

## МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ АППАРАТА УЛАВЛИВАНИЯ ФТОРСОДЕРЖАЩИХ КОМПОНЕНТОВ В ПЫЛЕВЗВЕСИ

С.А. Байдали, В.Ф. Дядик, С.Н. Ливенцов

Томский политехнический университет

E-mail: baidaly@phtd.tpu.ru

Разработана математическая модель аппарата улавливания фторсодержащих компонентов «хвостовых» технологических газов производства  $UF_6$ . Исследовано влияние возмущающих и управляющих воздействий на распределение температуры в ретортах аппарата. Доказана возможность стабилизации температурного режима обеих реторт посредством изменения расхода загружаемого в них твердого сырья. Предложена структура системы управления аппаратом.

### Ключевые слова:

Производство гексафторида урана, математическая модель, диффузионная модель, система автоматического управления.

### Введение

Сублиматное производство  $UF_6$  из  $UF_4$  и оксидов урана является сложным объектом автоматизации с дорогостоящим целевым продуктом и рядом особенностей, обусловленных быстротой протекания физико-химических процессов и агрессивностью технологических сред [1].

Одним из функциональных узлов производства  $UF_6$  является аппарат улавливания  $F_2$ ,  $HF$  и  $UF_6$  из «хвостовых» технологических газов после стадии десублимации, рис. 1. На Ангарском электролизном химическом комбинате действуют аппараты улавливания в пылевзвеси (УП) как на оксидах урана, так и на  $UF_4$ . В данной работе рассматривается улавливание на оксидах урана.

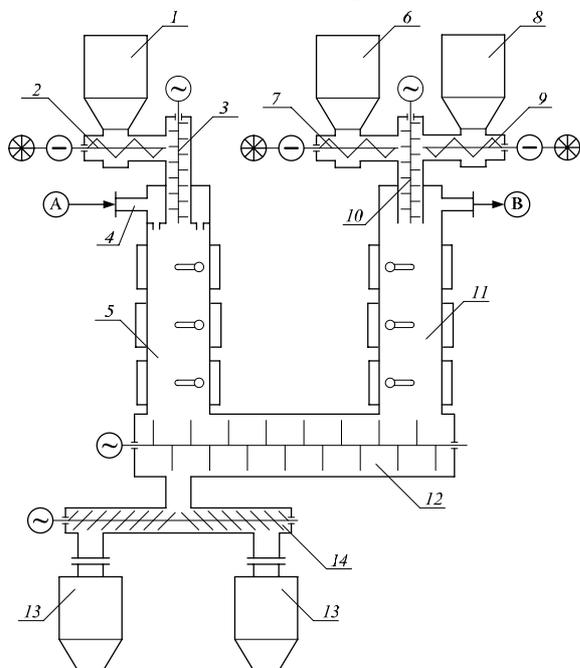


Рис. 1. Схема аппарата УП: А) вход технологического газа; В) выход газа (в систему газочистки); 1, 6, 8) бункеры; 2, 7, 9) шнеки загрузки; 3) распылитель; 4) патрубок ввода газа; 5) прямоточная реторта; 10) распылитель; 11) противоточная реторта; 12) горизонтальный аппарат с мешалкой; 13) контейнер; 14) узел выгрузки

Принцип работы аппарата УП следующий. Газ, содержащий улавливаемые компоненты, через входной патрубок – 4 газораспределительной головки поступает в прямоточную реторту. Сюда же из бункера – 1 шнековым питателем – 2 через распылитель – 3 подаются продукты улавливания. В этой реторте происходит улавливание основного количества фтора. В противоточной реторте на чистых оксидах урана улавливаются остаточное количество  $F_2$ , а также  $UF_6$  и  $HF$ . Периодически через бункер – 8 противоточной реторты к исходному твердому сырью добавляют различные твердые урансодержащие продукты, например, пыль из фильтров и другие. Твердые продукты улавливания, образующиеся в прямоточной и противоточной ретортах аппарата, смешиваются мешалкой в нижнем горизонтальном аппарате – 14 и шнеком выгружаются в один из контейнеров – 13.

