УДК 681.5+004.942

В.М. Дмитриев, Т.В. Ганджа, Ю.А. Шурыгин, А.О. Ушаков

Автоматизация и управление технологическим процессом экстракционной очистки актиноидов

Рассмотрены основные задачи автоматизации и управления технологическим процессом экстракционной очистки актиноидов, а также представлен подход к моделированию экстракционной колонны в формате метода блочно-компонентных цепей (МБКЦ) в среде моделирования МАРС (моделирование и автоматический расчет систем) и автоматизации экстракционного процесса с учетом различных воздействий. При моделировании колонного аппарата для описания экстракционного процесса за основу была взята диффузионная модель, позволяющая учитывать условия массопереноса. Полученные результаты подтверждают возможность использования метода блочно-компонентных цепей для моделирования сложных химико-технологических систем и аппаратов с последующей интеграцией модели в автоматизированную систему управления (АСУ) для оптимизации и повышения эффективности технологических процессов.

Ключевые слова: анализ, моделирование, автоматизация, метод блочно-компонентных цепей, экстракционная колонна, массоперенос.

DOI: 10.21293/1818-0442-2025-28-3-66-72

Экстракционные колонны широко распространены и применяются в различных областях химической промышленности, включая нефтехимическое производство и ядерную промышленность. Моделирование подобных аппаратов как по отдельности, так и в составе условной автоматизированной химико-технологической системы традиционными методами часто сопряжено с высокой вычислительной сложностью и недостаточной гибкостью существующих программных средств моделирования при наличии большого числа параметров процесса. В качестве решения данной проблемы предлагается использовать подход, основанный на применении метода блочно-компонентных цепей посредством разбиения химико-технологической системы на отдельные элементы-блоки, взаимодействие между которыми описывается специальными связями.

Классический процесс экстракции в колонном аппарате может быть трудоемким и требующим многих вспомогательных операций. Для повышения стабильности, эффективности и уменьшения времени, затрачиваемого на проведение технологического процесса, производится разработка и реализация автоматизированных систем управления. При построении соответствующей АСУ возникает необходимость создания или использования моделей процессов, устройств и аппаратов химико-технологической системы [1–5]. Так как модели большинства массообменных аппаратов подразумевают наличие нелинейных зависимостей для различных параметров и переменных технологического процесса, таких как температура, давление, концентрация, то использование метода моделирования, способного наиболее точно и понятно описывать динамику соответствующих физико-химических процессов и взаимодействия компонентов системы друг с другом, становится особенно актуальным.

Применение МБКЦ в данном случае является одним из наиболее оптимальных способов решения подобной задачи [6]. Благодаря структуре неоднородной векторной связи, лежащей в основе данного метода, обеспечивается гибкость интеграции разработанных моделей в среду моделирования с последующей реализацией в АСУ.

В настоящей статье в качестве основы для моделирования была выбрана противоточная экстракционная колонна, в которой производится экстракция урана, изначально находящегося в составе азотнокислого уранила, в присутствии высаливателя (азотная кислота) и экстрагента (трибутилфосфат). Модель учитывает массоперенос, позволяет строить профиль концентрации урана по длине колонны, а также временные зависимости для изменения концентраций урана в водной и органической фазах. Упрощенная схема колонны приведена на рис. 1.

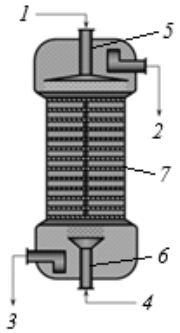

Рис. 1. Упрощенная схема экстракционной противоточной колонны:
1, *3* – потоки водной фазы на входе и выходе; *2*, *4* – потоки органической фазы на выходе и входе; *5*, *6* – распределители фаз; *7* – насадочный элемент

За основу для разработки данного блока был взят реальный аналог существующей экстракционной установки Сибирского химического комбината (АО «СХК»). Моделирование колонны осуществлялось в среде «Моделирование и автоматический расчет систем» (МАРС) [7–10].

Математическое описание процесса экстракционной очистки актиноидов на примере экстракции урана

В случае с условным реальным аппаратом предполагается, что основными контролируемыми переменными рассматриваемого блока будут выступать концентрация экстрагируемых веществ, расход, температура и давление.

Диффузионная математическая модель, взятая за основу для дальнейшего использования и реализованная в формате МБКЦ применительно к процессу экстракции в противоточной колонне, позволяет описывать конвективный массоперенос потоков водной и органической фаз по длине колонны, массообмен между фазами, а также учитывает продольную диффузию [11–13].

