

УДК 004.942.41:66.021.3

Т.В. Ганджа, А.О. Ушаков, П.Б. Молоков, И.И. Жерин

РАЗРАБОТКА МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ДЛЯ АППАРАТОВ ЯДЕРНО-ТОПЛИВНОГО ЦИКЛА В СРЕДЕ МОДЕЛИРОВАНИЯ МАРС И ИХ ИНТЕГРАЦИЯ В ВИРТУАЛЬНУЮ ЛАБОРАТОРИЮ

Рассматривается использование среды моделирования МАРС российского производства при решении задачи по разработке моделей аппаратов ядерно-топливного цикла на примере реактора идеального смешения. Описаны основы моделирования и управления реактора идеального смешения, включая математическое описание объекта и используемые параметры. Приведены примеры потенциального использования существующих и планируемых разработок на базе МАРС в различных сценариях и рассмотрено, каким образом оно упрощает решение технических задач. Подтверждена значимость использования методов математического моделирования как эффективного инструмента для разработки и описания сложных технологических объектов и систем.

Ключевые слова: математика, моделирование, модель, химия, технология, экстракция.

Введение

Моделирование позволяет упростить решение сложных задач путем замещения объектов моделями, которые фиксируют наиболее существенные свойства и особенности этих объектов. Модель объекта/процесса становится основой для его управления, которое позволяет упростить и оптимизировать эти процессы, а также повысить их производительность и эффективность [1].

Настоящая работа проведена совместным коллективом Томского государственного университета систем управления и радиоэлектроники (ТУСУР), Северского технологического института «Национальный ядерный университет «МИФИ»» («СТИ НИЯУ МИФИ») на базе среды моделирования МАРС [2] в рамках создания виртуальной лаборатории, целью которой является проведение практико-ориентированных работ с имитационными моделями компонентов и систем ядерной энергетики. Планируется, что разрабатываемая виртуальная лаборатория будет включать основные аппараты химической промышленности, а также сложные технические управляемые системы (СТУС) на их основе и позволит приобрести широкий спектр профессиональных компетенций по работе с «цифровыми двойниками» реальных объектов управления, в том числе получить первоначальный опыт работы с основными аппаратами ядерной отрасли.

Помимо непосредственной прикладной пользы, актуальность проводимых работ также заключена в том, что в связи с глобальным и стремительным развитием различных информационных систем и быстро меняющейся ситуацией в мире на первый план выходят проблемы организации национального технологического суверенитета, а успешная реализация отечественной информационной продукции и технологий позволит найти к ним решения.

Настоящая работа базируется на основе метода компонентных цепей (МКЦ) [3]. За основу взят обобщенный компонент физико-химической системы с не-

однородными векторными связями [4], при помощи которого создана первая экспериментальная статическая модель реактора идеального смешения в среде моделирования МАРС.

Описание моделируемого объекта

Аппараты химических производств атомной отрасли разнообразны и, как правило, предназначены для решения конкретных задач в сопутствующей им технологии. Одними из самых распространенных аппаратов можно назвать массообменные аппараты, которые успешно и широко применяются при проведении разного рода технологических процессов. При выполнении моделирования подобных аппаратов возникают естественные сложности по определению и расчету некоторых физико-химических параметров, вызванные отсутствием экспериментальных данных или сложностью их получения. В связи с этим наиболее рациональным способом создания соответствующих моделей аппаратов подобного типа с последующей их интеграцией и реализацией в какой-либо платформе является выбор на начальном этапе наиболее простых с технической и расчетно-математической точки зрения объектов моделирования [5].

В рамках проводимых работ моделируемым компонентом был выбран химический реактор идеального смешения (РИС) периодического действия. В качестве основного химического процесса, протекающего в РИС, рассматривалась жидкостная экстракция урана трибутилфосфатом в присутствии азотной кислоты. Предполагалось, что весь процесс протекает в аппарате в отсутствие теплообмена с окружающей средой и при постоянном давлении. Условное обозначение компонента, разрабатываемого с использованием МКЦ, представлено на рис. 1.

Реальный аналог моделируемого объекта представляет собой цилиндрическую емкость с четырьмя технологическими отверстиями для подвода/отвода участвующих в экстракции веществ, а также устройство для перемешивания водной и органической фаз. Как пра-

вило, аппараты типа РИС обладают большим набором положительных технических характеристик, просты в обслуживании и имеют несложную конструкцию, что позволяет наиболее эффективно разрабатывать математические имитационные модели на их основе.

