 300 - 340 \text{ кг/ч}$. Для каждого расхода UO_2 , задаваемого с интервалом 50 кг/ч, был выполнен отдельный расчёт энерговыделения экзотермической реакции. Давление фтороводорода на входе в реактор принято $p_{HF} = 0,1 \text{ МПа (1 атм)}.$

Скорость химической реакции определяли по уравнению, выведенному в работе [5]:

$$v = \frac{df}{d\tau} = (8,5 \div 14,5) \cdot (1-f) \cdot S \cdot p_{HF} \cdot e^{-\frac{8050}{RT}}$$
(3)

где v – скорость реакции, мин⁻¹; f – степень превращения UO_2 в UF_4 , τ – время превращения, мин; S – удельная площадь поверхности порошка, м²/г; p_{HF} – парциальное давление, атм; R – универсальная газовая постоянная; T – температура, К. При расчете численный коэффициент уравнения (3) был принят равным 11,5 – среднее значение интервала.

Реакция гидрофторирования осуществляется с уменьшением объёма газов по мере продвижения газового потока по длине реактора снизу-вверх:

$$\Delta V_{\rm гидрофтор} = V_{\rm KOH} - V_{\rm Hav} = 2V_{H_2O} - 4V_{HF} = -2V$$
(4)

Этот фактор можно рассматривать как движущую силу распространения газового потока снизу-вверх. При расчете принимали, что концентрация *HF* на входе во II зону аппарата – 100%, а на выходе из V зоны – 0% и соответственно концентрация H_2O – 0% на входе во II зону и 100% на выходе из V зоны.

В качестве литературных источников необходимых физико-химических величин веществ системы использованы справочники [6, 7].

3. Анализ численных результатов

Расчет распределения температуры в АКТ проведен для II, III, IV и V зон реактора [8].

Результаты расчёта по определению температурного градиента (°С/м) по высоте реактора гидрофторирования с учётом существующей теплоизоляции вертикальной части реактора при разогреве нагревателями до 400°С приведены на Рис. 3.

Основные потери тепла, влияющие на температурные поля в реакционных зонах реактора гидрофторирования, возникают в зонах аппарата, практически незащищённых теплоизоляцией (на Рис. 3 стрелки вне габаритов реактора). Фактически, только собственно нагреватели находятся под защитными кожухами теплоизоляции.

Результат расчета температурного поля вертикальной части реактора гидрофторирования диоксида урана на установке М-2463, с учетом реально существующей теплоизоляции вертикальной части реактора [3], при разогреве двумя секциями нагревателей до 400°С приведён на Рис. 4, а.

Оптимальный для ведения реакции гидрофторирования температурный режим (400 -450°С) по результатам расчета наблюдали только в достаточно узкой части третьей зоны гидрофторатора. При этом возле стенки аппарата температура реакционной массы близка к температуре нагревателя (около 450°С), а по оси аппарата температура существенно ниже и недостаточна для эффективного фторирования диоксида урана.

В реальных условиях эксплуатации АКТ контроль температуры ведут по оси аппарата, полагая, что температура стенки равна задаваемой температурой нагревателей. Однако недостаточный разогрев реакционной массы по оси



Рис. 3. Температурный градиент по высоте аппарата (шкала температурного градиента град/м)



Рис. 4. Определение температурного поля (шкала в °C) вертикальной части реактора гидрофторирования диоксида урана на установке М-2463

а – существующая система обогрева и теплоизоляции;
б – модельная схема с полной теплоизоляцией

аппарата компенсируется увеличением мощности нагрева и возникает опасность перегрева диоксида урана у стенки АКТ и протекания обратной реакции:

$$UF_4 + 2H_2O \rightarrow UO_2 + 4HF$$
.

