

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ РАЗДЕЛЕНИЯ ИЗОТОПОВ В ЭЛЕКТРОИОНИТНЫХ И ОБМЕННЫХ СИСТЕМАХ

Беляков Д.М., Кабак В.Ю., Вергун А.П.

Научный руководитель Вергун А.П., д.ф.м.н., профессор
Россия, г.Томск, пр.Ленина30.

Мембранные, электроионитные и обменные процессы являются перспективными в плане разработки новых технологий разделения изотопов и тонкой очистки веществ.

Предложен способ разделения изотопных и ионных смесей, основанный на совмещении обменных и электрохроматографических процессов в условиях применения ионообменных материалов. Для моделирования, определения оптимальных условий разделения изотопов различных элементов при изотопном обмене и электрохроматографии использовались методы планирования экстремальных экспериментов.

Использование методов планирования позволяет сократить объем экспериментальной работы, что существенно в связи с большой продолжительностью опытов по разделению изотопических ионов.

При разделении изотопов с применением ионитов в качестве функции отклика использовалась относительная концентрация выделяемого изотопа в продукте (y_1) и относительный выход целевого компонента.

Факторами являются следующие величины: концентрация раствора в разделительной установке, скорости противотока в растворе и ионите, напряженность электрического поля.

Для первого параметра оптимизации получены значения коэффициентов уравнения регрессии:

$$b_0=0,56; b_1=0,01; b_2=0,14; b_3=0,05; b_4=-0,04;$$

Значения коэффициентов уравнения регрессии применительно ко второму параметру оптимизации следующие:

$$b_0=0,36; b_1=0,05; b_2=-0,09; b_3=-0,03; b_4=0,08;$$

При проверке полученных уравнений на адекватность по критерию Фишера установлено, что математические модели адекватно описывают разделительный процесс.

Математическое моделирование разделительных процессов методами планирования экстремальных экспериментов предусматривает использование различных критериев оптимизации. При этом существенным является требование равномерности изменения критерия и постоянство дисперсии. Например, изменение обогащения на 5% не равнозначно в интервале изотопных концентраций (50-55)% и (90-95)%. С увеличением обогащения процент прироста достигается с большими затратами.

С точки зрения адекватного описания процессов изотопного разделения целесообразно использовать обобщенные критерии оптимизации.

При разработке обобщенных критериев учитывается тот факт, что с повышением обогащения продукта его себестоимость и ценность увеличиваются не пропорционально приращению относительной концентрации, а по более сложной зависимости.

Вследствие этого величина, характеризующая содержание извлекаемого компонента в продукте входит в обобщенные критерии в виде степенной или логарифмической зависимости.

Остановимся на наиболее простом обобщенном критерии – критерии Мажумдара

$$G = \frac{H\mu^2}{\mu_0^2}$$

где μ - относительная концентрация выделяемого изотопа;

H – относительный выход продукта

Для случая изотопного разделения при электрохроматографии в условиях движения фаз ионита и раствора получены следующие значения коэффициентов уравнения регрессии:

$$b_0=10,36; b_1=1,36; b_2=2,21; b_3=0,76; b_4=0,56;$$

В качестве параметра оптимизации использовался критерий Мажумдара, а факторами являлись концентрация рабочего раствора, скорости движения фаз и напряженность электрического поля.

При компьютерном моделировании рассматриваемого процесса разработаны программы, позволяющие рассчитывать величины ВЭТТ процессов разделения, оценивать размеры электродиализного аппарата для обращения потоков фаз, определять требуемую скорость противотока в устройстве, рассчитывать распределение концентраций в аппаратах.

Компьютерные программы позволяют анализировать работу установок в стационарных и нестационарных условиях.

В случае каскадирования установок предложенные программы позволяют рассчитывать распределение потоков и концентраций выделяемого изотопа по ступеням.