

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ
ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования

**«Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»
(НИЯУ МИФИ)**

Методические...

Оглавление

	Стр.
Введение	4
0.1 Востребованность изотопных смесей (бинарных и многокомпонентных) в различных областях науки и техники (примеры).	4
0.2 Принципы каскадирования одиночных разделительных элементов. Роль теории каскадов для разделения изотопных смесей при изучении физических закономерностей массопереноса компонентов в подобных установках.	4
0.3 Понятие и роль модельных каскадов в общей теории.	4
Глава 1. Общие уравнения симметрично-противоточного каскада	5
1.1 Понятие разделительного элемента, ступени, каскада.	5
1.1.1 Понятие разделительного элемента	5
1.1.2 Понятие разделительной ступени	5
1.1.3 Понятие каскада	8
1.2 Получение уравнений симметрично-противоточного каскада для случая произвольного числа компонентов и произвольных коэффициентов разделения.	9
Глава 2. Модельные каскады для разделения бинарных смесей.	13
2.1 «Идеальный» каскад	14
2.1.1 «Идеальный» каскад для разделения бинарных смесей как частный случай симметрично-противоточного каскада с постоянными коэффициентами разделения.	14
2.1.2 «Идеальный» каскад в случае «слабого обогащения» и немалых обогащений на ступенях.	14
2.1.3 Сопоставление «идеального» и оптимального каскадов для разделения бинарных смесей.	14
2.2 Алгоритм расчета параметров «идеального» каскада для различных исходных условий. Примеры расчетов.	14
2.3 Задания для самостоятельного выполнения.	14

Глава 3. Модельные каскады для разделения	
 многокомпонентных смесей.	15
3.1 Частные случаи симметрично-противоточного каскада для разделения многокомпонентных изотопных смесей.	15
3.2 «Квазиидеальный» каскад и Q-каскад, их физическая взаимосвязь.	15
3.3 R-каскад и его использование при оптимизации параметров каскадов для разделения многокомпонентных изотопных смесей.	17
3.4 Алгоритмы расчета параметров ординарных «квазиидеального» каскада и Q-каскада при различных заданных параметрах. Примеры расчетов.	21
3.5 Задания для самостоятельного выполнения.	21
Список сокращений и условных обозначений	22
Список литературы	24

Введение

0.1 Востребованность изотопных смесей (бинарных и многокомпонентных) в различных областях науки и техники (примеры).

Востребованность изотопных смесей (бинарных и многокомпонентных) в различных областях науки и техники (примеры).

0.2 Принципы каскадирования одиночных разделительных элементов. Роль теории каскадов для разделения изотопных смесей при изучении физических закономерностей массопереноса компонентов в подобных установках.

Принципы каскадирования одиночных разделительных элементов. Роль теории каскадов для разделения изотопных смесей при изучении физических закономерностей массопереноса компонентов в подобных установках.

0.3 Понятие и роль модельных каскадов в общей теории.

Понятие и роль модельных каскадов в общей теории.

Глава 1. Общие уравнения симметрично-противоточного каскада

1.1 Понятие разделительного элемента, ступени, каскада.

1.1.1 Понятие разделительного элемента

Газовая центрифуга

1.1.2 Понятие разделительной ступени

Ниже рассмотрены общие характеристики разделительных ступеней, предназначенных для разделения многокомпонентных изотопных смесей в газовой фазе. В качестве разделяемой изотопной смеси рассмотрена изотопная смесь, содержащая m химически не реагирующих между собой компонентов, содержание которых будем определять их мольными долями (концентрациями) C_i ($i = 1, 2, \dots, m$) [1]. Компоненты пронумерованы в порядке возрастания массовых чисел. Для концентраций компонентов разделяемой смеси справедливо очевидное тождество:

$$\sum_{j=1}^m C_j = 1 \quad (1.1)$$

Как правило, вместо концентраций C_i , используют относительные концентрации, определяемые по отношению к концентрации так называемого «опорного» компонента с фиксированным номером, например, k , то есть

$$R_{ik} = \frac{C_i}{C_k}, i = 1, 2, \dots, m. \quad (1.2)$$

В качестве «опорного» может быть выбран любой из компонентов смеси, всего имеется таких наборов. Простая разделительная ступень имеет один входной поток и два выходных (рис. 1.1). На вход ступени поступает поток питания (производительность ступени) L (в моль/с) с концентрациями C_i ($i = 1, 2, \dots, m$).

Из ступени выходят два потока: легкая фракция (поток, обогащенный легкими компонентами) или отбор ступени L' и тяжелая фракция (поток, обедненный легкими компонентами) или отвал ступени L'' . Концентрации компонентов в этих потоках C'_i и C''_i соответственно.

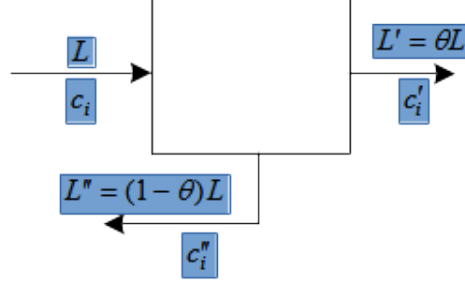


Рисунок 1.1 — Схема разделительной ступени

Коэффициент деления потоков смеси (срез) θ , парциальные потоки компонентов G_i , G'_i , G''_i и срезы парциальных потоков φ_i можно определить по формулам:

$$\theta = \frac{L'}{L}, G_i = LC_i, G'_i = L'C'_i, G''_i = L''C''_i, \quad (1.3)$$

$$\varphi_i = \frac{G'_i}{G_i}, 1 - \varphi_i = \frac{G''_i}{G_i}, i = 1, 2, \dots, m. \quad (1.4)$$