Дифференциальные уравнения (1) и (2), ранее рассмотренные в работе [12], при объединении в систему позволяют описывать динамику изменения концентрации целевого компонента в водной и органической фазах по продольному сечению колонны:

$$\frac{\delta\left(x_i\varphi\right)}{\delta t}=-\frac{\delta\left(v_x x_i\varphi\right)}{\delta z}+\frac{\delta}{\delta z}D_x\frac{\delta\left(x_i\varphi\right)}{\delta z}-k_x\left(x_i-x_i^P\right), \quad (1)$$

$$\frac{\delta\left[y_i\left(1-\varphi\right)\right]}{\delta t}=\frac{\delta\left[v_y y_i\left(1-\varphi\right)\right]}{\delta z}+\frac{\delta\left[y_i\left(1-\varphi\right)\right]}{\delta z}\times$$

$$\times\frac{\delta}{\delta z}D_y+k_y\left(y_i^P-y_i\right), \quad (2)$$

где x_i – концентрация целевого компонента в водной фазе; φ – задержка фазы; t – абсолютное время; v_x – скорость движения водной фазы; z – координата вдоль движения потоков фаз по длине колонны; D_x – коэффициент диффузии для водной фазы; k_x – коэффициент массопередачи для водной фазы; $x^P{}_i$ – равновесная концентрация целевого компонента в водной фазе; y_i – концентрация целевого компонента в органической фазе; v_y – скорость движения органической фазы; D_y – коэффициент диффузии для органической фазы; k_y – коэффициент массопередачи для органической фазы; $y^P{}_i$ – равновесная концентрация целевого компонента в органической фазе.

Для решения подобных уравнений целесообразно использовать соответствующие численные методы в совокупности с граничными условиями Дирихле.

Математическая модель экстракционной колонны, представленная уравнениями (1) и (2) в частных производных по координате вдоль движения потоков фаз по длине колонны, является нелинейной из-за наличия коэффициентов массопередачи и равновесных концентраций. Прямое использование модели в СМ МАРС для синтеза систем управления без проведения линеаризации было бы затруднено без проведения линеаризации из-за сложности анализа и значительных вычислительных затрат, необходимых для расчета в реальном времени и последующей передачи в контроллер.

В настоящей работе при решении подобной задачи использовался метод конечных разностей, в соответствии с которым уравнения (1) и (2) приобретают форму (3) и (4):

$$\frac{\varphi\delta\left(x^j\right)}{\delta t}=\left(x^{j+1}-2x^j+x^{j-1}\right)\frac{D_x\varphi}{\Delta z^2}-\left(x^j-x^{j-1}\right)\times$$

$$\times\frac{v_x\varphi}{\Delta z}-k_x\left(x^j-x_i^P\right), \quad (3)$$

$$\frac{\left(1-\varphi\right)\delta\left(y^j\right)}{\delta t}=\frac{\left(1-\varphi\right)}{\Delta z^2}\left(y^{j+1}-2y^j+y^{j-1}\right)\times$$

$$\times D_y+\frac{\left(1-\varphi\right)}{\Delta z}\left(y^{j+1}-y^j\right)v_y+k_y\left(y_i^P-y^j\right). \quad (4)$$

При проведении начальных исследований работоспособности модели данные уравнения системы записывались в статическом виде (5) и (6):

$$\left(\frac{D_x}{\Delta z^2}+\frac{v_x}{\Delta z}\right)x^{j-1}+\left(-\frac{2D_x}{\Delta z^2}-\frac{v_x}{\Delta z}-k_x\right)x^j+\frac{D_x}{\Delta z^2}\times$$

$$\times x^{j+1}+k_x x_i^P=0, \quad (5)$$

$$\left(\frac{D_y}{\Delta z^2}+\frac{v_y}{\Delta z}\right)y^{j+1}+\left(-\frac{2D_y}{\Delta z^2}-\frac{v_y}{\Delta z}-k_y\right)y^j+\frac{D_y}{\Delta z^2}\times$$

$$\times y^{j-1}+k_y y_i^P=0. \quad (6)$$

Дискретизация по времени производилась с применением универсального вычислительного ядра [9]. Выбор рабочих точек осуществлялся на основе экспериментальных данных экстракционных процессов [13], а также данных, полученных ранее на АО «СХК». Равновесная концентрация целевого компонента-вещества в соответствующей фазе может определяться исходя из данных о коэффициенте распределения [14, 15] или при помощи изотермы экстракции [11, 12, 16, 17].

Целевым компонентом выступал уран в составе азотнокислого уранила. В качестве начальных исследуемых параметров экстракции принимались следующие значения. Концентрация урана во входном потоке водной фазы составляла 300 г/л, содержание трибутилфосфата в органической фазе – 30%, коэффициент массопередачи для азотнокислого уранила в водной фазе – $7{,}5\cdot10^{-6}$ 1/с, в органической фазе – $1{,}5\cdot10^{-6}$ 1/с. Длина колонны составляла 11,45 м, диаметр – 1,23 м.