В четвёртой (верхней) зоне реагирования температура по оси аппарата едва достигает 250°С, а на периферии реактора 450°С, т.е. прогрев реакционной массы в этой зоне весьма неравномерный. Нагревание диоксида урана возле стенки обуславливается близостью нагревателей, а снижение температуры по оси аппарата объясняется, во-первых, поступлением в аппарат практически холодного порошка



Рис. 5. Изменение расчётной температуры по высоте аппарата

диоксида урана, который имеет низкую теплопроводность; во-вторых, исчерпанием фторирующего реагента и, следовательно, недостаточным разогревом реакционной массы за счёт экзотермичности реакции; в-третьих, перераспределением градиентов температуры из-за неплотностей теплоизоляции.

На Рис. 5 видно, что значения температуры по радиусу реактора практически одинаковы лишь в зоне II, но они недостаточны для протекания реакции гидрофторирования. В двух других зонах температурное поле неоднородно, особенно в зоне IV, что будет негативно влиять на качество продукта. Из результатов теплового расчёта реактора гидрофторирования следует, что конструкция теплоизоляции аппарата оказывает влияние на температурные поля внутри аппарата.

Таким образом, первоочередная задача модернизации аппарата гидрофторирования состоит в разработке оптимальной конструкции теплоизолирующего кожуха аппарата. Всё тепло от нагревателей необходимо направлять в реакционные зоны гидрофторатора, также необходимо устранить необогреваемые зоны вертикальной части АКТ. В этом случае нагрев стенок аппарата будет происходить в соответствии с заданными температурными параметрами с повышением температуры по оси реторты (Рис. 4, б).

После достижения результата по оптимальной конструкции нагрева и теплоизоляции реактора можно обсуждать варианты допустимых режимов гидрофторирования оксидов урана. Требует рассмотрения вопрос об увеличении интенсивности перемешивания твердого реагента в вертикальной части АКТ для снижения температурного градиента по радиусу аппарата.

Указанные особенности требуют определенной проработки как в теоретических, так и в экспериментальных исследованиях.

Предложенная схема нагрева реакторного пространства, рассчитанного для загрузки диоксида урана без утечек тепла с полной теплоизоляцией вертикальной части реактора [9], представляет собою усовершенствованную конструкцию аппарата АКТ по [3]. Расчётное температурное поле представлено на Рис. 4, б. Температура в верхней части IV гидрофторатора в этом случае чрезмерно высока. Температура этой части должна быть ниже минимум на 100-150°С для того, чтобы снизить вероятность деактивации и окисления диоксида урана в присутствии большого количества паров воды и дефицита фтороводорода.

Распределение потоков реагирующих веществ в реакторе гидрофторирования

С помощью программного комплекса ANSYS был также выполнен анализ распределения материальных потоков реагентов по габаритам вертикальной части аппарата АКТ.

За нулевую скорость газа принята величина относительной скорости потока газа в присут-

ствии постоянно движущейся ему навстречу твердой фазы. Максимальная скорость газа наблюдается на периферии реакторного пространства (на Рис. 6 узкие темные зоны), что обусловлено пристеночным эффектом.

Практически нулевая скорость НF наблюдается в средней зоне реактора (самые темные области), в которой происходит интенсивное взаимодействие фтороводорода и диоксида урана с исчерпанием основного количества HF, обуславливаемое оптимальными параметрами процесса [8, 10]. В то же время в осевом пространстве реактора скорость газа отлична от нуля, что можно объяснить недостаточным нагревом этой области от нагревателей и, соответственно, меньшей интенсивностью реакции (2).

За счет пристеночного эффекта HF фактически достигает верхней области реактора (зона IV) и одновременно обеспечивает наличие хотя бы небольшого количества фторирующего агента в массе поступающего свежего UO2. Необходимо объяснить темную область в зоне V, обозначающую по результатам моделирования процесса нулевую скорость потока фтороводорода. В этой зоне содержание фтороводорода практически нулевое, во-первых, за счёт полного исчерпания фтороводорода на реакцию с оксидом урана, вовторых, согласно начальным условиям моделирования. Таким образом, отсутствие объекта моделирования (фтороводород) обозначает отсутствие потока этого реагента и, соответственно, его нулевую скорость, что и отражает расчётная программа. В реальности содержание HF в зоне V отлично от нуля вследствие того, что процесс гидрофторирования диоксида урана проводят при избытке фтороводорода, равно 5 - 10 % от стехиометрической необходимости, с целью достижения полноты конверсии диоксида урана в его тетрафторид. Кроме того, так как основная реакция гидрофторирования протекает с двукратным уменьшением объема газовых компонентов (уравнение 4), то по мере уменьшения содержания HF в газе из-за реагирования с UO₂ давление в верхней части реактора снижается, что является движущей силой газового потока к перемещению с целью выравнивания давления по всему объёму системы.