Уравнения баланса ступени в стационарном режиме работы и в отсутствие потерь рабочего вещества имеют вид:

$$L = L' + L'', \quad (1.5)$$

$$G_i = G'_i + G''_i, i = 1, 2, \dots, m. \quad (1.6)$$

Введенное в 1.3 определение среза потоков ступени дает возможность представить уравнения 1.6 в следующем виде:

$$C_i = \theta C'_i + (1 - \theta) C''_i. \quad (1.7)$$

Из 1.5 и 1.6 непосредственно следует:

$$L = \sum_{j=1}^m G_j, L' = \sum_{j=1}^m G'_j, L'' = \sum_{j=1}^m G''_j, \quad (1.8)$$

$$C_i = \frac{G_i}{\sum_{j=1}^m G_j}, C'_i = \frac{G'_i}{\sum_{j=1}^m G'_j}, C''_i = \frac{G''_i}{\sum_{j=1}^m G''_j}, i = 1, 2, \dots, m, \quad (1.9)$$

$$\theta = \frac{\sum_{j=1}^m G'_j}{\sum_{j=1}^m G_j}. \quad (1.10)$$

Для каждого компонента i с относительной концентрацией R_{ik} вводят относительные коэффициенты разделения: полный q_{ik} , в отборе α_{ik} и в отвале β_{ik} и соответствующие коэффициенты обогащения $\varepsilon_{ik}, \varepsilon'_{ik}, \varepsilon''_{ik}$

$$\begin{aligned} q_{ik} &= \frac{R'_{ik}}{R''_{ik}}, \quad \alpha_{ik} = \frac{R'_{ik}}{R_{ik}}, \quad \beta_{ik} = \frac{R_{ik}}{R''_{ik}}, \\ q_{ik} &= \frac{R'_{ik}}{R''_{ik}}, \quad \alpha_{ik} = \frac{R'_{ik}}{R_{ik}}, \quad \beta_{ik} = \frac{R_{ik}}{R''_{ik}} \\ \varepsilon_{ik} &= q_{ik} - 1, \quad \varepsilon'_{ik} = \alpha_{ik} - 1, \quad \varepsilon''_{ik} = 1 - \frac{1}{\beta_{ik}} \end{aligned} \quad (1.11)$$

При разделении изотопов молекулярно-кинетическими методами величины относительных коэффициентов разделения можно аппроксимировать соотношениями $q_{ij} = q_0^{M_j - M_i}$, где q_0 – коэффициент разделения, приходящийся на единицу разности массовых чисел; M_i, M_j – массовые числа i -го и j -го компонентов, соответственно [1].

При фиксированном номере «опорного» компонента (в качестве «опорного» выбран компонент с номером k) существует набор из $(m - 1)$ независимых q_{ik} (или α_{ik}, β_{ik}). По определению R_{ik} имеется m таких наборов. Однако, каждый из них, например q_{ik} , может быть преобразован в другой набор, например, q_{ij} по формулам

$$q_{ij} = q_{ik} \cdot q_{kj}. \quad (1.12)$$

Если $k \neq m$, то при всех $i < k$ значения всех коэффициентов разделения $q_{ik}, \alpha_{ik}, \beta_{ik}$, будут больше единицы, а при всех $i > k$ – меньше единицы.

Полные коэффициенты разделения q_{ik} , как правило, не зависят от состава смеси. В некоторых случаях, что характерно для газовой центрифуги, коэффициенты q_{ik} могут зависеть от коэффициента деления потоков смеси (срез) θ . Так, в общем случае, для газовой центрифуги, полный коэффициент разделения зависит также от коэффициента деления потоков смеси (срез) θ и от потока питания на один разделительный элемент ступени g_s (1.13) [2]:

$$q_{ij} = f(\theta, g_s), \quad (1.13)$$

Далее будем рассматривать случай усредненной величины коэффициента разделения. Введем обозначения:

$$g_i = \frac{\varphi_i}{1 - \varphi_i} = \frac{G'_i}{G''_i}, i \neq k, \quad (1.14)$$

$$g_k = \frac{\varphi_k}{1 - \varphi_k} = \frac{G'_k}{G''_k}. \quad (1.15)$$

Нетрудно показать, используя 1.9 и 1.11, что величины g_i и g_k связаны с величинами относительных коэффициентов разделения следующими соотношениями:

$$g_i = \frac{\alpha_{ik}(\beta_{ik} - 1)}{\alpha_{ik} - 1}, \quad i \neq k, \quad (1.16)$$

$$g_k = \frac{\beta_{ik} - 1}{(\alpha_{ik} - 1)\beta_{ik}} = \frac{\varepsilon''_{ik}}{\varepsilon'_{ik}}. \quad (1.17)$$

При этом

$$\frac{g_i}{g_k} = q_{ik}. \quad (1.18)$$

1.1.3 Понятие каскада

С использованием выражений 1.1–1.18 получим следующие соотношения, связывающие параметры отдельной ступени каскада

$$L = \sum_{j=1}^m L_j = \sum_{j=1}^m \frac{g_j + 1}{g_j} L'_j, \quad (1.19)$$

$$C_i = \frac{g_i + 1}{g_i} \frac{L'_i}{L}, \quad (1.20)$$

$$\theta = \frac{L'}{L} = \sum_{j=1}^m L'_j / \sum_{j=1}^m L_j. \quad (1.21)$$

1.2 Получение уравнений симметрично-противоточного каскада для случая произвольного числа компонентов и произвольных коэффициентов разделения.