Постановка задач автоматизации и управления технологическим процессом

В качестве основных задач при проведении автоматизации и функциональном проектировании автоматизированных систем управления химико-технологическими системами экстракционного разделения и очистки будут выступать:

1. Определение, идентификация и формирование соответствующих адекватных моделей химико-технологической системы, а также отдельных моделей ее аппаратов, устройств измерения и контроля основных параметров и характеристик. Математически данная задача будет описываться через минимизацию соответствующей функции (7):

$$f(p)=\sum_{i=1}^{N}\left(v_i(p)-v_i^*\right)^2\to\min, \qquad (7)$$

где $v_i(p)$ – значение переменной в модели; v_i^* – значение аналогичной характеристики реальной системы; N – количество характеристик.

2. Анализ протекающих в химико-технологической системе процессов с учетом влияния на нее оказываемых возмущающих воздействий. Математически описывается через временную функцию (8):

$$v(t)=v(t,p). \qquad (8)$$

3. Функциональное проектирование химико-технологической системы путем варьирования и подбора оптимальных параметров и режимов работы, обеспечивающих ее полное и качественное функционирование. Математически описывается как минимизация целевой функции (9):

$$f(p^*)=\sum_{i=1}^{N}\left(v_i^*-v_i(p^*)\right)^2\to\min, \qquad (9)$$

где p^* – значение параметров, при которых обеспечивается необходимая точность системы.

4. Поиск и исправление ошибок в сценариях управления главного управляющего устройства в соответствии с целями проводимых вычислительных экспериментов и исследований химико-технологической системы. Описывается минимизацией функции, аналогичной (9).

Автоматизация и расчет блока экстракционной колонны

В соответствии с основными положениями МБКЦ, моделирование экстракционной колонны осуществляется путем разработки ее цифрового аналога в виде блока с заранее определенным количеством входных и выходных связей, состоящих из соответствующих узлов $n_{\text{ВХ}_n1}$, $n_{\text{ВЫХ}_n2}$ и ветвей $b_{\text{ВХ}_n1}$, $b_{\text{ВЫХ}_n2}$. Данные связи описывают характер взаимодействия основного блока с остальными элементами химико-технологической системы с учетом геометрических и технологических особенностей аппаратов, а также вещественных потоков и их физико-химических свойств.

При моделировании по МБКЦ производится автоматическое построение вычислительной модели блока на основе его связей и присвоении узлам и ветвям соответствующих номеров.

В процессе составления вычислительной модели все дифференциальные уравнения приводятся к алгебраическому виду, а нелинейные – к линейному с последующим составлением единого вектора решения для отдельного блока или для цепи из нескольких блоков.

Обобщенная схема блока экстракционной колонны с многокомпонентными потоками приведена на рис. 2.

Единый вектор решения для модели блока экстракционной колонны, включающий в себя совокупность векторов значений переменных основных параметров экстракционного процесса, таких как концентрации, расходы, температура и др., описывается через соответствующее уравнение [7].

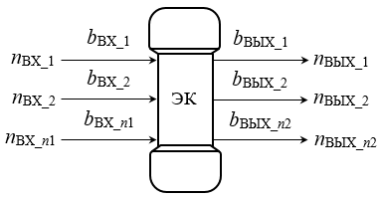

Рис. 2. Обобщенная схема модели блока экстракционной колонны в формате МБКЦ

Функциональная схема автоматизации для блока экстракционной колонны приведена на рис. 3.