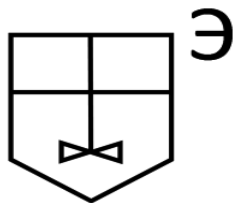


Рис. 1. Условное схематическое изображение реактора идеального смешения

Математическая модель экстракционного процесса

При моделировании процесса экстракции одной из главных задач является определение концентраций компонентов, перешедших в экстракт. В связи с этим необходимо использование соответствующей адекватной модели экстракционного процесса, позволяющей произвести расчет его основных параметров при проведении одноступенчатых или многоступенчатых процессов.

При моделировании РИС и разработке соответствующего компонента в МАРС в качестве основы была взята математическая модель экстракции А.М. Розена. Данная математическая модель использовалась для описания процесса извлечения урана в органическую фазу из азотно-кислого раствора [6]:

$$\begin{cases} y = \frac{1}{2} \left(L_0 - \frac{\sqrt{1+8FL_0} - 1}{4F} \right) \\ F = \frac{f_U}{(1+f_H)^2} \\ f_U = \tilde{k}_U x_U (2x_U + x_{HNO_3})^2 \\ \tilde{k}_U = e^{4,8-5,77(x_{HNO_3}+3x_U)^{0,5}+4,17(x_{HNO_3}+3x_U)-0,712(x_{HNO_3}+3x_U)^{1,5}} \\ f_H = 0,2x_{HNO_3} (2x_U + x_{HNO_3}) \end{cases} \quad (1)$$

где x_U – концентрация урана в водной фазе, моль/л; x_{HNO_3} – концентрация кислоты в водной фазе, моль/л; y – концентрация урана в органической фазе, моль/л; L_0 – исходная концентрация экстрагента, моль/л; $\tilde{k}$ – кажущаяся константа распределения урана.

Концентрация кислоты, перешедшей в процессе массообмена в органическую фазу, может быть определена из уравнения

$$y_{HNO_3} = \frac{(L_0 - 2y)f_H}{1 + f_H}, \quad (2)$$

где y_{HNO_3} – концентрация азотной кислоты в органической фазе, моль/л.

Метод компонентных цепей

Используемый в настоящей работе метод компонентных цепей является универсальным при проведении компьютерного моделирования СТус или отдельных компонентов. МКЦ принадлежит к объектно-ориентированному языковому классу и может применяться в случае моделирования СТус с учетом информационных и энергетических связей. Элементы, обрабатываемые с помощью МКЦ, могут входить в общую комплексную модель системы, но при этом обладать различными физико-химическими свойствами и природой [2].

Использование МКЦ позволяет осуществлять автоматическое конструирование модели для отдельно взятого компонента СТус в качестве системы алгебраических дифференциальных уравнений в обыкновенных/частных производных на базе следующих четырех основных аспектов:

- 1) геометрического (G);
- 2) топологического (T);
- 3) физического (F);
- 4) математического (M).

На рис. 2 представлена схема модели компонента, разработанная на основе четырех аспектов МКЦ.

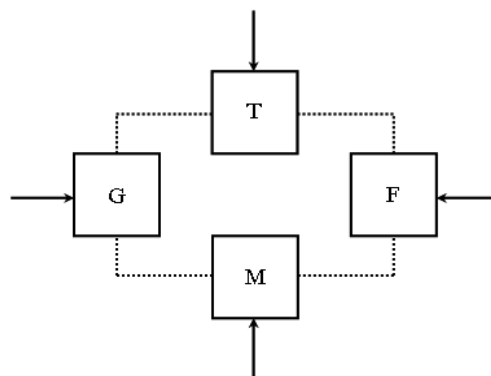


Рис. 2. Схема модели компонента, разработанная на основе четырех аспектов МКЦ

Геометрический аспект (G) включает в себя условное графическое/буквенное обозначение компонента СТус и правила визуализации получаемых результатов на панели управления. Под топологическим аспектом (T) понимается количество, а также тип связей в СТус и их ориентация относительно моделируемого компонента. Типы связей с соответствующими им переменными вводятся в модель согласно типу проводимого моделирования, которое может быть охарактеризовано как математическое, имитационное или визуальное. Физический аспект определяет тип протекаемого физического или физико-химического процесса в моделируемом компоненте СТус, его свойства и параметры. Под математическим аспектом понимается математическое и алгоритмическое описание процесса в компоненте СТус. Формирование математической модели компонента осуществляется в локальном ко-

ординатном базисе в форме системы уравнений, записанных относительно значений параметров и связей в аналогичном физическом координатном базисе. Создаваемая математико-алгоритмическая модель компонента представляет собой совокупность нескольких выражений в явном виде, включающих переменные входных связей, которые в достаточной степени позволяют осуществить расчет значений соответствующих переменных для связей на выходе.