Среди различных способов коммутации ступеней в разделительных каскадах наиболее распространенным является так называемый способ симметричного соединения ступеней в противоточной схеме (рис. 1.2). Рассмотрим схему такого каскада, имеющего один входящий поток питания F и два выходящих: отбор P , обогащенный самым легким компонентом и отвал W , обогащенный самым тяжелым компонентом. Потоки F , P , W и концентрации компонентов в них C_i^F , C_i^P , C_i^W ($i = 1, 2, \dots, m$) являются внешними параметрами каскада. Следует заметить, что в случае разделения многокомпонентных смесей понятия «отбор» и «отвал» условны, поскольку ценный компонент может обогащаться как вместе с самым легким компонентом смеси, так и вместе с самым тяжелым.

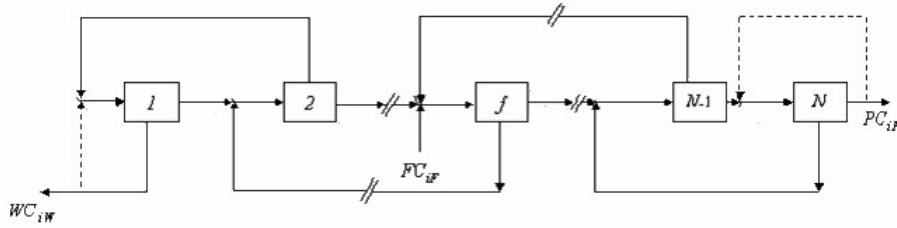


Рисунок 1.2 — Схема соединения ступеней в симметрично-противоточном каскаде

В отсутствие потерь рабочего вещества на ступенях каскада, внешние параметры каскада должны удовлетворять уравнениям материального баланса

$$\begin{aligned} F &= P + W, \\ FC_i^F &= PC_i^P + WC_i^W, \quad i = 1, 2, \dots, m. \end{aligned} \quad (1.22)$$

Ступени каскада пронумерованы последовательно от $s = 1$ на отвальной ступени каскада до $s = N$ на отборной ступени. Считаем, что внешнее питание каскада (F) подают на вход ступени с номером f . Внутренние параметры произвольной ступени с номером s (L_s , L'_s , L''_s , $G_{i,s}$, $G'_{i,s}$, $G''_{i,s}$), где L – потоки вещества, а G – парциальные потоки (изотопов с индексами i) в стационарном режиме работы каскада, в отсутствие потерь рабочего вещества на ступенях каскада, согласно 1.5, 1.6 связаны уравнениями баланса вещества и каждого компонента

$$L_s = L'_s + L''_s, \quad s = 1, \dots, N, \quad (1.23)$$

$$G_{i,s} = G'_{i,s} + G''_{i,s}, \quad s = 1, \dots, N \quad i = 1, 2, \dots, m. \quad (1.24)$$

где индекс i означает номер компонента.

Уравнения баланса в «узлах» (точках соединения межступенных потоков) при симметричном соединении ступеней имеют вид:

$$L_s = \theta_{s-1}L_{s-1} + (1 - \theta_{s+1})L_{s+1}, \quad s = 1, 2, \dots, f-1, f+1, \dots, N, \quad (1.25)$$

$$L_s C_{i,s} = \theta_{s-1}L_{s-1}C'_{i,s-1} + (1 - \theta_{s+1})L_{s+1}C''_{i,s+1}, \quad s = 1, 2, \dots, f-1, f+1, \dots, N, \quad i = 1, \quad (1.26)$$

Для ступени подачи питания f аналогичные уравнения выглядят так:

$$L_f = \theta_{f-1}L_{f-1} + (1 - \theta_{f+1})L_{f+1} + F, \quad (1.27)$$

$$L_f C_{i,f} = \theta_{f-1}L_{f-1}C'_{i,f-1} + (1 - \theta_{f+1})L_{f+1}C''_{i,f+1} + FC_i^F, \quad i = \overline{1, m}. \quad (1.28)$$

Внешние и внутренние параметры каскада связаны граничными условиями

$$L_0 = L'_0 = L''_0 = L_{N+1} = L'_{N+1} = L''_{N+1} = 0, \quad (1.29)$$

$$L'_N = \theta_N L_N = P, \quad (1.30)$$

$$L''_1 = (1 - \theta_1)L_1 = W, \quad (1.31)$$

$$C'_N = C_i^P, \quad i = 1, 2, \dots, m, \quad (1.32)$$

$$C''_1 = C_i^W, \quad i = 1, 2, \dots, m, \quad (1.33)$$

$$G'_{i,N} = PC_i^P, \quad i = 1, 2, \dots, m, \quad (1.34)$$

$$G''_{i,1} = WC_i^W, \quad i = 1, 2, \dots, m. \quad (1.35)$$

Соотношения (1.22)–(1.35) описывают простейшую физико-математическую модель противоточного симметричного каскада, предназначенного для разделения многокомпонентной смеси. При решении некоторых разделительных задач вместо уравнений (1.25)–(1.28) удобнее пользоваться разностными уравнениями, отражающими баланс потоков в сечениях между ступенями:

для обогатительной части каскада:

$$\theta_s L_s - (1 - \theta_{s+1}) L_{s+1} = P, \quad (1.36)$$

$$\theta_s L_s C'_{i,s} - (1 - \theta_{s+1}) L_{s+1} C''_{i,s+1} = P C_i^P \quad i = 1, 2, \dots, m, \quad (1.37)$$

для обеднительной части каскада:

$$\theta_s L_s - (1 - \theta_{s+1}) L_{s+1} = -W, \quad (1.38)$$

$$\theta_s L_s C'_{i,s} - (1 - \theta_{s+1}) L_{s+1} C''_{i,s+1} = -W C_i^W \quad i = 1, 2, \dots, m. \quad (1.39)$$