В процессе практического гидрофторирования оксидов урана на установке M-2463 наблю-



Рис. 6. Относительная скорость потока газа в аппарате

дали вынос твёрдых частиц из аппарата. Мы предполагаем, что вынос пылевой фракции обуславливается неравномерностью температурного поля в аппарате, которое приводит к появлению каналов с меньшим гидравлическим сопротивлением встречному потоку и увеличению его скорости, что, в конечном счете, увеличивает диффузионное перемешивание веществ системы, уменьшает размеры гранул, что и обеспечивает появление минимальных по размерам твёрдых частиц и, как следствие, ведет к дополнительному уносу веществ. Путем сравнения вариантов расчёта с различными исходными параметрами можно определить оптимальный вариант совокупных параметров, при котором градиенты скоростей потока будут минимальные, что приведет к уменьшению уноса пылевидной фракции из аппарата [10].

Заключение

Изучено распределение материальных потоков диоксида и тетрафторида урана, фтороводорода и тепловых потоков по вертикальной реторте промышленного аппарата гидрофторирования диоксида урана.

Основные потери тепла, влияющие на температурные поля в реакционных зонах реактора гидрофторирования, возникают в зонах аппарата, практически не защищённых теплоизоляцией. Рассчитаны температуры процесса гидрофторирования по оси аппарата и возле его стенки. Показано, что в средней и выходной зонах температурное поле неоднородно, особенно в зоне IV, что будет негативно влиять на качество продукта. Различие в величинах температуры достигает 100 - 180°С.

Показано, что содержание фтороводорода в потоке газа по сечению реторты аппарата определяется кинетическими параметрами процесса в зависимости от температуры.

Выданы рекомендации по модернизации конструкции аппарата АКТ с целью сокращения тепловых потерь и пылеуноса фторсодержащих соединений

Литература

- Громов Б.В. Введение в химическую технологию урана. – М.: Атомиздат. 1978. 336 с.
- 2. Годовой отчет компании ОАО «Топливная компания «ТВЭЛ». 2011. 46 с.
- Чертеж № АВ 37.004.000-01 СБ. ОАО «СХК», Сублиматный завод, Отдел главного конструктора, 2012.
- Береза В.Н., Дядик В.Ф., Байдали С.А. Математическая модель аппарата комбинированного типа для улавливания ценных компонентов из хвостовых

технологических газов производства гексафторида урана. // Известия Томского политехнического университета. 2007. Т. 311. № 3, с. 55.

- Первов В.С. Исследования гидрофторирования оксидов урана. // Дис. канд. хим. наук: 05.17.02. – М.: ВНИИХТ. 1969.
- Рабинович В.А., Хавин З.Я. Краткий химический справочник, издание 3-е. Л.: «Химия», 1991.
- Binnewies M., Milke E. Thermochemical Data of Elements and Compounds Willey-VCH Verlag GmbH, Weiheim, 2002.
- Михеев П.И., Громов О.Б., Быков А.А. и др. Моделирование ние теплового баланса аппарата комбинированного типа при гидрофторировании диоксида урана. // Материалы Всероссийской научно-практической конференции «Фторидные технологии в атомной промышленности, приуроченной к 105-летию со дня рождения Б.В. Громова – «5-е Громовские чтения» – Томск: Изд. Томского политехнического университета, 2014. сс. 17-18.
- Чертёж № АВ 11686 СБ. ОАО «СХК», Сублиматный завод, Отдел главного конструктора, 2013.
- 10. Михеев П.И., Громов О.Б., Быков А.А. и др. Исследование распределения материальных потоков реагентов по габаритам аппарата типа АКТ при гидрофторировании UO₂. // Материалы Всероссийской научно-практической конференции «Фторидные технологии в атомной промышленности, приуроченной к 105-летию со дня рождения Б.В. Громова «5-е Громовские чтения» Томск: Изд. Томского политехнического университета, 2014. сс. 13-14.