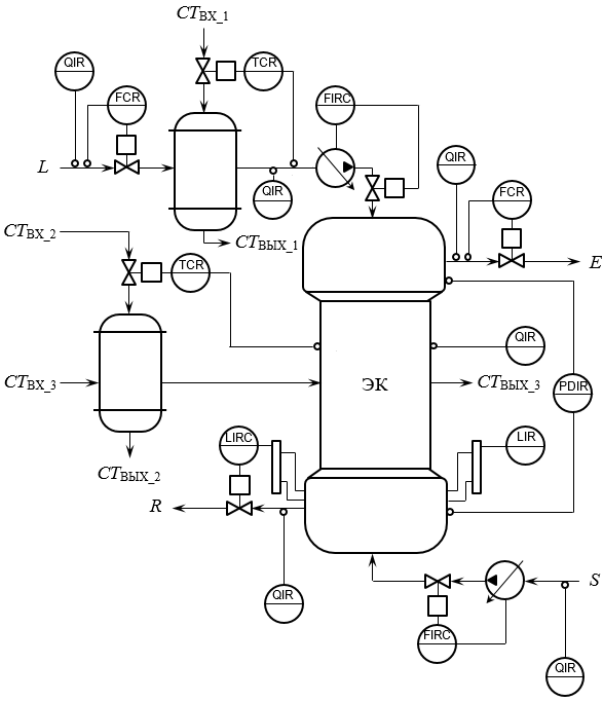

Рис. 3. Функциональная схема автоматизации экстракционной колонны: L – поток водной фазы; S – поток органической фазы; E – экстракт; R – рафинат; $CT_{\text{ВХ}}$ – входной поток теплоносителя; $CT_{\text{ВЫХ}}$ – выходной поток теплоносителя; ЭК – экстракционная колонна

Блочно-компонентная цепь в наиболее простом исполнении включает в себя основной блок экстракционной колонны, подходящие вещественные потоки, измерительные и управляющие устройства [6].

При разработке модели-блока экстракционной колонны общая схема управления будет иметь в своем составе модули, отвечающие непосредственно за взаимодействие оператора с цифровым двойником экстракционной колонны через устройство управления с учетом информации об имеющихся аналогах, а также потенциальное взаимодействие с реальным технологическим объектом (рис. 4).

Формирование компьютерной модели объекта управления, включающей в себя модели исполнительных и измерительных устройств, осуществляется на основе заданных параметров и переменных ее элементов. Подобная структура позволит получать результаты вычислительного эксперимента и обра-

ботки данных о работе реального аппарата в различных режимах, а также контролировать ход технологического процесса путем изменения отдельных его параметров.

Вся относящаяся к блоку информация, в том числе его геометрические параметры, данные о режиме проведения процесса экстракции и характеристики веществ, участвующих в процессе, заносятся в общую базу данных для последующего использования в расчете параметрических коэффициентов.