При переработке оксидов урана в противоточную реторту подаются чистые оксиды урана, а в прямоточную – продукты улавливания, выгружаемые из этого же аппарата.

### Постановка задачи

В настоящее время на Ангарском электролизном химическом комбинате происходит модернизация действующей АСУ ТП производства гексафторида урана, в состав которой включена и подсистема улавливания с целью реализации автоматизированного управления процессом улавливания. В связи с этим ставятся следующие задачи:

1. Синтез высокоэффективного адаптивного алгоритма управления аппаратом улавливания, позволяющего достигнуть максимальных степеней улавливания при условиях:
  - минимизации возмущающих воздействий на реактор фторирования и, соответственно, на весь цикл производства;
  - поддержания температурного режима в ретортах УП, препятствующего спеканию и возникновению наростов твердого продукта (в основном  $UO_2F_2$ ).

2. Исследование возможности увеличения степени улавливания  $UF_6$  с целью уменьшения количества ступеней десублимации.

Для достижения поставленных задач необходимо провести анализ физико-химических основ процесса улавливания, создать математическую модель аппарата УП и исследовать созданную модель. Решение сформулированных задач позволит снизить себестоимость конечного продукта –  $UF_6$ , а также увеличить безопасность производства за счет максимального снижения участия человека в технологическом процессе.

В данной работе ставится задача создания математической модели аппарата УП и ее исследования с целью определения оптимальных технологических режимов работы аппарата и выбора структуры системы автоматического управления.

### Синтез математической модели аппарата улавливания

Математическое моделирование химического реактора связано с решением пяти крупных задач [2, 3]:

1. Анализ системы с целью выделения составляющих частей процесса, не зависящих от масштаба.
2. Изучение выделенных составляющих.
3. Синтез полученных закономерностей в виде математического описания.
4. Расчет коэффициентов системы уравнений.
5. Анализ полученной модели с целью предсказания характера протекания процесса в аппарате любого масштаба.

Структурная схема УП как технологического объекта управления представлена на рис. 2.

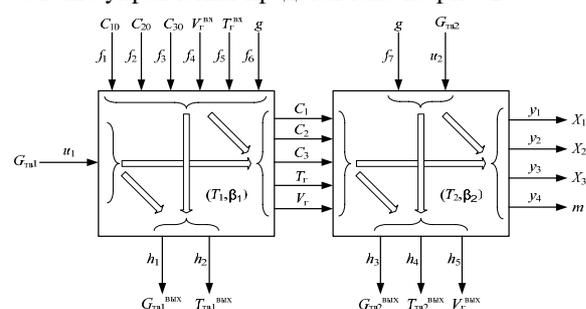


Рис. 2. Структурная схема УП как объекта управления

Переменные процесса как объекта управления включают [4, 5]:

1. Входные управляющие величины ( $u_1, u_2$ ) – скорости вращения шнеков питателей, подающего твердое сырье из бункеров, определяющих расходы (загрузку) твердого сырья в реторты аппарата ( $G_{r1}, G_{r2}$ ).
2. Входные возмущающие величины ( $f_i$ ) – изменения концентраций компонентов технологического газа ( $C_{10}, C_{20}, C_{30}$ ), поступающих на улавливание, изменение расхода технологического газа ( $V_r^{bк}$ ) и его температуры ( $T_r^{bк}$ ), гранулометрический состав твердого сырья ( $g$ ).

3. Выходные управляемые переменные ( $y_i$ ) – содержание ионов фтора в твердом полупродукте ( $m$ ), степени улавливания  $HF, F_2$  и  $UF_6$  ( $X_1, X_2, X_3$ ).

4. Выходные неуправляемые переменные ( $h_i$ ) – расходы полупродуктов на выходе из реторт ( $G_{r1}^{bк}, G_{r2}^{bк}$ ) и их температуры ( $T_{r1}^{bк}, T_{r2}^{bк}$ ), расход технологического газа на выходе из аппарата ( $V_r^{bк}$ ).