Разрабатываемый компонент, представленный на рис. 1, обладает четырьмя основными типами связей:

- 1) связь, характеризующая подачу в компонент экстрагируемого соединения и примесей SL;
- 2) связь, характеризующая подачу в компонент экстрагента SS;
- 3) связь, характеризующая отвод из компонент рафината SR;
- 4) связь, характеризующая отвод из компонент экстракта SE.

Считая, что в каждом из потоков присутствуют все компоненты, данные связи можно описать в качестве систем векторов соответствующих переменных:

$$\begin{cases} S_L = (n_L \eta^- b_L) \rightarrow \{P_L, G_L, \{T_L, Q_L\}, \{C_L\}\}; \\ S_S = (n_S \eta^- b_S) \rightarrow \{P_S, G_S, \{T_S, Q_S\}, \{C_S\}\}; \\ S_R = (n_R \eta^+ b_R) \rightarrow \{P_R, G_R, \{T_R, Q_R\}, \{C_R\}\}; \\ S_E = (n_E \eta^+ b_E) \rightarrow \{P_E, G_E, \{T_E, Q_E\}, \{C_E\}\}; \end{cases} \quad (3)$$

$$\begin{cases} C_L = \{C_L^U, C_L^{HNO_3}, C_L^{TBP}\} \\ C_S = \{C_S^U, C_S^{HNO_3}, C_S^{TBP}\} \\ C_R = \{C_R^U, C_R^{HNO_3}, C_R^{TBP}\} \\ C_E = \{C_E^U, C_E^{HNO_3}, C_E^{TBP}\} \end{cases}, \quad (4)$$

где n – топологическая координата (узел); b – топологическая координата (ветвь); η – отношение инцидентности ветви b к узлу n ; P – давление в системе, Па; G – мольный расход вещества, моль/с; T – температура, К; Q – количество теплоты, Дж; C – концентрация вещества, моль/л.

Разработка и реализация модели компонента в среде моделирования MAPS

Разработка модели компонента производилась с использованием языка C++ как одного из наиболее распространенных программных языков.

В процессе разработки компоненту было присвоено название «РИС-Э» и реализована возможность вывода числовых и графических данных на интерфейс визуализации MAPS. Данный компонент был интегрирован в схему автоматизации, представленной на рис. 3, позволяющей контролировать значения расходов R_i и концентраций C_i . К компоненту были подведены две линии входных потоков раствора L и экстрагента S , а

также имелись две линии для отвода рафината R и экстракта E и подведенные к каждой из них датчики контроля заданных параметров. Температура и давление были постоянными, их влияние не рассматривалось, но в схеме присутствует возможность их регулирования после доработки модели основного компонента.

Запуск модели позволяет получить данные о ходе протекания экстракционного процесса и показывает начальные и конечные значения концентраций основных веществ, участвующих в процессе, включая уран, азотную кислоту и трибутилфосфат, а также осуществлять их регулировку путем изменения входных параметров процесса.

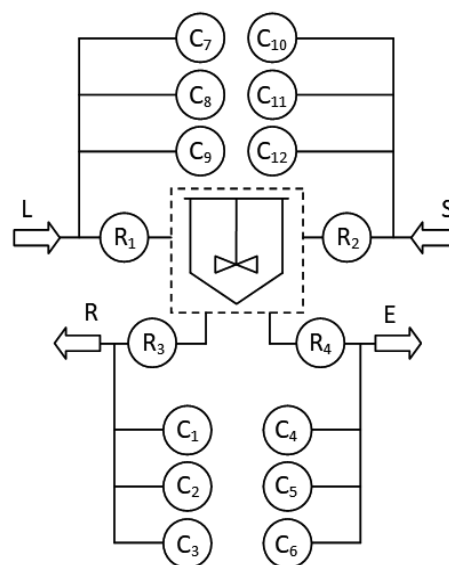


Рис. 3. Схема модели компонента, интегрированного в схему автоматизации с контролируемыми параметрами

При необходимости имеется возможность вывода данных в виде графика, что представлено на рис. 4. Однако, ввиду того что лежащая в основе компонента модель является статической, осуществить построение возможно только по конкретным точкам при различных условиях проводимого эксперимента.