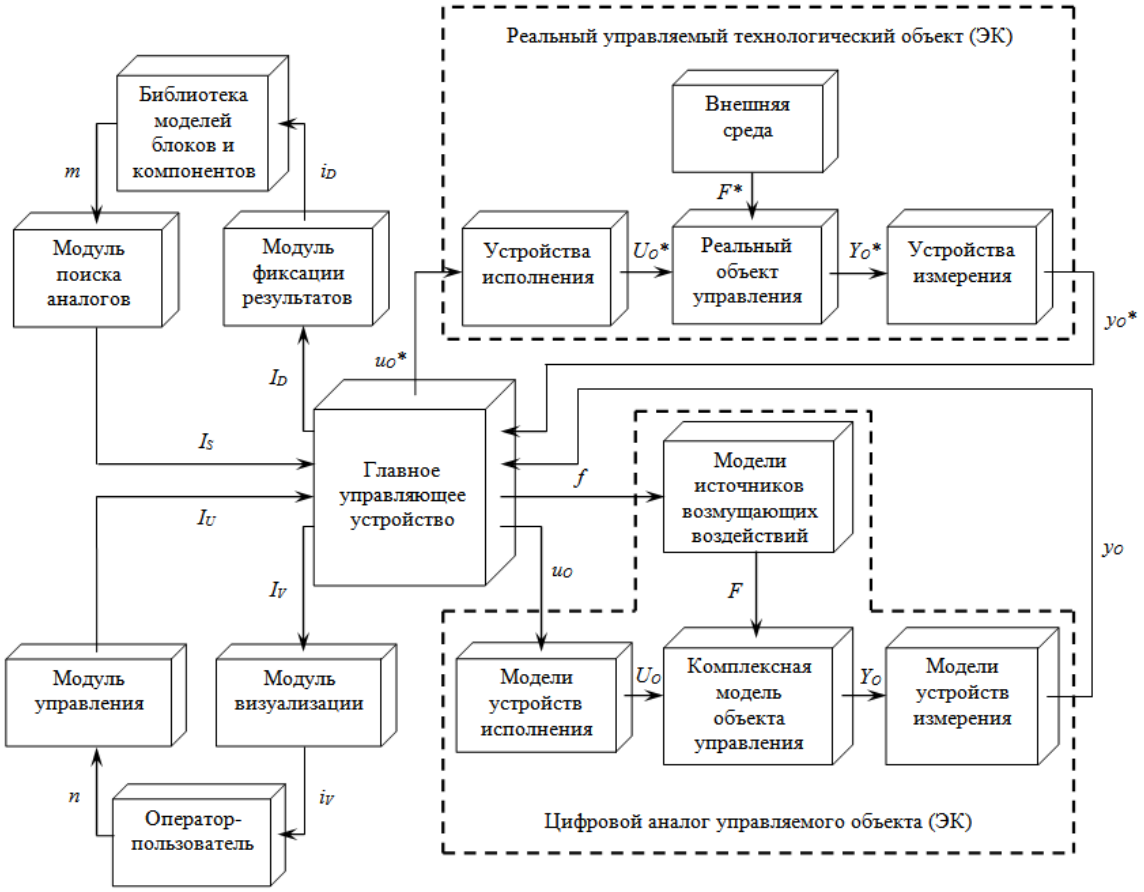

Рис. 4. Общая схема управления блоком Колонна-Э (ЭК): m – массив данных об имеющихся аналогах; I_S – информация об имеющихся аналогах; I_D – информация о работе реального объекта и цифрового двойника, предназначенная для библиотеки компонентов; i_D – цифровая передача данных в библиотеку компонентов; n – указания оператора; I_U – информация об указаниях оператора; I_V – информация о работе реального объекта и цифрового двойника, предназначенная для оператора; i_V – визуальная передача данных оператору; u_O^*, u_O – сигналы главного устройства управления; U_O^*, U_O – управляющие воздействия; f – параметры возмущающих воздействий; F^*, F – возмущающие воздействия; Y_O^*, Y_O – данные реального аппарата и его цифрового двойника, подлежащие измерению; y_O^*, y_O – информация, полученная в процессе мониторинга средств измерения

Согласно схеме из рис. 4, главное управляющее устройство осуществляет сбор и анализ результатов, полученных в процессе моделирования работы химико-технологической системы, включая данные измерения и контроля основных параметров процесса.

Главное управляющее устройство, анализируя модель колонны, позволяет в реальном времени сравнивать результаты моделирования и измерения, оперативно сигнализировать оператору об изменениях в реальном объекте. Используемая модель в данном случае может применяться для выявления управляющих воздействий на реальный технологический объект – экстракционную колонну с целью определения оптимального режима проведения экстракционного процесса и минимизации расхода высаливателя и экстрагента, максимизации степени извлечения по целевому компоненту.

Устройство управления, являясь основным связующим узлом, обеспечивает обработку сигналов, полученных с модулей управления, поиска аналогов и измеряющих устройств, передачу необходимой информации в модули визуализации и фиксации результатов.

Модуль управления является совокупностью программно-технических средств, обеспечивающих передачу управляющих воздействий от оператора к главному устройству управления химико-технологической системой с соответствующего интерфейса.

Модуль поиска аналогов представляет собой элемент системы, при помощи которого из единой библиотеки ранее разработанных моделей блоков и компонентов производится выбор наиболее подходящей модели для данных условий вычислительного эксперимента.

Посредством модуля фиксации результатов осуществляется автоматизированная подготовка и формирование отчета о проделанных вычислительных экспериментах, передача информации о функционировании химико-технологической системы в процессе исследований в библиотечную базу данных блоков и компонентов.

В модуль визуализации входят средства и инструментарий, позволяющие отображать изменения характеристик и свойств химико-технологической системы в процессе исследований и вычислительных экспериментов с соответствующими моделями на специальном интерфейсе управления.

Заключение

В рамках настоящей статьи сформулированы ключевые задачи автоматизации и управления технологического процесса экстракционной очистки актиноидов. В работе отражены основные аспекты интеграции моделей экстракционного процесса в единую автоматизированную химико-технологическую систему. Предложены схемы интеграции математических моделей и реальных технологических систем в единую автоматизированную систему управления химико-технологическим процессом.

Использование полученных результатов позволит создать интеллектуальную систему управления и определять оптимальные режимы проведения экстракционного процесса и осуществлять прогнозирование изменений его основных параметров в условиях многостадийности и нелинейности.

Перспективы дальнейших исследований заключаются в реализации предложенных схем на практике с использованием промышленных автоматизированных систем управления технологическими процессами, внедрении алгоритмов предиктивного и нечеткого управления для компенсации возмущений, а также в разработке цифровых двойников экстракционного узла. В дальнейшем это потенциально позволит перейти к полному автоматизированному и интеллектуальному управлению, что является актуальной задачей в области повышения эффективности и рентабельности процессов переработки и очистки актиноидов.

Литература

1. Дмитриев В.М. Автоматизация моделирования промышленных роботов / В.М. Дмитриев, Л.А. Арайс, А.В. Шутенков. – М.: Машиностроение, 1995. – 304 с.

2. Кафаров В.В. Математические основы автоматизированного проектирования химических производств: Методология проектирования и теория разработки оптимальных технологических схем / В.В. Кафаров, В.П. Мешалкин, В.Л. Перов. – М.: Химия, 1979. – 320 с.