Громов Олег Борисович. Акционерное общество «Высокотехнологический научно-исследовательский институт неорганических материалов имени А.А. Бочвара» Государственной корпорации «Росатом», г. Москва, Россия. Ведущий научный сотрудник, кандидат технических наук. Количество печатных работ: свыше 180. Область научных интересов: химия и технология урана, фтора, сорбция, экология, моделирование химических процессов и аппаратов. E-mail: ollgromov@mail.ru

Быков Андрей Александрович. Федеральное государственное унитарное предприятие Научно-производственное объединение «Техномаш» Государственной корпорации "Роскосмос», г. Москва, Россия. Заместитель начальника отдела, инженер-исследователь. Количество печатных работ: 28. Область научных интересов: химия и технология урана, фторидов редких и обычных металлов, моделирование химических процессов и аппаратов, статистика и экономика ядерного топливного цикла. E-mail: bykovaal@gmail.com

Максимов Евгений Михайлович. Институт проблем управления им. В.А. Трапезникова Российской академии наук, г. Москва, Россия. Старший научный сотрудник, кандидат технических наук. Количество печатных работ: 53, в том числе одна монография. Область научных интересов: управление в промышленных системах, программные среды, микропроцессоры. E-mail: maxfone@yandex.ru

Михеев Петр Иванович. Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана, г. Москва, Россия. Старший преподаватель. Количество печатных работ: свыше 40. Область научных интересов: автоматизация технологических процессов, математическое и компьютерное моделирование технических систем. E-mail: petr_miheev@mail.ru

Травин Сергей Олегович. Институт химической физики имени Н.Н. Семенова Российской академии наук, г. Москва, Россия. Ведущий научный сотрудник, кандидат химических наук, доктор экономических наук, профессор, академик Российской академии естественных наук. Количество печатных работ: свыше 60, в том числе три монографии. Область научных интересов: химическая кинетика, математическое моделирование химико-технологических процессов, распределение Ципфа-Мальденброта. E-mail: travinso@yandex.ru

Ахтямова Мария Львовна. Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана, г. Москва, Россия. Инженер-исследователь. Количество печатных работ: 2. Область научных интересов: техническое обеспечение технологических процессов, математическое и компьютерное моделирование технических систем. E-mail: marya5577@yandex.ru

Галата Андрей Александрович. Акционерное общество «Сибирский химический комбинат им. М.В. Ломоносова». Государственной корпорации «Росатом», г. Северск Томской обл., Россия. Советник генерального директора по научным проектам. Количество печатных работ: свыше 40. Область научных интересов: химия и технология урана и фтора, экология. Е-mail: galata2003@mail.ru

Котов Сергей Алексеевич. Акционерное общество «Сибирский химический комбинат им. М.В. Ломоносова» Государственной корпорации «Росатом», г. Северск Томской обл., Россия. Технический директор комбината. Количество печатных работ: свыше 30. Область научных интересов: химия и технология урана и фтора, экология. Е-mail: SAKotov@rosatom.ru

Рудников Андрей Иванович, Акционерное общество «Сибирский химический комбинат им. М.В. Ломоносова» Государственной корпорации «Росатом», г. Северск Томской обл., Россия. Главный инженер Сублиматного завода, кандидат технических наук. Количество печатных работ: 49. Область научных интересов: фторидные технологии переработки ураносодержащих материалов. E-mail: rudnikov.a.i@yandex.ru

Technological modeling of the process hydrofluorination of uranium oxide

O.B. Gromov¹, A.A. Bykov², E.M. Maximov³, P.I. Mikheev⁴, S.O. Travin⁵, M.L. Akhtiamova⁴, A.A. Galata⁶, S.A. Kotov⁶, A.I. Rudnikov⁶