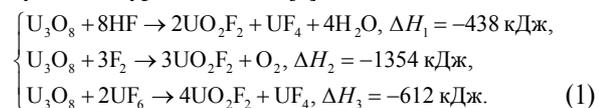
5. Промежуточные величины (переменные состояния) – степень заполнения реакционного пространства реторты твердой фазой ( $\beta_1, \beta_2$ ), температура в реакционном объеме ( $T_1, T_2$ ), её непрерывное распределение или значение в нескольких характерных точках.

Таким образом, для учета пространственных и временных факторов необходимо построение в общем случае динамической модели с распределенными параметрами.

В технологическом процессе улавливания можно выделить следующие составляющие процесса и соответствующие им математические характеристики:

1. Интенсивность переноса вещества и тепла в реакционном пространстве определяются гидродинамикой процесса и зависят от коэффициентов теплопроводности и диффузии [6].
2. Тепловыделение во время химических реакций определяется термодинамикой процесса и характеризуется значениями тепловых эффектов всех независимых реакций.
3. Скорости протекания химических реакций определяются химической кинетикой процесса и характеризуются величинами скоростей химических реакций.
4. Перенос вещества и тепла между поверхностью твердой частицы и потоком газа определяются гидродинамикой процесса и характеризуется коэффициентом межфазного теплообмена.

Химические реакции процесса улавливания при переработке оксидов урана описываются следующими уравнениями [1]:



В результате исследования указанных составляющих было выяснено:

1. Гидродинамический режим взаимодействия потоков газа и твердых частиц оказывает существенное влияние на процесс улавливания. Для диаметра твердых частиц менее 50 мкм как в прямоточной, так и в противоточной ретортах определяющим фактором является скорость газа (которая зависит в первую очередь от расхода газа и температуры), так как именно она определяет время пребывания частиц в реакционном пространстве, а, следовательно, и степень улавливания ценных компонентов. В противоточной реторте эти частицы, если рассматривать их

движение как движение отдельных фракций, будут находиться в области уноса, т. к. скорости их осаждения ниже скоростей газа. Однако, на самом деле, из-за наличия более крупных частиц организуется пакетный характер движения, и скорость осаждения полидисперсного потока значительно увеличивается. Последнее обстоятельство учитывается при расчете эквивалентного диаметра твердых частиц.

- Исследование термодинамики химических реакций (1) позволило выяснить, что указанные реакции протекают со значительным выделением тепла, что и объясняет высокие температуры сопровождающие процесс улавливания, которые при отсутствии охлаждения будут превышать допустимые и способствовать ухудшению процесса. В прямоточной реторте температуры не должны превышать 773...923 К (иначе будет происходить спекание полупродуктов), в противоточной – 573...673 К. Ограничение температуры противоточной реторты прежде всего связано с тем, что более высокие температуры значительно ухудшают процесс улавливания HF, улавливаемого в основном в противоточной реторте. Эти данные были определены на основе полученных констант химического равновесия и рассчитанных по ним равновесных парциальных давлений во время наступления химического равновесия.
- Исследование химической кинетики процесса позволило выяснить количественную зависимость скорости реакции, а значит и степени улавливания, от температуры реакционного пространства и концентрации ценных компонентов в исходной газовой смеси.
- Для объективного выбора типа математического описания было проведено исследование гидродинамического режима взаимодействия твердых частиц и газа. Для этого было рассчитано время межкомпонентного выравнивания температур [6]:

$$t_{\text{мк}} = \frac{1}{6} \frac{\text{Pr}_{\text{мк}} \cdot c_{\text{тв}} \cdot \rho_{\text{тв}} \cdot d_{\text{тв}}^2}{\text{Nu}_{\text{т}} \cdot c_{\text{г}} \cdot \mu_{\text{г}}}, \quad (2)$$

где  $\text{Pr}_{\text{мк}}$  – число Прандтля, характеризует физические свойства теплоносителя;  $\text{Nu}_{\text{т}}$  – число Нуссельта, характеризует интенсивность теплообмена между теплоносителями (газом и частицами твердого);  $c_{\text{тв}}$ ,  $c_{\text{г}}$  – теплоемкости твердого сырья и газа, Дж/(кг·К);  $\rho_{\text{тв}}$  – плотность твердых частиц, кг/м<sup>3</sup>;  $\mu_{\text{г}}$  – динамическая вязкость газа, кг/(м·с);  $d_{\text{тв}}$  – эквивалентный диаметр твердых частиц, м.

