

**ИСПОЛЬЗОВАНИЕ КОМПЬЮТЕРНЫХ
ПРИЛОЖЕНИЙ ДЛЯ ОПТИМИЗАЦИИ
ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ
ГЕТЕРОГЕННЫХ ПРОЦЕССОВ ГАЗ-ТВЕРДОЕ**

Мясников М.С.

ГЕТЕРОГЕННЫЕ ПРОЦЕССЫ ГАЗ-ТВЕРДОЕ В АТОМНОЙ ПРОМЫШЛЕННОСТИ:

- Фторирование урана, плутония и т. д.
- Очистка сбросных газов
- Селективная сорбция и десорбция
- Процессы окисления и восстановления

ЦЕЛИ ИССЛЕДОВАНИЯ КИНЕТИКИ ГЕТЕРОГЕННЫХ ПРОЦЕССОВ:

1. Установление факторов, влияющих на процесс
2. Определение кинетических параметров реакции и вывод уравнения вида

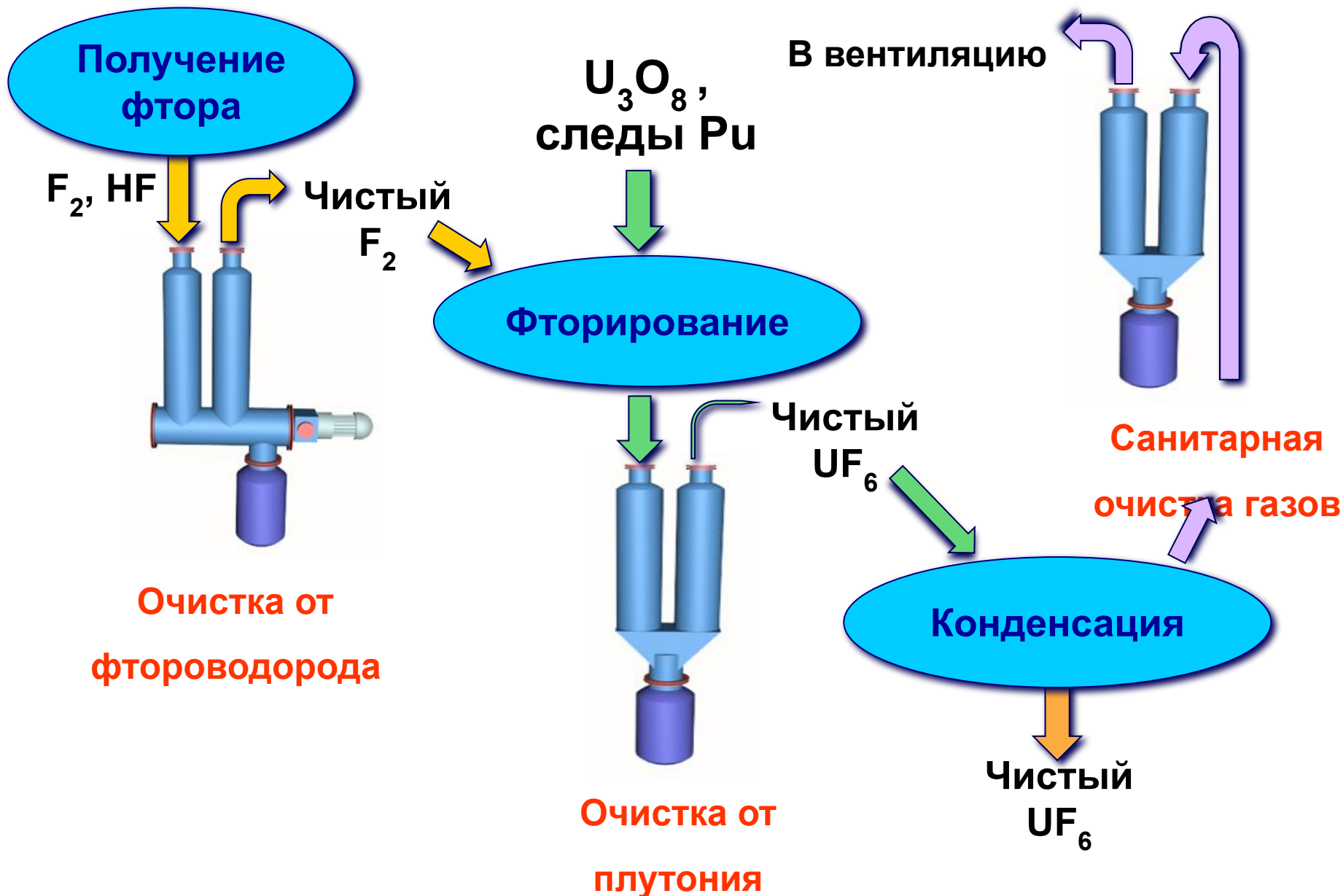
$$\alpha = f(T, P, \tau),$$

где α – степень превращения
твёрдого образца

ОБЛАСТЬ ПРИМЕНЕНИЯ СОРБЕНТОВ НА ОСНОВЕ ЩЕЛОЧНЫХ И ЩЕЛОЧНОЗЕМЕЛЬНЫХ МЕТАЛЛОВ:

- Очистка электролизного фтора от фтороводорода
- Утилизация и селективная сорбция газообразных фторидов (SiF_4 , VF_3 и др.)
- Получение летучих фторидов (WF_6 , ClF_3 , MoF_6 , NF_3 и др.)
- Технология ВОУ-НОУ