¹JSC «Bochvar High-technology Scientific Research Institute of Inorganic Materials», Moscow, Russia

²Federal State Unitary Enterprise Science-and-Production Association Technomash, Moscow, Russia,

³Trapeznikov Institute of Management Problems of Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia,

⁴Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russia

⁵Semenov Institute of Chemical Physics of Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia,

⁶JSC «Siberian group of Chemical Industry named after M.V. Lomonosov», Seversk, Tomsk region, Russia

Obtaining UO₂ and UF₄ are important steps in the production UF₆. This paper includes the numerical research of the distribution of material flows of the main reacting substances and heat fluxes by the dimensions of the industrial combined-type apparatus for the hydrofluorination of uranium dioxide (ACT). The main heat losses that affect the temperature fields in the reaction zones of the hydrofluorination reactor occur in the zones of the apparatus that are practically unprotected by thermal insulation. The temperatures of the hydrofluorination process along the axis of the apparatus and near its wall are calculated. It is shown that in the middle and outlet zones the temperature field is not uniform, especially in the final zone IV, which will negatively affect the quality of the product. The difference in temperature values reaches 100-180°C. ANSYS software is used to perform calculations and visualize the results. Recommendations are given on the modernization of the ACT design in order to reduce heat losses. **Keywords**: uranium oxides, uranium tetrafluoride, hydrofluorination, mathematical modeling, optimization of processes and apparatus, kinetics of hydrofluorination.

DOI 10.14357/20718632180210

References

- Gromov, B.V. eds. 1978. Vvedeniye v khimicheskuyu tekhnologiyu urana [Introduction to chemical technology of uranium]. Moscow: Atomizdat. 336 p.
- 2. Godovoy otchet kompanii OAO «Toplivnaya kompaniya «TVEL» [Annual report of JSC Fuel company TVEL]. 2011. 46 p.
- 3. Cherteg № AV 37.004.000-01 SB. Sublimatny zavod. Otdel glavnogo konstruktora eds. 2012 [Drawing No. AV 37.004.000-01 SB. Sublimate plant. Department of the chief designer]. Seversk: JSC "Siberian group of Chemical Industry".
- 4. Bereza, V.N., V.F. Dyadik, and S.A. Baydali. 2007. Matematicheskaya model apparata kombinirovannogo tipa dlya ulavlivaniya tsennykh komponentov iz khvostovykh tekhnologicheskikh gazov proizvodstva geksaftorida urana [Mathematical model of the device of the combined type for catching of valuable components from tail technological gases of production of uranium hexafluoride]. Izvestiya Tomskogo politekhnicheskogo universiteta [News of the Tomsk Polytechnic University], vol. 311. No 3. p. 55.