В ур. (2) входят критерии подобия тепловых процессов, которые зависят от физических свойств теплоносителей и их скоростей. Последние, в свою очередь, зависят от температуры, следовательно, и время межкомпонентного выравнивания является функцией температуры. Эта зависимость представлена на рис. 3.

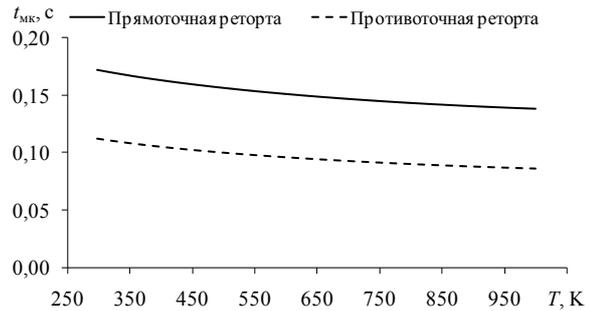


Рис. 3. Зависимость времени межкомпонентного выравнивания температур от температуры в ретортах аппарата

Время пребывания твердых частиц эквивалентного диаметра в прямоточной реторте составило 14,16 с, в противоточной – 18,68 с. Время пребывания газа в ретортах аппарат составило соответственно 65,12 и 24,95 с. Из приведенных данных и графика на рис. 3, видно, что время пребывания газа и твердых частиц в ретортах на два порядка превышают время межкомпонентного выравнивания температур, что свидетельствует о почти мгновенном времени наступления теплового равновесия между твердой и газообразной фазами. Технологический процесс улавливания характеризуется малым значением степени заполнения реакционного объема реторт твердыми частицами и их мелкодисперсностью. На основании этого рассматриваемую систему можно представить квазигомогенной средой с эффективными коэффициентами диффузии и теплопроводности. Тогда аппарат улавливания можно описать однопараметрической диффузионной моделью, представляя процесс по радиусу моделью идеального смешения [3, 4].

Основываясь на типе выбранной модели, составлена система уравнений материального и теплового балансов [4]:

$$\begin{cases} \varepsilon \frac{\partial X_i}{\partial l} = D_{\text{эфф}} \frac{\partial^2 X_i}{\partial l^2} - u_{\text{г}} \frac{\partial X_i}{\partial l} + W_i, & (i = 1, 2, 3), \\ c \rho_{\text{сис}} \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda_{\text{эфф}} \frac{\partial^2 T}{\partial l^2} - \frac{\partial(qT)}{\partial l} + \sum_{i=1}^3 \Delta H_i W_i C_i, \\ q = \varepsilon c_{\text{г}} \rho_{\text{г}} u_{\text{г}} + \beta c_{\text{тв}} \rho_{\text{тв}} u_{\text{тв}}, \\ u_{\text{г}} = u_{\text{г}}^0 \frac{T}{T_0} \frac{\sum_{i=1}^5 C_i \rho_i}{\sum_{i=1}^5 C_{i0} \rho_{i0}}. \end{cases} \quad (3)$$

Граничные условия:

$$l = 0: u_{\text{г}} (X_i - X_{i0}) = D_{\text{эфф}} \left. \frac{\partial X_i}{\partial l} \right|_{l=0}, \quad q(T - T_0) = \lambda_{\text{эфф}} \left. \frac{\partial T}{\partial l} \right|_{l=0}.$$

$$l = L: \left. \frac{\partial X_i}{\partial l} \right|_{l=L} = 0, \quad \left. \frac{\partial T}{\partial l} \right|_{l=L} = 0.$$

Начальные условия:  $t=0: X_i=X_i^0; T=T^0$ .