ПРИМЕНЕНИЕ СОРБЕНТОВ ДЛЯ ПРОЦЕССА ВОУ-НОУ



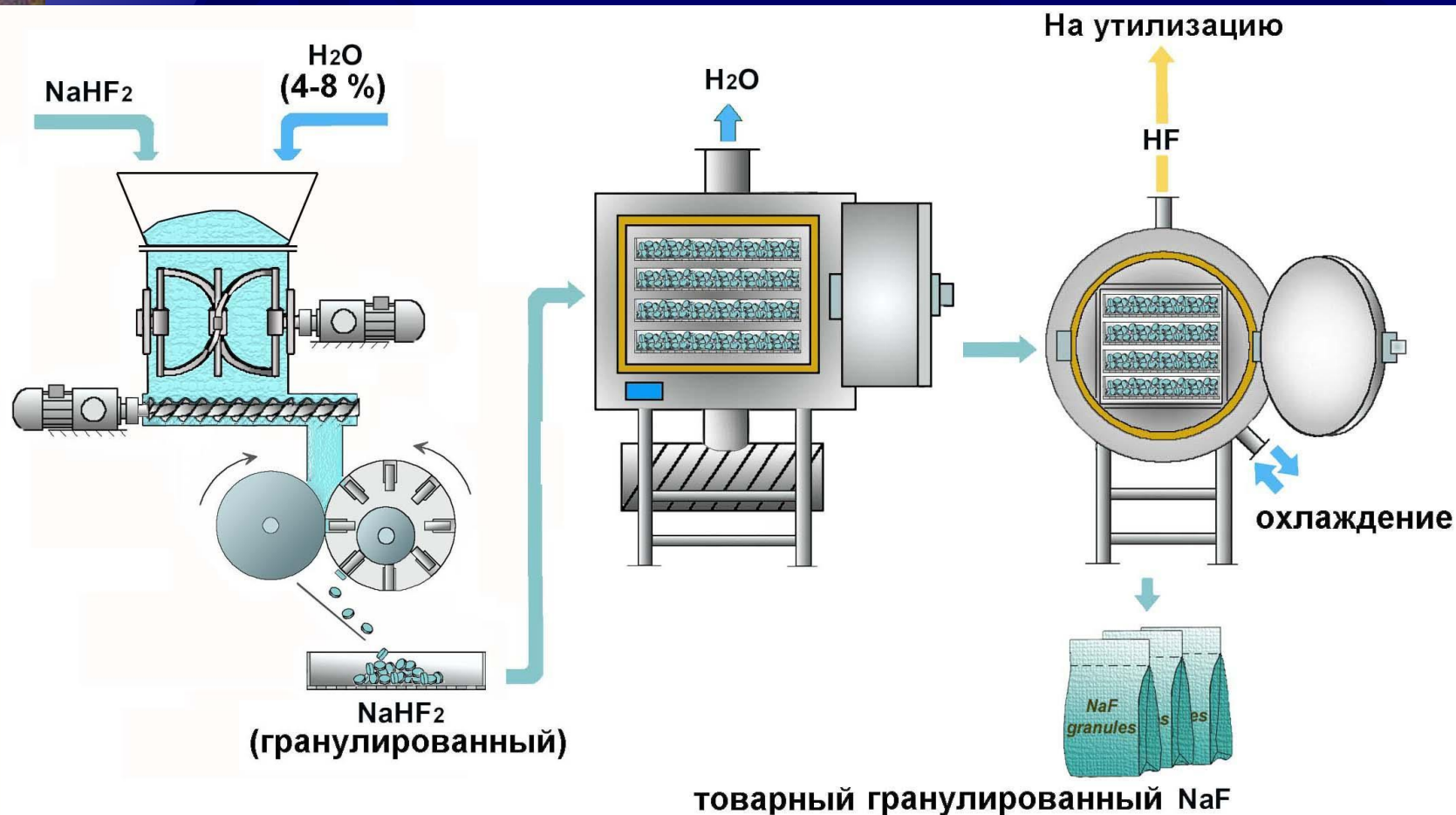
ПОРОШКОВАЯ ТЕХНОЛОГИЯ ПОЛУЧЕНИЯ ТАБЛЕТИРОВАННЫХ СОРБЕНТОВ NaF

Формование
таблеток

Сушка таблеток
 $T = 90 - 100 \text{ }^\circ\text{C}$

Прокалка таблеток
при температуре десорбции
летучего компонента

упаковка товарного
таблетированного
сорбента



СОРБЕНТЫ НА ОСНОВЕ NaF, LiF, CaF₂ ДЛЯ СЕЛЕКТИВНОЙ ОЧИСТКИ ЛЕТУЧИХ ФТОРИДОВ MoF₆, WF₆, HF, UF₆, SiF₄