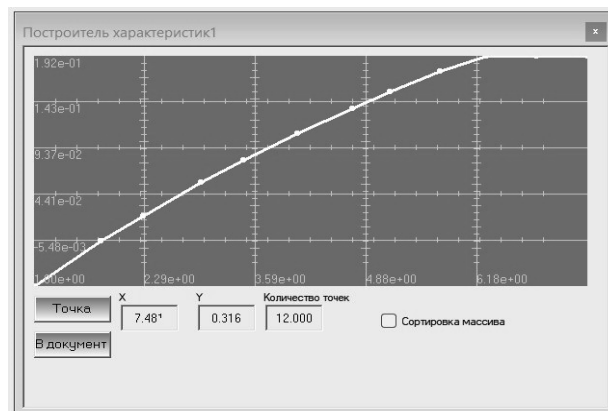


Рис. 4. Построение графика результатов обработки данных, полученных с использованием разработанного компонента «РИС-Э» в визуальном интерфейсе MAPS

Заключение

Дальнейшее проведение работ в данном направлении позволит осуществить разработку и полноту реализации идей, которые будут использованы при создании виртуальной лаборатории. Подтверждена возможность использования среды всестороннего программного моделирования MARS для разработки имитационных моделей аппаратов ядерной отрасли и сложных физико-химических систем, в связи с чем предлагается осуществить проведение дополнительных работ по созданию более сложных и комплексных моделей для более широкого спектра оборудования.

Разработка и использование нового отечественного программного обеспечения при проведении работ позволяет обеспечить дальнейшее развитие научно-технологического потенциала, в том числе и в области импортозамещения иностранных программных продуктов.

Литература

1. Новосельцев В.Н. Достоинства и недостатки математического моделирования // Фундаментальные исследования. 2004. № 6. С. 121–122.
2. Дмитриев В.М., Ганджа Т.В. Среда многоуровневого компьютерного моделирования химико-технологических систем. Томск: Изд-во Том. ун-та, 2017. 332 с.
3. Дмитриев В.М., Арайс Л.А., Шутенков А.В. Автоматизация моделирования промышленных роботов. М.: Машиностроение, 1995. 304 с.
4. Дмитриев В.М., Ганджа Т.В., Важеннин С.К. Принципы построения моделей сложных технологических объектов с неоднородными векторными связями // Современные технологии. Системный анализ. Моделирование. 2014. № 1 (41). С. 104–111.
5. Шимова Ю.С., Демиденко Н.Ю., Лис Е.В. Моделирование химико-технологических процессов: учеб. пособие. Красноярск: СибГУ им. М.Ф. Решетнева, 2021. 94 с.
6. Розен А.М. Термодинамика экстракционных равновесий уранилнитрата // Атомная энергия. 1957. Т. 2, № 5. С. 445–458.

Ганджа Тарас Викторович

Д-р техн. наук, профессор, профессор каф. компьютерных систем в управлении и проектировании (КСУП) Томского государственного университета систем управления и радиоэлектроники («ТУСУР»)
Ленина пр-т, д. 40, г. Томск, Россия, 634050
ORCID (0000-0002-4996-8114)
Тел.: +7 (3822) 41-39-15
Эл. почта: gandgatv@gmail.com

Ушаков Александр Олегович

Аспирант отделения ядерно-топливного цикла (ОЯТЦ) Томского политехнического университета (ТПУ)
Ленина пр-т, д. 30, г. Томск, Россия, 634050
Инженер-исследователь Северского технологического института «Национального ядерного университета «МИФИ»» («СТИ НИЯУ МИФИ»)
Коммунистический пр-т, д. 65, г. Северск, Россия, 636036
Тел.: +7 (952) 896-99-19

Эл. почта: lalexander6@mail.ru

Молоков Петр Борисович

Канд. техн. наук, доцент, каф. химии и технологии материалов современной энергетики (ХиТМСЭ) Северского технологического института «Национального ядерного университета «МИФИ»» («СТИ НИЯУ МИФИ»)
Коммунистический пр-т, д. 65, г. Северск, Россия, 636036
Тел.: +7 (4957) 88-56-99
Эл. почта: pbmolokov@mephi.ru

Жерин Иван Игнатьевич

Д-р хим. наук, профессор, профессор отделения ядерно-топливного цикла (ОЯТЦ) Томского политехнического ун-та (ТПУ)
Ленина пр-т, д. 30, г. Томск, Россия, 634050
Phone: +7 (3822) 60-63-11
Email: gerinii@tpu.ru

Gandzha T.V., Ushakov A.O., Molokov P.V., Zherin I.I.