Величины, стоящие в левых частях уравнений (1.36)–(1.39), как правило, называют «транзитными» потоками смеси в целом (уравнения (1.36) и (1.38)) и ее отдельных компонентов (уравнения (1.37) и (1.39)) [1]. С физической точки зрения указанные уравнения определяют величину количества переносимого вещества в направлении от отвала к отбору. Отметим, что, в случае необходимости, аналогичные уравнения могут быть получены и для переноса вещества в направлении от отбора к отвалу. В свою очередь система (1.36)–(1.39) может быть легко преобразована к виду:

$$C_{i,s+1} - C_{i,s} = \frac{\theta_s L_s}{(1 - \theta_{s+1}) L_{s+1}} \delta'_{i,s} + \delta''_{i,s+1} - \frac{P (C_i^P - C_{i,s})}{(1 - \theta_{s+1}) L_{s+1}}, \quad (1.40)$$

$$i = 1, 2, \dots, m; \quad s = f, \dots, N,$$

, где $\delta'_{i,s} = C'_{i,s} - C_{i,s}$ – функция, представляющая собой изменение концентрации i -го компонента в потоке обогащенной фракции s -й ступени; $\delta''_{i,s} = C_{i,s} - C''_{i,s}$ – функция, представляющая собой изменение концентрации i -го компонента в потоке обедненной фракции s -й ступени.

Соответственно, система (1.36)–(1.39) может быть представлена в виде

$$C_{i,s+1} - C_{i,s} = \frac{\theta_s L_s}{(1 - \theta_{s+1}) L_{s+1}} \delta'_{i,s} + \delta''_{i,s+1} - \frac{W (C_{i,s} - C_i^W)}{(1 - \theta_{s+1}) L_{s+1}}, \quad (1.41)$$

$$i = 1, 2, \dots, m; \quad s = 1, 2, \dots, f - 1.$$

Отметим, что системы (1.25)–(1.28), (1.36)–(1.39) и (1.40)–(1.41) эквивалентны. Анализ данных систем показывает, что они обе представляют собой системы нелинейных разностных уравнений относительно функций $C_{i,s}$. Существенной проблемой при решении подобных систем является то, что в эти

уравнения (либо в их граничные условия) входят значения концентраций, которые неизвестны заранее и должны быть определены из решения этих же уравнений. Аналитическое решение подобных систем удастся найти лишь для некоторых частных случаев (данные случаи рассмотрены ниже) [1]. В общем случае, системы (1.25)–(1.28), (1.36)–(1.39) или (1.40)–(1.41) требуют использования численных методов. При этом, как правило, выделяют 2 типа задач расчета параметров каскада: поверочный расчет и проектировочный расчет.

Под поверочным расчетом каскада подразумевают следующую задачу: Задано: состав исходной разделяемой смеси, число ступеней в каскаде и величины питающих их потоков, величины внешнего потока питания и одного из выходящих потоков каскада (отбора или отвала), параметры ступени (например, относительные коэффициенты разделения ступеней и др.). Подлежат определению: концентрации всех компонентов в потоках отбора и отвала и распределение концентраций компонентов по ступеням каскада. Поверочный расчет каскада необходим при исследовании оптимального управления процессом разделения, при изменении режимов работы и отдельных параметров разделительного каскада [1]. Основные трудности поверочного расчета связаны с тем, что неизвестные концентрации компонентов в потоках отбора и отвала сами явно входят в основные уравнения переноса (или их граничные условия). Невозможность аналитического решения этих уравнений вызывает необходимость разработки численных методов, малочувствительных к заданию начальных приближений для концентраций компонентов в выходящих потоках. На сегодняшний день предложены различные методы поверочного расчета, которые позволяют численно решить данную задачу [1; 3–7].

Под проектировочным расчетом каскада обычно подразумевают следующую задачу [1]. Задано: состав исходной разделяемой смеси, один из выходящих потоков каскада (отбор или отвал), концентрации одного из компонентов (целевого или ключевого) в потоках отбора и отвала. Подлежат определению: все внутренние параметры каскада (распределение потока и концентраций компонентов по ступеням каскада и др.), концентрации остальных компонентов (всех кроме ключевого) в потоках отбора и отвала. При этом, очевидно, что найденные параметры каскада должны соответствовать оптимальным условиям разделения в каскаде.

Глава 2. Модельные каскады для разделения бинарных смесей.

Трудности решения (1.25)–(1.28), (1.36)–(1.39) и (1.40)–(1.41) в общем случае, стимулировали развитие упрощенных подходов, которые позволяют получить аналитическое решение для данных систем при введении определенных предположений. Полученные в результате таких упрощений физико-математические модели симметрично-противоточного каскада сохраняют закономерности молекулярно-селективного массопереноса, но позволяют заметно упростить соответствующие расчетные процедуры для определения оптимальных параметров каскада. Такие каскады получили название модельных [8–20].

Модельные каскады действуют как физически эквивалентные представления и, как показано в [21], могут быть выведены из «обобщенного модельного каскада», которым является симметрично-противоточный каскад с постоянными по его длине относительными коэффициентами разделения).

Целесообразной областью применения теории модельных каскадов является ее использование при предварительном рассмотрении актуальных проблем современной теории разделения многокомпонентных изотопных смесей в каскадах и смежных с разделительной наукой областей, таких, например, как ядерная энергетика.

Далее рассмотрим подробнее математические модели, нашедшие свое применение в расчетных исследованиях.

2.1 «Идеальный» каскад

2.1.1 «Идеальный» каскад для разделения бинарных смесей как частный случай симметрично-противоточного каскада с постоянными коэффициентами разделения.

2.1.2 «Идеальный» каскад в случае «слабого обогащения» и немалых обогащений на ступенях.

2.1.3 Сопоставление «идеального» и оптимального каскадов для разделения бинарных смесей.

2.2 Алгоритм расчета параметров «идеального» каскада для различных исходных условий. Примеры расчетов.

2.3 Задания для самостоятельного выполнения.

Глава 3. Модельные каскады для разделения многокомпонентных смесей.