Удельная поверхность, м²/г...4.94

Истинная плотность, г/см³.....2.43

Пористость, %.....52.0

Статическая прочность, кгс/см².....68.4

Насыпная плотность, г/см³.....1.16

Количество адсорбированного HF

при 80 °С и 50 мм рт. ст., г/г.....0.43

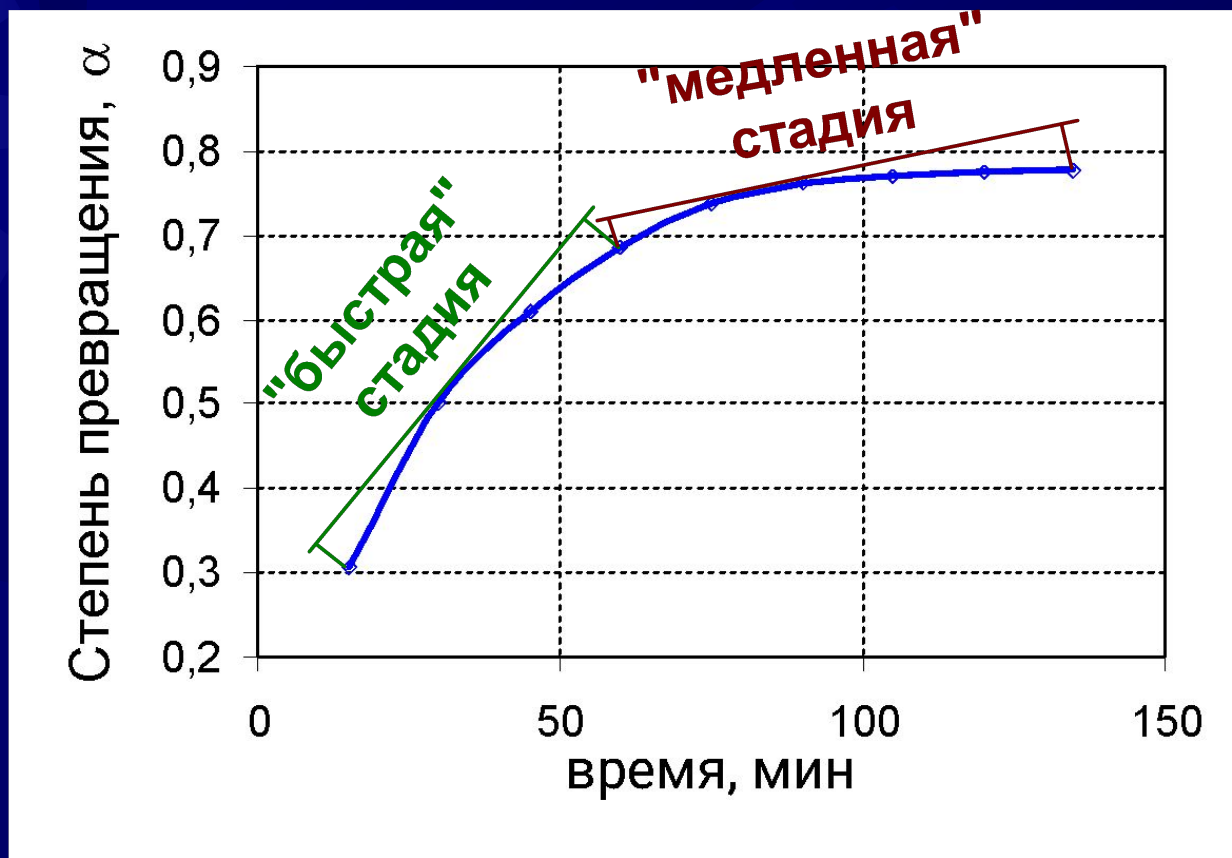
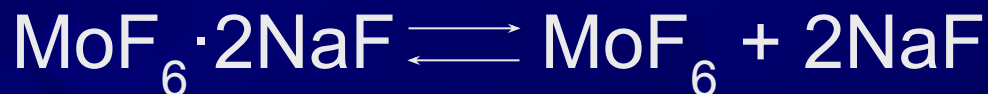
то же UF₆.....1.8