3. Garcia H. Modeling, analysis, and optimization of complex nuclear processes and facilities via computational methods: The HALEU process case study / H. Garcia, M. Patterson, R. Carlson // Progress in Nuclear Energy, 2023. – Vol. 167. – P. 104993. DOI: https://doi.org/10.1016/j.pnucene.2023.104993.

4. Ганюков А.А. Математическое моделирование процесса диффузии и кинетики массопереноса веществ в различных средах / А.А. Ганюков, И.А. Кадырова, А.С. Кадыров, Д.Д. Маратов // Международный журнал прикладных и фундаментальных исследований. – 2021. – № 4. – С. 86–91.

5. Vanel V. Predictive functional control for separation processes by liquid-liquid extraction / V. Vanel, J. Mallet, B. Dinh, S. Michaud, M. Montuir, F. Vilpini // Frontiers in Chemical Engineering. – 2024. – Vol. 5. – P. 1294784. DOI: 10.3389/fceng.2023.1294784

6. Дмитриев В.М. Метод блочно-компонентных цепей и его перспективы в компьютерном моделировании химико-технологических систем / В.М. Дмитриев, Т.В. Ганджа, А.О. Ушаков // Доклады ТУСУР. – 2024. – Т. 27, № 4. – С. 116–121. DOI: 10.21293/1818-0442-2024-27-4-116-121.

7. Дмитриев В.М. Принципы построения моделей сложных технологических объектов с неоднородными векторными связями / В.М. Дмитриев, Т.В. Ганджа, С.К. Важенин // Современные технологии. Системный анализ. Моделирование. – 2014. – Т. 41, № 1. – С. 104–111.

8. Зайченко Т.Н. Схемотехническое моделирование электротехнических устройств в задачах исследования и обучения // Известия вузов. Физика. – 2006. – Т. 49, № S9. – С. 196–201.

9. Дмитриев В.М. Архитектура универсального вычислительного ядра для реализации виртуальных лабораторий / В.М. Дмитриев, А.В. Шутенков, Т.В. Ганджа // Приборы и системы. Управление, контроль, диагностика. – 2004. – № 2. – С. 24–28.

10. Дмитриев В.М. Среда многоуровневого компьютерного моделирования химико-технологических систем / В.М. Дмитриев, Т.В. Ганджа. – Томск: Изд-во Том. ун-та, 2017. – 332 с.

11. Носков М.Д. Физико-математическая модель экстракционной переработки концентрата урана в каскаде противоточных колонн / М.Д. Носков, А.Д. Истомин, А.С. Козырев // Известия Том. политехн. ун-та. Химия. – 2007. – Т. 311, № 3. – С. 10–14.

12. Ушаков А.О. Исследование влияния расхода питающего раствора на аффинаж урана в каскаде экстракционных колонн / А.О. Ушаков, И.И. Жерин, А.В. Мулимова, М.Д. Носков // Атомная энергия. – 2023. – Т. 135, № 1–2. – С. 31–35.

13. Горюнов А.Г. Динамическая модель многокомпонентного неравновесного экстракционного процесса в пульсационной колонне / А.Г. Горюнов, С.Н. Ливенцов // Радиохимия. – 2011. – Т. 53, № 3. – С. 237–241.

14. Giusti F. Solvent extraction of uranium from an acidic medium for the front-end of nuclear fuel cycle: from mechanisms understanding to innovative process design / F. Giusti, E. Guerinoni, D. Lemire, M. Thimotée, G. Arrachart, S. Dourdain, S. Pellet-Rostaing // Comptes Rendus. Chimie. – 2024. – Vol. 27. – Spec. Iss. S4. – P. 153–183.

15. Chen H. Distribution coefficient model for zirconium and technetium extraction from nitric acid solution / H. Chen, M. Jobson, R.J. Taylor, D.A. Woodhead, A.J. Masters, C.A. Sharrad // Industrial & Engineering Chemistry Research. – 2021. – Vol. 61, No. 1. – P. 786–804.

16. Srivastava V. Design of Multi-Stage Solvent Extraction Process for Separation of Rare Earth Elements / V. Srivastava, J. Werner, R. Honaker // Mining. – 2023. – Vol. 3, No. 3. – P. 552–578.

17. Turgeon K., Boulanger, J., Bazin C. Simulation of Solvent Extraction Circuits for the Separation of Rare Earth Elements // Minerals. – 2023. – Vol. 13, No. 714. – P. 1–24.