Описание переменных, входящих в систему уравнений:  $u_{\text{г}}$ ,  $u_{\text{тв}}$  – скорости газа на входе в ретор-

ту и осаждения твердых частиц, м/с;  $X_i$  – степень превращения  $i$ -го компонента;  $W_i$  – наблюдаемая скорость  $i$ -ой реакции,  $\text{с}^{-1}$ ;  $T$  – температура дисперсной системы, К;  $\varepsilon$  – доля свободного объема в реторте;  $D_{\text{эфф}}$  – эффективный коэффициент диффузии,  $\text{м}^2/\text{с}$ ;  $\lambda_{\text{эфф}}$  – эффективный коэффициент теплопроводности,  $\text{Вт}/(\text{м}\cdot\text{К})$ ;  $c\rho_{\text{сис}}$  – объемная теплоемкость дисперсной системы,  $\text{Дж}/(\text{м}^3\cdot\text{К})$ ;  $\Delta H_i$  – тепловой эффект  $i$ -ой реакции,  $\text{Дж}/(\text{м}^3\cdot\text{об. \%})$ ;  $C_i$ ,  $C_0$  – концентрации и концентрации на входе в реторту компонентов газа, соответственно HF,  $\text{F}_2$ ,  $\text{UF}_6$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{N}_2$ , об. %;  $\rho_i$ ,  $\rho_0$  – плотности и плотности на входе в реторту компонентов газа, соответственно HF,  $\text{F}_2$ ,  $\text{UF}_6$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{N}_2$ ,  $\text{кг}/\text{м}^3$ ;  $\rho_r$  – плотность газа,  $\text{кг}/\text{м}^3$ ;  $M_i$  – молярные массы компонентов газа, соответственно HF,  $\text{F}_2$ ,  $\text{UF}_6$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{N}_2$ ,  $\text{кг}/\text{моль}$ ;  $L$  – высота реторты, м;  $\beta$  – степень заполнения реторты твердой фазой;  $X_{i0}$  – граничные значения степени улавливания  $i$ -го компонента;  $X_i^0$ ,  $T^0$  – начальные значения степени улавливания  $i$ -го компонента и температуры дисперсной системы.

В уравнении материального баланса отражена зависимость скорости изменения степени улавливания  $i$ -го компонента, учитывающая диффузионный перенос вещества, перенос вещества с потоком и скорость химической реакции.

В уравнении теплового баланса отражена зависимость скорости изменения температуры, учитывающая перенос тепла теплопроводностью, перенос тепла с потоком и тепловой эффект реакций.

Решение системы (3) аналитическими методами значительно затруднено, поэтому для ее решения был применен численный метод конечных разностей. Метод конечных разностей, широко используется для решения уравнений математической физики, в том числе параболических уравнений, которыми являются уравнения системы (3). Согласно этому методу переменные в области изменения координат «пространство-время» аппроксимируются дискретными значениями через шаги  $h$  и  $\tau$ . По результатам аппроксимации производных по времени и пространственной координате были получены системы конечно-разностных уравнений. Последние были решены методом прогонки. Для применения этого метода системы конечно-разностных уравнений были преобразованы к виду трехдиагональных матриц, для которых были рассчитаны прогоночные коэффициенты и уже по ним определялись неизвестные [7].

Программная реализация модели была выполнена в пакете MATLAB, имеющим существенное преимущество перед другими программными средствами символьной математики ввиду его ориентации на матричные вычисления и интеграцию с MS Excel.

#### Исследование математической модели

Для средних значений управляющих и возмущающих воздействий были рассчитаны распределения степеней улавливания по высоте обеих ре-

торт, представленные на рис. 4. В прямоточной реторте происходит полное улавливание  $\text{F}_2$ , а HF и  $\text{UF}_6$  только на 17,4 и 27,9 % соответственно. На выходе противоточной реторты, то есть выходе аппарата, наряду со  $\text{F}_2$ , полностью улавливается и  $\text{UF}_6$ , HF улавливается на 87,7 %.