Разработана методика и компьютерная программа «Кинетика» для расчета кинетических параметров сорбции и десорбции летучих фторидов с таблетированных сорбентов:

- E_a - кажущейся энергии активации процесса;
- n - порядка реакции по твердому реагенту;
- m - порядка реакции по газообразному реагенту;
- k_0 - предэкспоненциального множителя в уравнении Аррениуса (константы сорбционной колонны),

а также установления лимитирующей стадии процесса

Работа программы продемонстрирована на примере процесса десорбции гексафторида молибдена с гранулированного NaF по реакции («быстрая» стадия процесса):



Матрица исходных данных (в окне текстового редактора Norton Commander)

давление
опыта в
мм рт. ст.

Pressure (mm Hg)	190	200	210
10	15	15	15
15	0.188	0.246	0.3045
30	0.314	0.407	0.5
45	0.409	0.507	0.61
60	0.480	0.601	0.686
75	0.533	0.641	0.737
90	0.576	0.681	0.762
105	0.611	0.711	0.771
120	0.637	0.727	0.775
135	0.661	0.744	0.778

температуры опытов
в градусах Цельсия

границы рабочей
области (в минутах)
на графиках $\alpha = f(\tau)$

время в
минутах

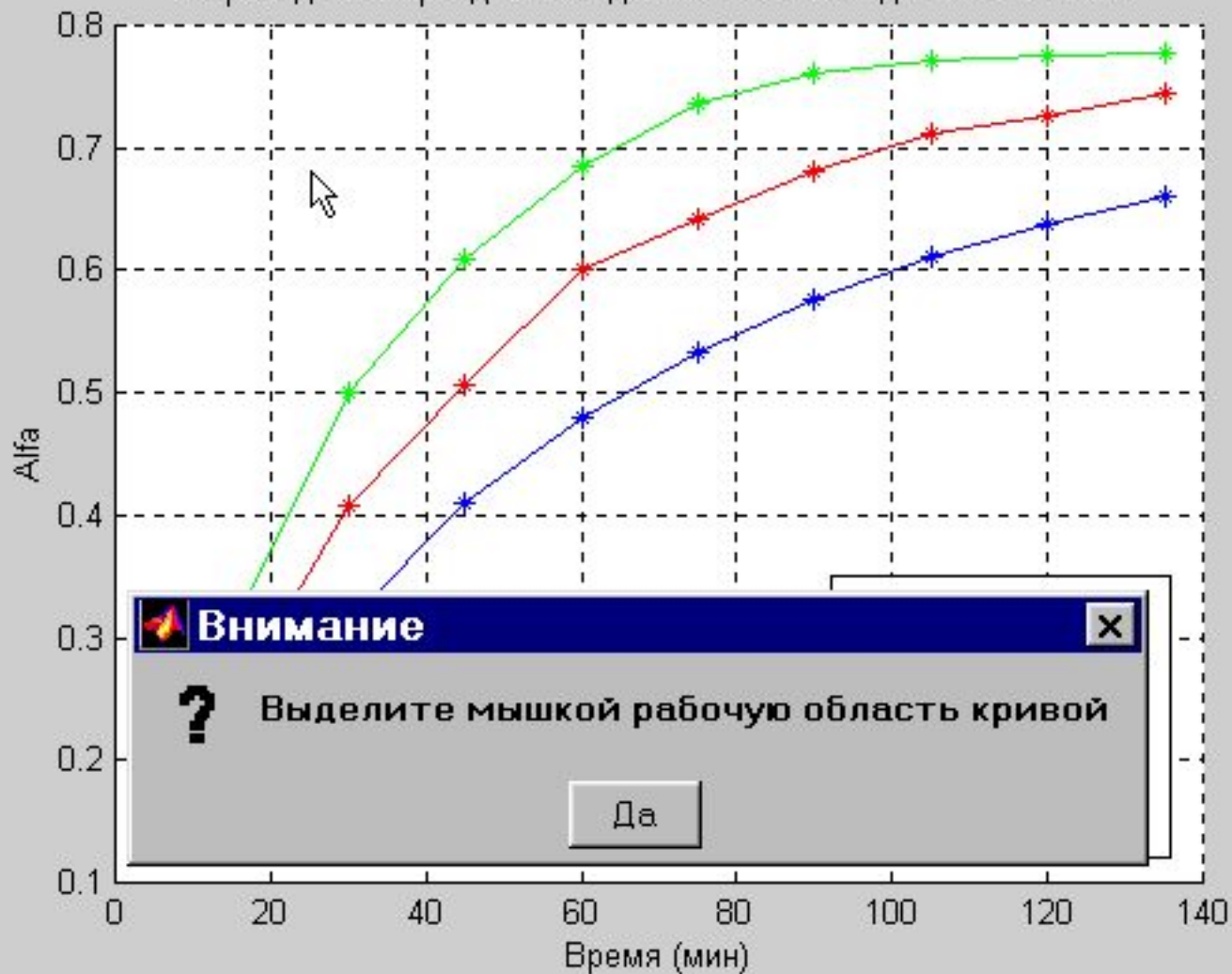
значения α

1Help 2Unwrap 3Quit 4Hex 5 6Edit 7Search 8Win

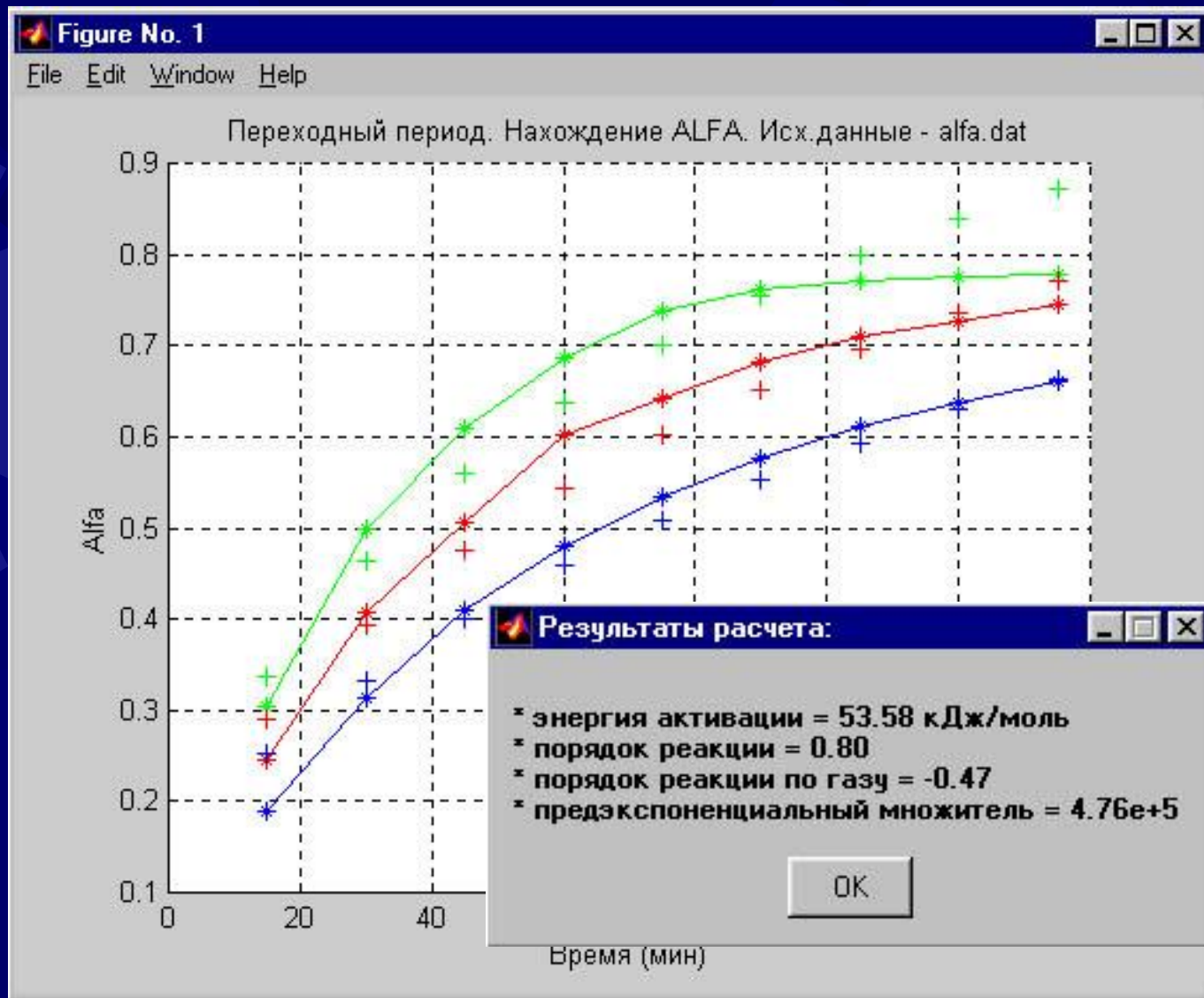
Выбор рабочей области (контролирующей стадии) на графиках зависимости $\alpha = f(\tau)$