- Pervov, V.S. 1969. Izuchenie hidroftorirovaniya oksidov urana [Hydrofluoration research of uranium oxides] Kand. Sc. Diss. Moscow. 134 p.
- Rabinovich, V.A., and Z.Ya. Khavin. eds. 1991. Kratkiy khimicheskiy spravochnik. Izd. 3 [Short chemical reference book. Ed. 3]. Leningrad: Chemistry. 324 p.
- 7. Binnewies, M., and E. Milke. eds. 2002. Thermochemical Data of Elements and Compounds. Weiheim: Willey-VCH Verlag GmbH. 598 p.
- 8. Mikheev, P.I., O.B. Gromov, A.A. Bykov et al. 2014. Modelirovaniye teplovogo balansa apparata kombinirovannogo tipa pri gidroftorirovanii dioksida urana [Modeling of thermal balance of the device of the combined type at uranium dioxide hydrofluoration]. Materialy Vserossiyskoy nauchno-prakticheskoy konferentsii «Ftoridnyye tekhnologii v atomnoy promyshlennosti. priurochennoy k 105-letiyu so dnya rozhdeniya B.V. Gromova «5-e Gromovskiye chteniya» [Materialy Vserossiyskoy nauchno-prakticheskoy konferentsii «Ftoridnyye tekhnologii v atomnoy promyshlennosti. priurochennoy k 105-letiyu so dnya rozhdeniya B.V. Gromova «5-e Gromovskiye chteniya» [Materialy Vserossiyskoy nauchno-prakticheskoy konferentsii «Ftoridnyye tekhnologii v atomnoy promyshlennosti. priurochennoy k 105-letiyu so dnya rozhdeniya B.V. Gromova «5-e Gromovskie chteniya» [Materials of the All-Russian scientific and practical conference "Fluoride Technologies in the Atomic Industry" dated for the 105 anniversary since the birth of B.V. Gromov "The fifth Gromovsky readings"]. Tomsk,]. Tomsk, 17-18.
- 9. Cherteg № AV 11686 SB. Sublimatny zavod. Otdel glavnogo konstruktora eds. 2013 [Drawing No. AV 11686 SB. Sublimate plant. Department of the chief designer]. Seversk: JSC "Siberian group of Chemical Industry".
- 10. Mikheev, P.I., O.B. Gromov, A.A. Bykov et al. 2014. Issledovaniye raspredeleniya materialnykh potokov reagentov po gabaritam apparata tipa AKT pri gidroftorirovanii UO₂ [Research of distribution of material streams of reagents on ACT device dimensions at hydrofluoration UO₂]. Materialy Vserossiyskoy nauchno-prakticheskoy konferentsii «Ftoridnyye tekhnologii v atomnoy promyshlennosti. priurochennoy k 105-letiyu so dnya rozhdeniya B.V. Gromova «5-e Gromovskie chteniya» [Materials of the All-Russian scientific and practical conference "Fluoride Technologies in the Atomic Industry" dated for the 105 anniversary since the birth of B.V. Gromov "The fifth Gromovsky readings"]. Tomsk, 13-14.

O.B. Gromov. Dr., JSC «Bochvar High-technology Scientific Research Institute of Inorganic Materials» of State corporation "Rosatom", 123060, 5A Rogova st., Moscow, Russia, e-mail: ollgromov@mail.ru

A.A. Bykov. Research engineer. Federal State Unitary Enterprise Science-and-Production Association Technomash of State corporation "Roskosmos", 127018, 40 3rd Drive of Maryina Roshcha, Moscow, Russia, e-mail: bykovaal@gmail.com

E.M. Maximov. Dr., Trapeznikov Institute of Management Problems of Russian Academy of Sciences, 117997, 65 Profsoyuznaya st., Moscow, Russia, e-mail: maxfone@yandex.ru

P.I. Mikheev. Senior teacher researcher. Bauman Moscow State Technical University, 105005, 5 2nd Baumanskaya st., Moscow, Russia, e-mail: petr_miheev@mail.ru

S.O. Travin. PhD., Semenov Institute of Chemical Physics of Russian Academy of Sciences, 119991, 4 Kosygina st., Moscow, Russia, e-mail: travinso@yandex.ru

M.L. Akhtiamova. Research engineer. Bauman Moscow State Technical University, 105005, 5 2nd Baumanskaya st., Moscow, Russia, e-mail: marya5577@yandex.ru

A.A. Galata. Chief researcher. JSC «Siberian group of Chemical Industry named after M.V. Lomonosov» of State corporation "Rosatom", 636039, 1 Kurchatov st., Seversk, Tomsk region, Russia, e-mail: galata2003@mail.ru

S.A. Kotov. Chief researcher. JSC «Siberian group of Chemical Industry named after M.V. Lomonosov» of State corporation "Rosatom", 636039, 1 Kurchatov st., Seversk, Tomsk region, Russia, e-mail: SAKotov@rosatom.ru

A.I. Rudnikov. Dr., JSC «Siberian group of Chemical Industry named after M.V. Lomonosov» of State corporation "Rosatom", 636039, 1 Kurchatov st., Seversk, Tomsk region, Russia, e-mail: rudnikov.a.i@yandex.ru