Дмитриев Вячеслав Михайлович
Д-р техн. наук, проф. каф. компьютерных систем
в управлении и проектировании (КСУП)
Томского государственного ун-та
систем управления и радиоэлектроники (ТУСУР)
Ленина пр-т, 40, г. Томск, Россия, 634050
ORCID: 0000-0002-1089-6993
Тел.: +7 (382-2) 70-15-15
Эл. почта: dmitriewvm@gmail.com

Ганджа Тарас Викторович
Д-р техн. наук, проф. каф. КСУП ТУСУРа
Ленина пр-т, 40, г. Томск, Россия, 634050
ORCID: 0000-0002-4996-8114
Тел.: +7 (382-2) 41-39-15
Эл. почта: gandgatv@gmail.com

Шурыгин Юрий Алексеевич
Д-р техн. наук, член-корр. Международной академии наук, советник при ректорате по комплексным вопросам функционирования ТУСУРа
Ленина пр-т, 40, г. Томск, Россия, 634050
ORCID: 0000-0001-8819-0694
Тел.: 8 (382-2) 70-15-15
Эл. почта: office@kcup.tusur.ru

Ушаков Александр Олегович
Инж.-исследователь Северского технологического ин-та Национального ядерного университета МИФИ
Коммунистический пр-т, 65, г. Северск, Россия, 636036
Тел.: +7-952-896-99-19
Эл. почта: 1alexander6@mail.ru

Поступила в редакцию: 17.09.2025.
Принята к публикации: 25.11.2025.

Dmitriev V.M., Gandzha T.V., Shurygin Y.A., Ushakov A.O.

Automation and process control of actinide extraction purification process

The paper considers the main tasks of automation and control of technologies of the extraction purification process of actinides, and also presents an approach to modeling an extraction column using the block-component circuit method (BCM) in the MARS (Modeling and Automatic Calculation of Systems) modeling environment and automation of the extraction process taking into account various effects. When modeling a column device to describe the extraction process, a diffusion model was taken as a basis, taking into account the conditions of mass transfer and hydrodynamics. The obtained results confirm the possibility of using the block-component chain method for the development of hardware chemical-technological systems and systems with the inclusion of integration models in the automated control system (ACS) for optimization and improvement of the efficiency of technological processes.

Keywords: analysis, modeling, automation, block-component chain method, extraction column, mass transfer.
DOI: 10.21293/1818-0442-2025-28-3-66-72

References

1. Dmitriev V.M., Arais L.A., Shutenkov A.V. *Avtomatizaciya modelirovaniya promyshlennykh robotov* [Automation of modeling of industrial robots]. Moscow, Scientific and technical publishing house «Machine Building», 1995 (in Russ.).

2. Kafarov V.V. *Matematicheskie osnovy avtomatizirovannogo proektirovaniya himicheskih proizvodstv: Metodologiya proektirovaniya i teoriya razrabotki optimalnyh tehnologicheskih shem* [Mathematical foundations of sound design of industrial production: Design methodology and theory of development of optimal technological schemes] / V.V. Kafarov, V.P. Meshalkin, V.L. Perov. M., Chemistry, 1979, 320 p. (in Russ.).

3. Garcia H., Patterson M., Carlson R. Modeling, analysis, and optimization of complex nuclear processes and facilities via computational methods: The HALEU process case study. *Progress in Nuclear Energy*, 2023, vol. 167, pp. 104993. DOI: https://doi.org/10.1016/j.pnucene.2023.104993.

4. Ganyukov A.A., Kadyrova I.A., Kadyrov A.S., Maratov D.D. *Matematicheskoe modelirovanie processa diffuzii i kinetiki massoperenosa veshhestv v razlichnyh sredah* [Mathematical modeling of the diffusion process and kinetics of mass transfer of substances in various media]. *International Journal of Applied and Fundamental Research*, 2021, no. 4, pp. 86–91 (in Russ.).

5. Vanel V, Mallet J, Dinh B, Michaud S, Montuir M and Vilpini F Predictive functional control for separation processes by liquid-liquid extraction. *Frontiers in Chemical Engineering*, 2024, vol. 5, pp. 1294784. DOI: 10.3389/fceng.2023. 1294784

6. Dmitriev, V.M., Gandzha T.V., Ushakov A.O. [Block-component circuit method and its prospects in computer modeling of chemical-engineering systems] *Doklady Tomskogo gosudarstvennogo universiteta sistem upravleniya i radioelektroniki*, 2024. vol. 27, no. 4. pp. 116–121. DOI 10.21293/1818-0442-2024-27-4-116-121. (in Russ.).

7. Dmitriev V.M., Gandzha T.V., Vazhenin S.K. *Principy postroeniya modelej slozhnykh tekhnologicheskikh objektov s neodnorodnymi vektornymi svyazyami* [Principles of constructing models of complex technological objects with heterogeneous vector connections]. *Modern Technologies. System Analysis. Modeling*, 2014, vol. 41, No. 1, pp. 104–111 (in Russ.).