Development of Mathematical Models for Nuclear Fuel Cycle Devices in MARS Modeling Environment and Their Integration into a Virtual Laboratory

The use of the Russian-made MARS modeling environment when solving the problem of developing models of nuclear fuel cycle devices with using the example of an ideal mixing reactor is presented. The basics of modeling and control of the ideal mixing reactor, including a mathematical description of the object and used parameters are described. Examples of the potential use of existing and planned developments based on MARS in various scenarios and how it simplifies the solution of technical problems are given. The importance of using mathematical modeling methods as an effective tool for the development and description of complex technological objects and systems is noted.

Keywords: mathematics, modeling, model, chemistry, technology, extraction.

References

1. Novoseltsev VN. Dostoinstva i nedostatki matematicheskogo modelirovaniya [Advantages and disadvantages of mathematical modeling]. Fundamentalnye issledovaniya [Fundamental Research]. 2004;(6):121–122. (In Russ.)
2. Dmitriev VM, Gandzha TV. Sreda mnogourovnevnogo kompyuternogo modelirovaniya [Environment for multilevel computer modeling of chemical-technological systems]. Tomsk: TSU Publishing House; 2017. (In Russ.)
3. Dmitriev VM, Arais LA, Shutenkov AV. Avtomatizatsiya modelirovaniya promyshlennykh robotov [Automation of modeling of industrial robots]. M.: Mashinostroenie; 1995. (In Russ.)
4. Dmitriev VM, Gandzha TV, Vazhenin SK. Principy postroeniya modelej slozhnykh tekhnologicheskikh ob"ektov s neodnorodnymi vektornymi svyazyami. [Principles of constructing models of complex technological objects with heterogeneous vector connections]. Sovremennye tekhnologii. Sistemyj analiz. Modelirovanie [Modern technologies. System analysis. Modeling]. 2014;1(41):104–111. (In Russ.)
5. Shimova YuS, Demidenko NYu, Lis EV. Modelirovanie khimiko-tekhnologicheskikh protsessov [Modeling of chemical-technological processes]. Krasnoyarsk: Siberian State University named after M. F. Reshetneva; 2021. (In Russ.)

6. Rozen AM. Thermodynamica extraxtsionnih ravnovesiy uranyl nitrata [Thermodynamics of extraction equilibria of uranyl nitrate]. Atomnaya Energia [Atomic energy]. 1957; 2(5):445–458. (In Russ.)

Taras V. Gandzha

Doctor of Engineering Sciences, Professor, Department of Computer Control and Design Systems, Tomsk State University of Control Systems and Radioelectronics (TUSUR)
40, Lenin prosp., Tomsk, Russia, 634050
ORCID (0000-0002-4996-8114)
Phone: +7 (382-2) 41-39-15
Email: gandgatv@gmail.com

Alexander O. Ushakov

Third-year postgraduate student, Nuclear Fuel Cycle Department, Tomsk Polytechnic University (TPU)
30, Lenin prosp., Tomsk, Russia, 634050
Research engineer, Department of Technologies and Materials of Modern Energy, Seversk Technological Institute ‘National

Research Nuclear University’ (MEPHI)

65, Kommunistichesky prosp., Seversk, Tomsk region, Russia, 636036

Phone: +7 (952-8) 96-99-19

Email: lalexander6@mail.ru

Petr B. Molokov

Candidate of Engineering Sciences, Assistant Professor, Department of Technologies and Materials of Modern Energy, Seversk Technological Institute ‘National Research Nuclear University’ (MEPHI)

65, Kommunistichesky prosp., Seversk, Tomsk region, Russia, 636036

Phone: +7 (495-7) 88-56-99

Email: pbmolokov@mephi.ru

Ivan I. Zherin

Doctor of Chemical Sciences, Professor, Department of Nuclear Fuel Cycle, Tomsk Polytechnic University (TPU)

30, Lenin prosp., Tomsk, Russia, 634050

Phone: +7 (382-2) 60-63-11

Email: gerinii@tpu.ru