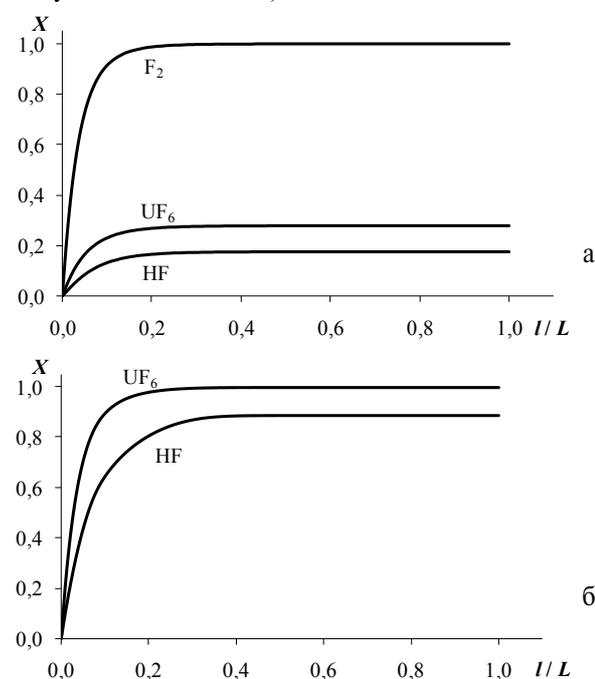


Рис. 4. Распределение степеней улавливания HF,  $\text{F}_2$  и  $\text{UF}_6$  по высоте реторты: а) прямоточной; б) противоточной

Температура является определяющим фактором протекания процесса улавливания. Поддержание её на необходимом уровне позволит добиться максимального улавливания компонентов и избежать образования спеков на стенках реторт. На распределение температуры оказывают влияние как возмущающие, так и управляющие воздействия. Возмущающие воздействия могут изменяться в значительной мере, особенно концентрация фтора и расход технологического газа. Для оценки их влияния на распределение температуры в ретортах аппарата было смоделировано изменение указанных воздействий в диапазоне  $\pm 20\%$  от среднего. Графики результатов моделирования изменения температуры на высотах реторт, соответствующих максимальному значению температуры, представлены на рис. 5, 6.

При увеличении расхода технологического газа температура в прямоточной реторте падает за счет увеличения уноса тепла (вследствие возрастания скорости твердых частиц) и, соответственно, растет в противоточной из-за уменьшения скорости твердых частиц.

Помимо возмущающих воздействий на температуру оказывает существенное влияние расход твердого сырья, который является управляющим воздействием. На рис. 7 приведены зависимости влияния расхода твердого сырья на температуру в ретортах аппарата.

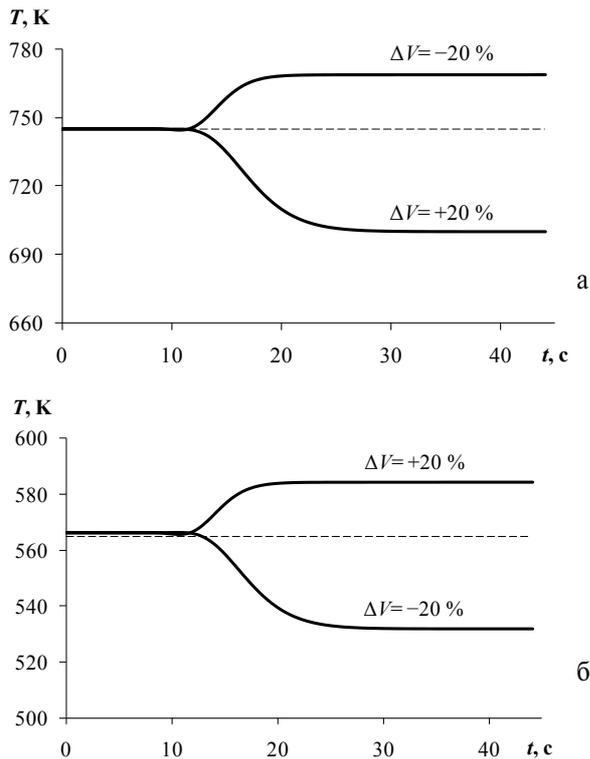


Рис. 5. Зависимость температуры в реторте при изменении расхода газа на  $\pm 20\%$  от номинального: а) прямой; б) противоточной