3.1 Частные случаи симметрично-противоточного каскада для разделения многокомпонентных изотопных смесей.

3.2 «Квазиидеальный» каскад и Q-каскад, их физическая взаимосвязь.

Наиболее общая из таких моделей называется «квазиидеальным» каскадом, где предполагается постоянство по всей его длине относительных коэффициентов разделения, а также срезов парциальных потоков компонентов по каскадным ступеням [14]. В настоящее время он используется в двух приближениях: со слабым обогащением, когда $q-1 \approx 0$ (Q-каскад [11; 22; 23]) и произвольным обогащением, когда $q-1$ не много меньше единицы (квазиидеальный каскад [24]). Применение модельных каскадов значительно упрощает расчет закономерностей массообмена в каскаде для многокомпонентного разделения.

Ниже кратко рассмотрены модельные каскады, для интересующего нас случая произвольного немалого коэффициента разделения на ступенях, когда $q-1$ не много меньше единицы – «квазиидеальный» каскад и его частный случай R-каскад [19].

Рассмотрим случай симметричного противоточного каскада с постоянными по его длине относительными коэффициентами разделения q_{ik} , α_{ik} , β_{ik} ($i = 1, 2, \dots, m$; k – номер «опорного» компонента). Условие постоянства относительных коэффициентов разделения обеспечивает выполнение условия постоянства величин g_i и φ_i . Следовательно, соотношения (1.25)–(1.28) приводятся к виду [1]:

$$G'_i(s-1) + \frac{1}{g_i} G'_i(s+1) - \frac{g_i+1}{g_i} G'_i(s) + \delta_{sf} F c_{iF} = 0, \quad i \neq k, \quad (3.1)$$

$$G'_k(s-1) + \frac{1}{g_k} G'_k(s+1) - \frac{g_k+1}{g_k} G'_k(s) + \delta_{sf} F c_{kF} = 0, \quad (3.2)$$

где s – текущий номер ступени, отсчитываемый от «тяжелого» конца каскада к его «легкому» концу $\delta_{sf} = \begin{cases} 0, & s \neq f \\ 1, & s = f \end{cases}$

Уравнения (3.1)–(3.2) представляют собой линейные разностные уравнения второго порядка относительно неизвестных функций $G'_i(s)$. Граничные условия для них имеют вид:

$$\begin{cases} G'_i(0) = G'_i(N+1) = 0, & i = 1, 2, \dots, m \\ G'_i(N) = PC_i^P, & i = 1, 2, \dots, m \\ G'_i(1) = g_i WC_i^W, & i \neq k \\ G''_k(1) = g_k WC_k^W. \end{cases} \quad (3.3)$$

Ступени с номерами $s = 1$ и $s = N$ являются крайними ступенями каскада, что делает возможным формально записать $G'_i(0) = G'_i(N+1) = 0$.

Решив (3.1) и (3.2), а также используя уравнения баланса (1.22) и граничные условия (3.3), можно получить уравнения связи внешних параметров такого каскада с длинами его секций и параметрами ступени. В итоге:

$$\frac{P}{F} = \sum_{j=1}^m C_j^F \frac{1 - g_j^{-f}}{1 - g_j^{-N-1}}, \quad s = f, \dots, N, \quad (3.4)$$

$$\frac{W}{F} = \sum_{j=1}^m C_j^F \frac{g_j^{N+1-f} - 1}{g_j^{N+1} - 1}, \quad s = 1, \dots, f-1, \quad (3.5)$$

$$C_i^P = C_i^F \frac{1 - g_i^{-f}}{1 - g_i^{-N-1}} / \sum_{j=1}^m C_j^F \frac{1 - g_j^{-f}}{1 - g_j^{-N-1}}, \quad i = 1, 2, \dots, m \quad (3.6)$$

$$C_i^W = C_i^F \frac{g_i^{N+1-f} - 1}{g_i^{N+1} - 1} / \sum_{j=1}^m C_j^F \frac{g_j^{N+1-f} - 1}{g_j^{N+1} - 1}, \quad i = 1, 2, \dots, m \quad (3.7)$$

Далее, распределение потока $L(s)$, концентраций компонентов и коэффициента деления потоков по ступеням каскада можно определить по формулам [1]:

$$L(s) = \sum_{j=1}^m G'_j(s) \frac{1 + g_j}{g_j} = \begin{cases} P \sum_{j=1}^m \frac{g_j+1}{g_j-1} C_j^P (1 - g_j^{s-N-1}), & s = f, \dots, N \\ W \sum_{j=1}^m \frac{g_j+1}{g_j-1} C_j^W (g_j^s - 1), & s = 1, \dots, f-1 \end{cases} \quad (3.8)$$

$$C_i(s) = \frac{1 + g_j}{g_j} \cdot \frac{G_i'''(s)}{G_i(s)} = \begin{cases} \frac{C_i^P \frac{g_j}{g_j-1} (1 - g_j^{s-N-1})}{\sum_{j=1}^m \frac{g_j+1}{g_j-1} C_j^P (1 - g_j^{s-N-1})}, & s = f, \dots, N, \\ \frac{C_i^W \frac{g_j}{g_j-1} (g_j^s - 1)}{\sum_{j=1}^m \frac{g_j+1}{g_j-1} C_j^W (g_j^s - 1)}, & s = 1, \dots, f-1, \end{cases} \quad (3.9)$$

$$\theta(s) = \frac{\sum_{j=1}^m G_j'(s)}{\sum_{j=1}^m G_j(s)} = \begin{cases} \frac{\sum_{j=1}^m \frac{g_j}{g_j-1} C_j^P (1 - g_j^{s-N-1})}{\sum_{j=1}^m \frac{g_j+1}{g_j-1} C_j^P (1 - g_j^{s-N-1})}, & s = f, \dots, N, \\ \frac{\sum_{j=1}^m \frac{g_j}{g_j-1} C_j^W (g_j^s - 1)}{\sum_{j=1}^m \frac{g_j+1}{g_j-1} C_j^W (g_j^s - 1)}, & s = 1, \dots, f-1. \end{cases} \quad (3.10)$$