Unregistered HyperCam

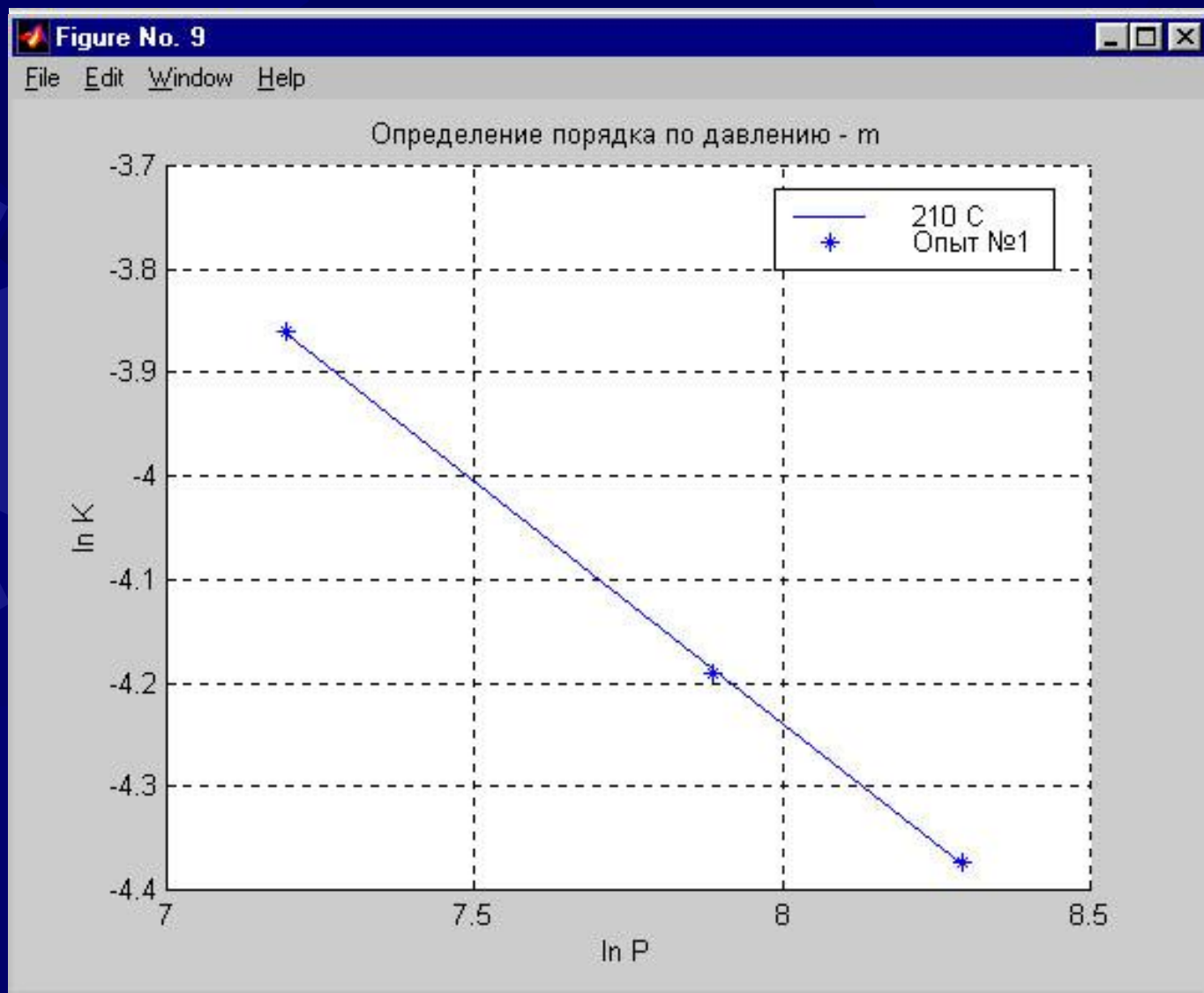
Переходный период. Нахождение ALFA. Исх. данные - alfa.dat