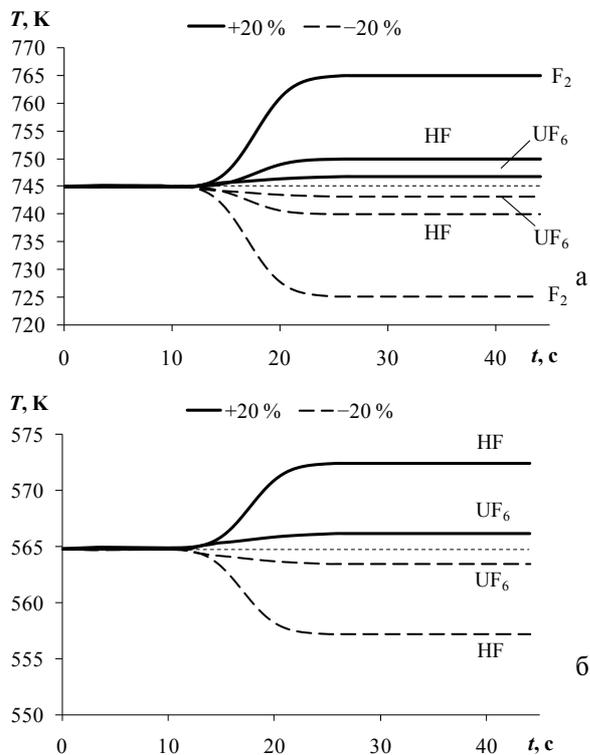


Рис. 6. Зависимость температуры в реторте при изменении концентрации HF,  $F_2$  и  $UF_6$  на  $\pm 20\%$  от номинального: а) прямой; б) противоточной

Анализ графиков на рис. 5–7 показал следующее. Реакцию объекта по температуре на изменение

ценных компонентов технологического газа можно описать типовым динамическим звеном – апериодическим звеном второго порядка. Реакция объекта по температуре на изменение расхода технологического газа и расхода твердого сырья показывает, что в исследуемом диапазоне входных воздействий объект является нелинейным. Из возмущающих воздействий наибольшее влияние на температуру в прямой реторте (рис. 5, а, и рис. 6, а) оказывают расход технологического газа и концентрация  $F_2$  в нем. На температуру в противоточной реторте также оказывает наибольшее влияние расход газа и в меньшей степени концентрация HF (рис. 5, б, и рис. 6, б). Из графиков на рис. 7 следует, что расход твердого сырья в полной мере может использоваться в качестве управляющего воздействия, так как может компенсировать изменение температуры вызванное возмущающими воздействиями.