Формулу для расчета относительного суммарного потока в каскаде легко получить, суммируя (3.8) по всем ступеням каскада

$$\sum_{s=1}^N \frac{L(s)}{P} = \sum_{i=1}^m \left\{ \frac{g_i + 1}{g_i - 1} \left[\frac{W}{P} C_i^W(f) + C_i^P(N + 1 - f) \right] \right\}. \quad (3.11)$$

Рассмотренный выше каскад отличается тем, что относительные коэффициенты разделения q_{ik} , α_{ik} , β_{ik} (и, соответственно, срезы парциальных компонентов φ_i , φ_k и параметры g_i , g_k) остаются постоянными по длине каскада. Для таких каскадов в работе [19] был введен термин «квазиидеальный» каскад.

3.3 R-каскад и его использование при оптимизации параметров каскадов для разделения многокомпонентных изотопных смесей.

В исследованиях, как правило, когда обогащенный переработанный уран обогащается многопоточными схемами, часто используется модель R-каскада (Matched Abundance Ratio Cascade-MARC [9; 25; 26]). Это частный случай ‘квазиидеального’ каскада. Здесь условие отсутствия смешивания относительных концентраций при подаче в каждую ступень выполняется для выбранной пары компонентов (например, это могут быть изотопы ^{235}U и ^{238}U).

Рассмотрим R-каскад, в котором выполняется несмешивание относительных концентраций n -го и k -го компонентов смеси. Данная каскадная модель является аналогом используемого в теории разделения бинарных смесей

«идеального» каскада, в «узлы» которого входят потоки с одинаковой концентрацией компонентов. R-каскады могут быть построены как в случае «слабого обогащения», так и для немалых обогащений на ступени. Рассмотрим R-каскад в случае немалых обогащений на ступени. Условие несмещения по относительным концентрациям n -го и k -го компонентов можно записать в виде:

$$R'_{nk}(s-1) = R_{nk}(s) = R''_{nk}(s+1). \quad (3.12)$$

Вследствие (3.12) коэффициенты α_{nk} и β_{nk} совпадают для двух соседних ступеней. При постоянных полных коэффициентах разделения равенство:

$$\alpha_{nk} = \beta_{nk} = \sqrt{q_{nk}} \quad (3.13)$$

приводит к каскаду со ступенями симметричными относительно пары компонентов с номерами n и k . При этом на всех ступенях каскада $\alpha_{ik} \neq \beta_{ik}$ ($i \neq n$). Учитывая, сказанное выше, (3.4)–(3.7) могут быть переписаны в виде:

$$\frac{P}{F} = \sum_{j=1}^m C_j^F \frac{(R_{nk}^W)^{-d_j} - (R_{nk}^F)^{-d_j}}{(R_{nk}^W)^{-d_j} - (R_{nk}^P)^{-d_j}}, \quad (3.14)$$

$$\frac{W}{F} = \sum_{j=1}^m C_j^F \frac{(R_{nk}^F)^{-d_j} - (R_{nk}^P)^{-d_j}}{(R_{nk}^W)^{-d_j} - (R_{nk}^P)^{-d_j}}, \quad (3.15)$$

$$C_i^P = C_i^F \frac{(R_{nk}^W)^{-d_i} - (R_{nk}^F)^{-d_i}}{(R_{nk}^W)^{-d_i} - (R_{nk}^P)^{-d_i}} / \sum_{j=1}^m C_j^F \frac{(R_{nk}^W)^{-d_j} - (R_{nk}^F)^{-d_j}}{(R_{nk}^W)^{-d_j} - (R_{nk}^P)^{-d_j}} \quad (3.16)$$

$$C_i^W = C_i^F \frac{(R_{nk}^F)^{-d_i} - (R_{nk}^P)^{-d_i}}{(R_{nk}^W)^{-d_i} - (R_{nk}^P)^{-d_i}} / \sum_{j=1}^m C_j^F \frac{(R_{nk}^F)^{-d_j} - (R_{nk}^P)^{-d_j}}{(R_{nk}^W)^{-d_j} - (R_{nk}^P)^{-d_j}} \quad (3.17)$$

$$d_i = \frac{\ln q_{ik}}{\ln g_n} - 1, \quad (3.18)$$

, где R_{nk}^F , R_{nk}^W и R_{nk}^P – относительные концентрации целевого компонента в потоках F , W , и P , соответственно.

Для молекулярно-кинетических методов разделения соотношения (1.16)–(1.17) можно записать в следующем виде:

$$g_k = q_0^{-\frac{M_k - M_n}{2}}, \quad (3.19)$$

$$g_i = q_0^{M^* - M_i}, \quad (3.20)$$

, где $M^* = \frac{M_n + M_k}{2}$.

Из (3.19)–(3.20) непосредственно следует, что для всех компонентов с $M_i < M^*$ величины $g_i > 1$, если же $M_i > M^*$, то $g_i < 1$. Из соотношений (3.16) и (3.17) при выполнении условий $N - f + 1 \gg 1$, $f - 1 \gg 1$ («длинный каскад») следует, что в таком R-каскаде компоненты с $g_i > 1$ ($M_i < M^*$ обогащаются к «легкому» выходящему потоку каскада, а компоненты с $g_i < 1$ ($M_i > M^*$ обогащаются к «тяжелому» выходящему потоку каскада. Следовательно, величина параметра M^* полностью определяет направление обогащения компонентов смеси в R-каскаде.