Построение зависимости $\alpha = f(\tau)$ по рассчитанным параметрам



Определение формулы и коэффициента активации E_m акт

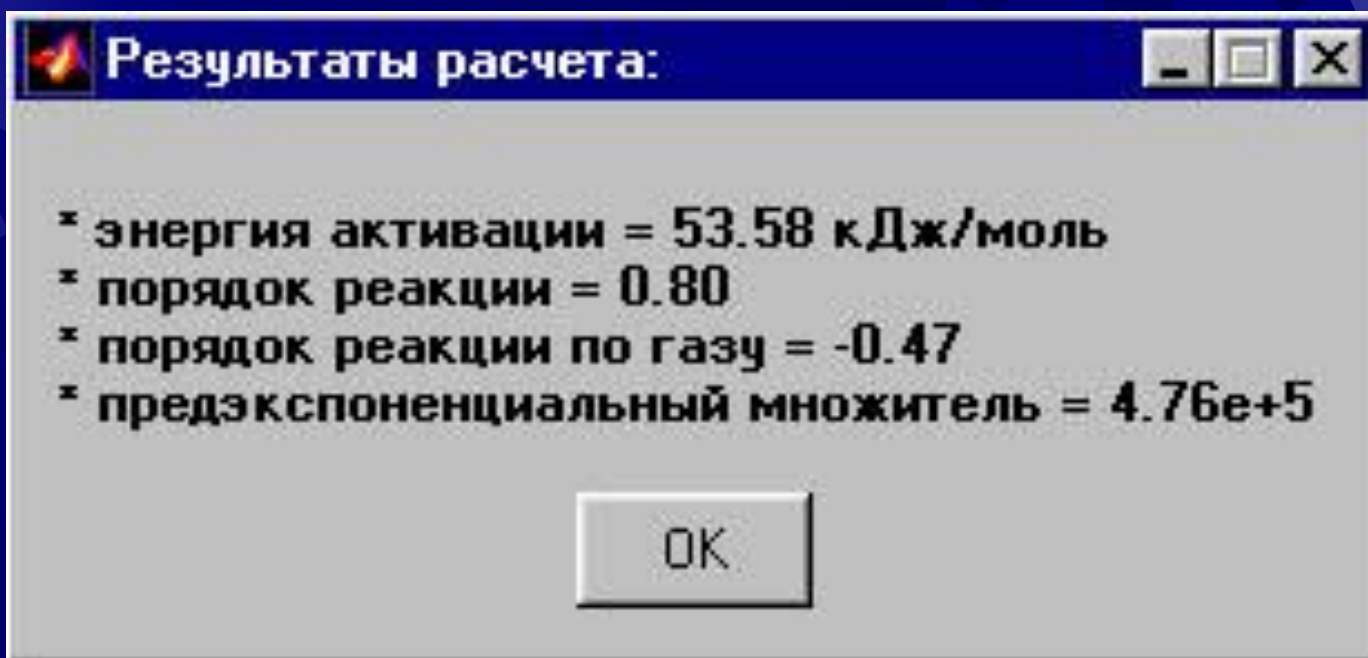


Алгоритм работы программы:



Получено кинетическое уравнение процесса:

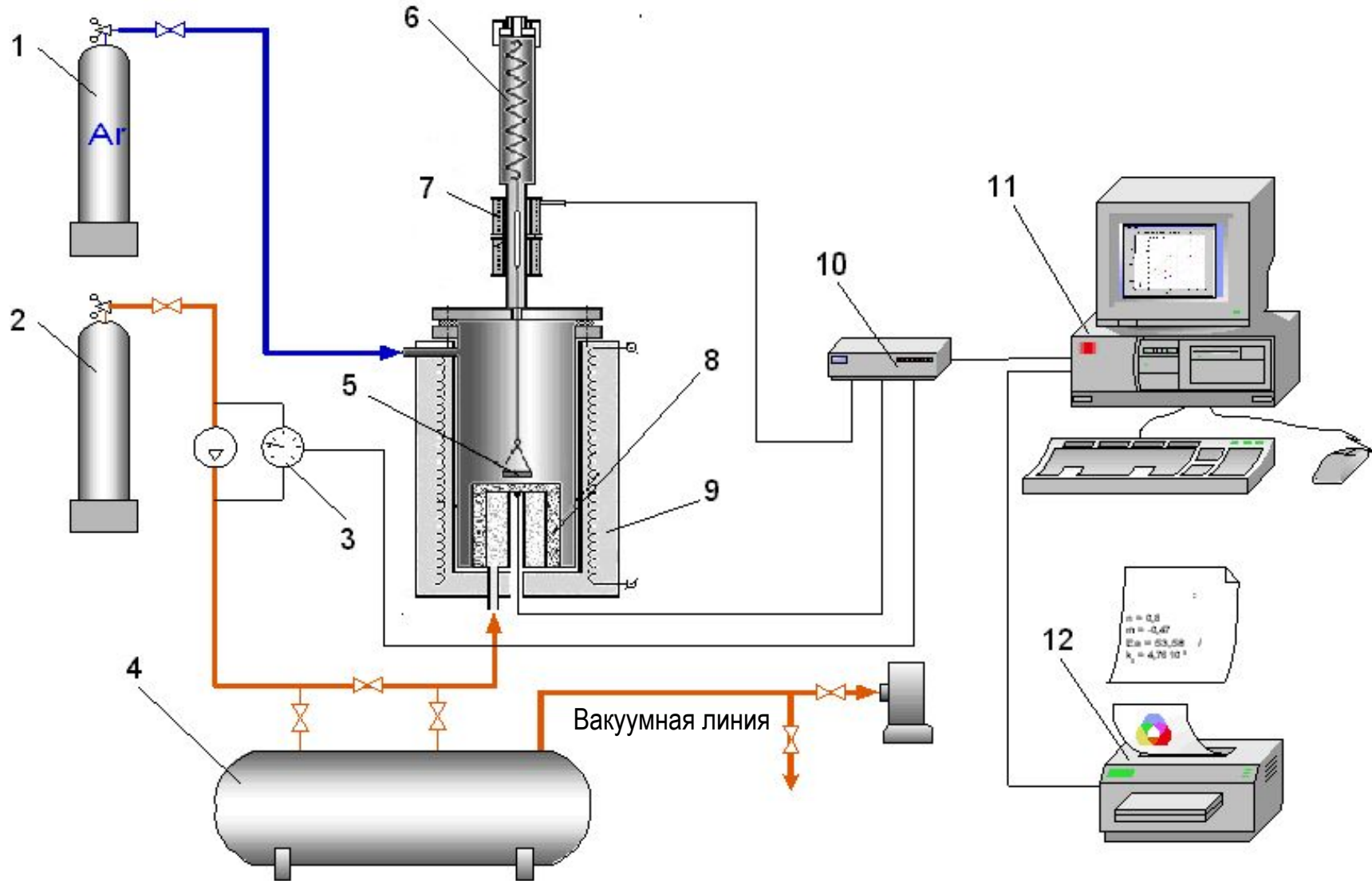
$$\alpha = 1 - e^{-(4,76 \cdot 10^5) \cdot p^{-0,47} \cdot e^{-\frac{53580}{R \cdot T}} \cdot \tau^{0,8}}$$



В ПЕРСПЕКТИВЕ ПЛАНИРУЕТСЯ:

- дополнить программу модулями статистики и автоматического поиска контролирующей стадии процесса на графиках $\alpha = f(\tau)$;
- транслировать текст программы с языка Matlab в исполняемые модули и лицензировать полученный программный продукт.
- организовать ввод исходных данных непосредственно с датчиков экспериментальной установки через контроллер

Установка для исследования кинетики процессов сорбции-десорбции, совмещенная с персональным компьютером



1, 2 - баллоны с газом-адсорбтивом и газом-разбавителем; 3 - прибор контроля давления рабочего газа; 4 - ресивер; 5 - таблетка; 6 - взвешивающая система; 7 - датчик измерения массы; 8 - пористый рассеиватель; 9 - нагреватель; 10 - контроллер; 11 - персональная ЭВМ; 12 - принтер

The background is a dark blue field filled with various shades of blue gears of different sizes, some overlapping. On the left side, there is a vertical strip with a colorful, abstract, and textured appearance, featuring shades of orange, yellow, and purple.

Спасибо за внимание!