8. Zaychenko T.N. *Shemotehnicheskoe modelirovanie jelektrotehnicheskih ustrojstv v zadachah issledovanija i obuchenija* [Circuit modeling of electrical devices in research and training tasks]. *Russian Physics Journal*. 2006, vol. 49, no. S9, pp. 196–201 (in Russ.).

9. Dmitriev V.M., Shutenkov A.V., Gandzha T.V. *Arhitektura universalnogo vychislitelnogo yadra dlya realizacii virtualnyh laboratorij* [Architecture of a universal computing core for implementing virtual laboratories]. *Instruments and Systems: Monitoring, Control, and Diagnostics*, 2004, no. 2, pp. 24–28 (in Russ.).

10. Dmitriev V.M., Gandzha T.V. *Sreda mnogourovnevogo kompyuternogo modelirovaniya* [Environment for multi-level computer modeling of chemical-technological systems]. Tomsk, Publishing house of Tomsk State University, 2017, 332 p. (in Russ.).

11. Noskov M.D., Istomin A.D., Kozyrev A.S. *Fiziko-matematicheskaja model' jekstrakcionnoj pererabotki koncentrata urana v kaskade protivotochnyh kolonn* [Physical and mathematical model of extraction processing of uranium concentrate in a cascade of counter-current columns]. *Bulletin of Tomsk Polytechnic University. Chemistry*. 2007. vol. 311, no. 3. pp. 10–14 (in Russ.).

12. Ushakov A.O., Zherin I.I., Muslimova A.V., Noskov M. D. *Issledovanie vliyaniya raskhoda pitayushchego rastvora na affinazh urana v kaskade ekstrakcionnyh kolonn* [Study of the influence of feed solution consumption on uranium refining in a cascade of extraction columns]. *Atomic energy*, 2023, vol. 135, no. 1–2, pp. 31–35 (in Russ.).

13. Goryunov A.G., Liventsov S.N. *Dinamicheskaja model' mnogokomponentnogo neravnovesnogo jekstrakcionnogo processa v pul'sacionnoj kolonne* [Dynamic model of a multicomponent nonequilibrium extraction process in a pulsating column]. *Radiochemistry*. 2011, vol. 53, no. 3. pp. 237–241. (in Russ.).

14. Giusti F., Guerinoni E., Lemire D., Thimotée M., Arrachart G., Dourdain S., Pellet-Rostaing S. Solvent extraction of uranium from an acidic medium for the front-end of nuclear fuel cycle: from mechanisms understanding to innovative process design. *Comptes Rendus. Chimie*, 2024, vol. 27, spec. iss. S4, pp. 153–183.

15. Chen H., Jobson M., Taylor R.J., Woodhead D.A., Masters A.J., Sharrad C.A. Distribution coefficient model for zirconium and technetium extraction from nitric acid solution. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2021, vol. 61, no. 1, pp. 786–804.

16. Srivastava V, Werner J, Honaker R. Design of Multi-Stage Solvent Extraction Process for Separation of Rare Earth Elements. *Mining*, 2023, vol. 3, no 3, pp. 552–578.

17. Turgeon K., Boulanger J., Bazin C. Simulation of Solvent Extraction Circuits for the Separation of Rare Earth Elements. *Minerals*, 2023, vol. 13, no. 6, 714 p.

Vyacheslav M. Dmitriev
Doctor of Science in Engineering, Professor,
Department of Computer Control and Design Systems (CCDS), Tomsk State University of Control Systems and Radioelectronics (TUSUR)
40, Lenin pr., Tomsk, Russia, 634050
ORCID: 0000-0002-4996-8114
Phone: +7 (382-2) 70-15-15
Email: dmitriewvm@gmail.com

Taras V. Gandzha
Doctor of Science in Engineering, Professor,
Department of CCDS, TUSUR
40, Lenin pr., Tomsk, Russia, 634050
ORCID: 0000-0002-4996-8114
Phone: +7 (382-2) 41-39-15
Email: gandgatv@gmail.com

Yuri A. Shurygin
Doctor of Science in Engineering, corresponding member of the International Academy of Sciences, Advisor to the Rector's Office on complex issues of functioning of TUSUR
40, Lenin pr., Tomsk, Russia, 634050
ORCID: 0000-0001-8819-0694
Тел.: +7 (382-2) 70-15-15
Email: office@kcup.tusur.ru

Alexander O. Ushakov
Research Engineer, Seversk Technological Institute National Research Nuclear University «MEPHI»
65, Kommunistichesky pr., Seversk, Russia, 636036
Phone: +7-952-896-99-19
Email: 1alexander6@mail.ru

Received: 17.09.2025.
Accepted: 25.11.2025.