Суммарный поток R-каскада равен [1]:

$$\sum_{s=1}^N L(s) = \sum_{j=1}^m \frac{PC_j^P \ln R_{nk}^P + WC_j^W \ln R_{nk}^W - FC_j^F \ln R_{nk}^F}{\frac{g_j - 1}{g_j + 1} \ln g_n}. \quad (3.21)$$

Среди свойств, присущих модели R-каскада особо следует выделить следующие:

1. В случае $m = 2$ условие несмещения (3.12) сводится к известному условию несмещения абсолютных концентраций, которое справедливо для «идеального» каскада;
2. Как показано в работе [27], суммарный поток R-каскада при заданных величинах концентраций целевого компонента в потоках отбора C_n^P и отвала C_n^W минимален, при условии соответствующего выбора номера опорного компонента. Остановимся подробнее на этом свойстве. Фактически выбор опорного компонента определяет величину M^* . При этом, строго говоря, величина M^* для любой m -компонентной смеси является дискретной функцией номера опорного компонента и, соответственно, имеет ограниченный набор допустимых значений, определяемых возможным количеством «опорных» компонентов смеси. В [20] предложено формально ввести в рассмотрение «виртуальные» компоненты с исчезающе малой концентрацией (на несколько порядков меньше наименьшей концентрации «реальных» компонентов смеси) и с массовыми числами, лежащими в пределах от M_1 до M_m . В этом случае значение M^* может принимать любые значения в интервале от M_1 до M_m . Это позволяет построить кривую зависимости суммарного потока в каскаде от величины M^* и найти ее минимум.

Тем самым, данный подход позволяет из бесконечного множества набора параметров R-каскадов, обеспечивающих получение заданных концентраций целевого компонента в выходящих потоках, выбрать параметры такого R-каскада, который отвечает минимуму величины суммарного потока [20]. При этом полученные параметры такого R-каскада будут незначительно (менее, чем на 1%) отличаться от параметров оптимального по величине суммарного потока каскада (при заданных концентрациях целевого компонента в потоках отбора и отвала) [27]. Такой R-каскад можно рассматривать как наилучший или «эталонный».

Приведенные выше свойства каскада с несмешиванием по относительным концентрациям выбранной пары компонентов (R-каскада) делают его очень удобным для численного моделирования процессов молекулярно-селективного массопереноса в каскаде казовых центрифуг для разделения многокомпонентных смесей, таких как регенерированный уран. К тому же основной целью проведения вычислительных экспериментов в диссертационной работе являлся расчет изотопных составов получаемого в схеме конечного продукта (товарного низкообогащенного урана) и оценка ключевых интегральных параметров каскадных схем (массовые расходы регенерата и обедненного урана, потоки между каскадами, затраты работы разделения и другие), выбор был сделан именно в пользу модели R-каскада.

Следует отметить, что как таковые понятия «работа разделения» и «единица работы разделения» (ЕРР) первоначально введены только для двухкомпонентных смесей. Для многокомпонентной смеси и, в том числе, смеси регенерированного урана, понятие работы разделения является условным. Поэтому в приведенных ниже результатах под работой разделения подразумевали условную величину прямо пропорциональную числу газовых центрифуг в каскаде (или суммарному потоку каскада при условии работы центрифуг в идентичных режимах).

3.4 Алгоритмы расчета параметров ординарных «квазиидеального» каскада и Q-каскада при различных заданных параметрах. Примеры расчетов.

3.5 Задания для самостоятельного выполнения.

Список сокращений и условных обозначений

	q_0	коэффициент разделения
	N	длина каскада (число ступеней)
f	$N + 1 - f$	число ступеней в обеднительной и обогатительной частях.
	n	
	k	индексы целевого (^{235}U) и опорного компонент.
	F_i	
	P_i	потoki питания, отбора и отвала, где i – индекс каскада.
	W_i	
	ЛВР	легководный реактор
	ВВЭР	водо-водяной энергетический реактор
	ЯТЦ	ядерный топливный цикл
	ЗЯТЦ	замкнутый ядерный топливный цикл
	ТВС	тепловыделяющая сборка
МОХ-топливо		ядерное топливо, состоящее из смеси диоксидов урана и плутония
	ОЯТ	Облученное ядерное топливо, извлеченное из ядерного реактора после использования и для этой цели в имеющейся форме более непригодное
	РАО	Радиоактивные отходы. Существуют подклассы радиоактивных отходов: высокоактивные (ВАО), среднеактивные (САО), низкоактивные (НАО)
	НОУ	низкообогащенный уран
	ВОУ	высокообогащенный уран
	ОГФУ	обедненный гексафторид урана
	РР	работа разделения
	ЕРР	1 кг работы разделения, единица работы по разделению изотопов. Мера усилий, затрачиваемых на разделение материала определённого изотопного состава на две фракции с отличными изотопными составами; не зависит от применяемого процесса разделения.
	UF_6	гексафторид урана