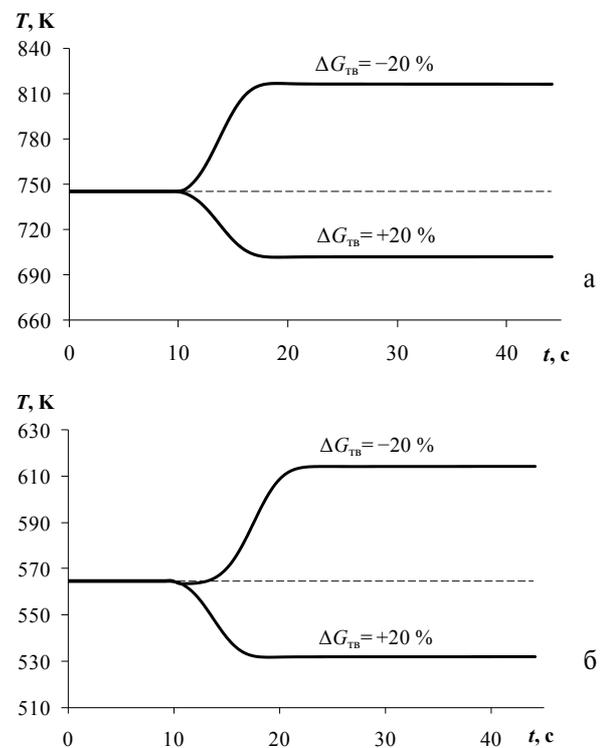


Рис. 7. Зависимость температуры в реторте при изменении расхода твердого сырья на  $\pm 20\%$  от номинального: а) прямой; б) противоточной

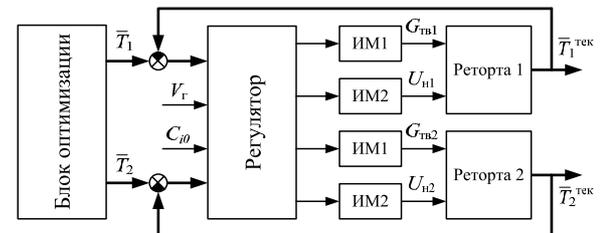


Рис. 8. Структурная схема системы управления аппаратом улавливания: ИМ1, ИМ2 – исполнительные механизмы;  $\bar{T}_1$ ,  $\bar{T}_2$  и  $\bar{T}_1^{тек}$ ,  $\bar{T}_2^{тек}$  – оптимальные и текущие температуры в характерных точках первой и второй реторт;  $U_{i1}$ ,  $U_{i2}$  – напряжения, подаваемое на ТЭНы

Исходя из результатов моделирования и реальных возможностей контроля технологических переменных, следует, что система управления аппаратом УП должна строиться по принципу комбинированного управления, рис. 8.

Комбинированное управление аппаратом улавливания заключается в компенсации основных возмущений – нестабильности расхода технологического газа, а также вариаций концентраций фторсодержащих компонентов на входе в прямую реторту. Стабилизация температурного режима реторт осуществляется путем изменения расходов твердого сырья в каждую из реторт и оптимизации теплосъема с их стенок.

#### Выводы

1. Разработана математическая модель аппарата улавливания фторсодержащих компонентов

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Тураев Н.С., Жерин И.И. Химия и технология урана. – М.: Издательский дом «Руда и металлы», 2006. – 396 с.
2. Касаткин А.Г. Основные процессы и аппараты химической технологии. – 10-е изд., стереотипное, доработанное. – М.: ООО ТИД «Альянс», 2004. – 753 с.
3. Кафаров В.В., Глебов М.Б. Математическое моделирование основных процессов химических производств. – М.: Высшая школа, 1991. – 400 с.
4. Методы моделирования каталитических процессов на аналоговых и цифровых вычислительных машинах / Под ред. А. Ермаковой. – Новосибирск: Наука, 1972. – 150 с.

«хвостовых» технологических газов производства  $UF_6$ , учитывающая термодинамические и гидродинамические режимы, а также кинетику процесса.

2. Предложена структура автоматизированной системы управления аппаратом улавливания, включающей блок оптимизации температурных режимов в ретортах.
3. Исследовано влияние возмущающих и управляющих воздействий на распределение температуры в ретортах аппарата.
4. Доказана возможность стабилизации температурного режима обеих реторт посредством изменения расхода загружаемого в них твердого сырья.
5. На основе математической модели планируется создать алгоритм управления аппаратом улавливания.
5. Дорф Р. Современные системы управления. – М.: Лаборатория Базовых Знаний, 2004. – 832 с.
6. Аэров М.Э., Тодес О.М. Гидравлические и тепловые основы работы аппаратов со стационарным и кипящим зернистым слоем. – Л.: Химия, 1968. – 510 с.
7. Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М. Численные методы. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2007. – 636 с.

*Поступила 29.09.2008 г.*