$C_8H_3F_{13}$ фреон-346

ASTM международное общество по испытаниям и материалам

ASTM международное общество по испытаниям и материалам

CHAU система нелинейных алгебраических уравнений

Список литературы

1. *Сулаберидзе, Г. А.* Теория каскадов для разделения бинарных и многокомпонентных изотопных смесей; под ред. В. Д. Бормана / Г. А. Сулаберидзе, В. А. Палкин, В. Д. Борисевич. — 2011.
2. Objective Function at Optimization of Separation Cascades / A. Mustafin [и др.] // AIP Conference Proceedings. — 2019. — апр. — т. 2101, № 1. — с. 020008.
3. *Сазыкин, А.* Усовершенствованный Метод Расчета Разделения Многокомпонентных Смесей На Центробежных Каскадах / А. Сазыкин, А. Руднев // Сб. Докладов 2-Ой Всерос. Научн. Конф. «Физ.-Хим. Процессы При Селекции Атомов и Молекул». — ЦНИИАтоминформ, 1997. — с. 159—161.
4. *Wu, H.* Calculation Methods for Determining the Distribution of Components in a Separation Cascade for Multicomponent Mixture / H. Wu, C. Ying, G. Liu // Sep. Sci. and Techn. 33(6). — 1988. — с. 887—898.
5. Эффективный Метод Расчета Каскадов Для Разделения Многокомпонентных Изотопных Смесей / Л. Холпанов [и др.] // Хим. Пром. — 1998. — № 3. — с. 44—50.
6. On Calculation of Squared-off Cascades for Multicomponent Isotope Separation / D. Potapov [и др.] // Proc. 5th. Workshop of Separation Phenomena in Liquids and Gases. Iguacu Falls, Brazil. — 1996. — с. 13—23.
7. *Zeng, S.* A Robust and Efficient Calculation Procedure for Determining Concentration Distribution of Multicomponent Mixture / S. Zeng, C. Ying // Sep. Sci. and Techn. — 2000. — т. 35, № 4. — с. 613—622.
8. *Миненко, В. К* Теории Каскадов Для Разделения Многокомпонентных Изотопных Смесей / В. Миненко, Р. Кучеров // Атомная энергия. — 1965. — т. 19, № 4. — с. 360—367.
9. *De la Garza, A.* Multicomponent Isotope Separation in Cascades / A. de la Garza, G. A. Garrett, J. E. Murphy // Chemical Engineering Science. — 1961. — Sept. 1. — Vol. 15, no. 3. — P. 188—209.
10. *Жигаловский, Б.* Лекционные Материалы По Многокомпонентным Смесям. Новоуральск, УЭХК / Б. Жигаловский. — 1999.

11. Design of Cascades for Separating Isotope Mixtures / N. A. Kolokol'tsov [et al.] // Soviet Atomic Energy. — 1970. — Dec. 1. — Vol. 29, no. 6. — P. 1193—1198.
12. К вопросу о построении каскадов для разделения многокомпонентных изотопных смесей / Н. А. Колокольцов [и др.]. — 1970.
13. *Миненко, В. П.* Предельное обогащение промежуточных изотопов в отборе с концов каскада / В. П. Миненко. — 1972.
14. YAMAMOTO, I. Multicomponent Isotope Separating Cascade Composed of Elements with Large Separation Factors / I. YAMAMOTO, A. KANAGAWA // Journal of Nuclear Science and Technology. — 1978. — 1 авг. — т. 15, № 8. — с. 580—584.
15. *Wu, J.* The Study of Multicomponent Isotope Separation of Uranium in Cascades by Centrifugal Method / J. Wu, Z. Fu // Proc. of 6th Workshop on Separation Phenomena in Liquids and Gases 1998. Nagoya, Japan. October. — с. 18—21.
16. *Борисевич, В. Д.* О Расчете Каскадов с Дополнительным Отбором Для Разделения Многокомпонентных Изотопных Смесей / В. Д. Борисевич, Д. Потапов, Г. А. Сулаберидзе. — 1993.
17. *Wood, H. G.* On a Criterion Efficiency for Multi-Isotope Mixtures Separation / H. G. Wood, V. D. Borisevich, G. A. Sulaberidze // Sep. Sci. and Technol. — 1999. — т. 34, № 3. — с. 343—357.
18. Особенности обогащения компонентов с промежуточной массой в квазиидеальном каскаде / Г. А. Сулаберидзе [и др.] // Атомная энергия. — 2006. — т. 100, № 1. — с. 51—56.
19. *Сазыкин, А.* Квазиидеальные Каскады Для Разделения Многокомпонентных Смесей Изотопов / А. Сазыкин. — 2000.
20. *Сулаберидзе, Г. А.* О Сравнение Оптимальных и Модельных Каскадов Для Разделения Многокомпонентных Смесей При Произвольном Обогащении На Ступени / Г. А. Сулаберидзе, В. Д. Борисевич, Ц. Се // Теорет. основы хим. технологии. — 2008. — т. 42, № 4. — с. 1—7.
21. Classification of Model Cascades for Separation of Multicomponent Isotope Mixtures / G. A. Sulaberidze [и др.] // Separation Science and Technology. — 2020. — 21 апр. — т. 0, № 0. — с. 1—11.

22. *Borisevich, V.* New Approach to Optimize Q-Cascades / V. Borisevich, G. Sulaberidze, S. Zeng // Chemical Engineering Science. — 2011. — Vol. 66, no. 3. — P. 393—396.
23. The Q-Cascade Explanation / S. Zeng [et al.] // Separation Science and Technology. — 2012. — Vol. 47, no. 11. — P. 1591—1595.
24. Special Features of the Enrichment of Components with Intermediate Mass in a Quasi-Ideal Cascade / G. A. Sulaberidze [et al.] // Atomic Energy. — 2006. — Jan. 1. — Vol. 100, no. 1. — P. 53—59.
25. *Kazuki Hida.* Simultaneous Evaluation of the Effects of ^{232}U and ^{236}U on Uranium Recycling in Boiling Water Reactors / Kazuki Hida, S. Kusuno, S. Takeshi // Nuclear Technology. — 1986. — т. 75, № 2. — с. 148—159.
26. *Wood, H.* Effects of Separation Processes on Minor Uranium Isotopes in Enrichment Cascades / H. Wood // Science and Global Security. — 2008. — т. 16, № 1/2. — с. 26—36.
27. Comparative Study of the Model and Optimum Cascades for Multicomponent Isotope Separation / T. Song [и др.] // Separation Science and Technology. — 2010. — сент. — т. 45, № 14. — с. 2113—2118.