Modeling of the Process of Obtaining Fuel Oxide Compositions in an Air Plasma Stream from Dispersed Water-Organic Salt Solutions

D. M. Belyakov[1,2], A. G. Karengin[2], A. A. Karengin[3]

[1] *Russian federal nuclear center – All-Russian Research Institute of Experimental Physics FSUE, Nizhny Novgorod region, Sarov, 607188, Russia*

[2] *Tomsk Polytechnic University, Tomsk, 634050, Russia*

[3] *Siberian Chemical Plant JSC, Seversk, Tomsk Region, 636039, Russia*

dmb8@tpu.ru

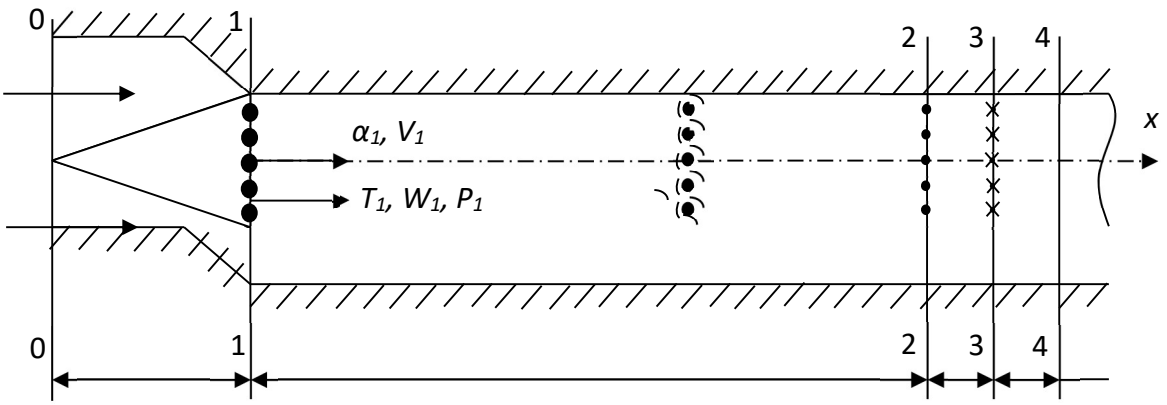
Abstract

In this paper, we consider a mathematical description of the evaporation process of water-salt-organic solution occurring under the influence of an air plasma stream. The main objective of the study is to analyze the kinetics of evaporation followed by the formation of fuel oxide compositions. Solutions of complex composition, including an inorganic part and organic components such as alcohols and ketones, are used as initial systems. These systems are characterized by high values of the adiabatic flame temperature, reaching about 1500 K, which has a significant effect on the intensity of the processes of heat and mass transfer. The main attention is paid to the establishment of dependences reflecting the influence of plasma flow parameters (temperature and velocity), as well as characteristics of the dispersed phase (droplet size and velocity) on the intensity of their evaporation.

Keywords: plasma, reactor, water-salt-organic solution, droplet evaporation, fuel oxide composition.

Based on the simulation, optimal conditions for the synthesis of fuel oxide compositions in an air-plasma stream from dispersed water-salt-organic solution (WSOS) have been determined.: the velocity of the air-plasma flow is 30 m/s; the rate of supply of droplets of solutions to the reactor is 10 m/s; the size of the supplied droplets is 40 microns; the temperature of the plasma flow is 3400-3600 K.

These parameters will ensure complete evaporation of the solution droplets supplied to the reactor with a length of no more than 1 m.



Scheme of the stage-by-stage process of producing fuel oxide compositions in an air plasma flow from dispersed solutions of WSOS along the length of the reactor

УДК 533.9 (075.8)

Моделирование процесса получения топливных оксидных композиций в воздушном плазменном потоке из диспергированных водно-солеорганических растворов

Д. М. Беляков[1,2], А. Г. Каренгин[2], А. А. Каренгин[3]

[1] ФГУП «Российский федеральный ядерный центр – Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики»,
Россия, Нижегородская область, Саров, 607188, пр. Мира, 37
[2] Томский политехнический университет,
Россия, Томск, 634050, пр. Ленина, 30
[3]АО «Сибирский химический комбинат»,
Россия, Северск Томской области, 636039, ул. Курчатова
dmb8@tpu.ru

Аннотация

В данной работе рассматривается математическое описание процесса испарения водно-солеорганических растворов, протекающего в условиях воздействия воздушного плазменного потока. Основной задачей исследования является анализ кинетики испарения с последующим формированием топливных оксидных композиций. В качестве исходных систем используются растворы сложного состава, включающие неорганическую часть и органические компоненты, такие как спирты и кетоны. Для указанных систем характерны высокие значения адиабатической температуры горения, достигающие порядка 1500 K, что оказывает существенное влияние на интенсивность протекания процессов тепло- и массообмена. Основное внимание уделено установлению зависимостей, отражающих влияние параметров плазменного потока (температуры и скорости), а также характеристик дисперсной фазы (размера и скорости капель) на интенсивность их испарения.

Ключевые слова: плазма, реактор, водно-солеорганический раствор, испарение капель, топливная оксидная композиция.

1. Введение

Традиционные подходы к синтезу топливных оксидных материалов, включая раздельное получение компонентов с последующим механическим смешением, а также методы золь-гель синтеза, характеризуются рядом существенных ограничений. К их числу относятся высокая трудоёмкость, многостадийность технологического процесса и сложность обеспечения стабильного фазового состава. Дополнительно данные методы сопряжены с повышенными энергетическими и ресурсными затратами [1]. В отличие от них, применение газоразрядной плазмы при обработке водно-солевых растворов, содержащих делящиеся элементы и матричные металлы, позволяет интенсифицировать процесс синтеза, обеспечить более равномерное распределение фаз и повысить управляемость морфологии формируемых частиц [2]. Следует отметить, что использование исключительно водно-солевых растворов в условиях воздушной плазмы сопровождается значительными энергетическими затратами. Кроме того, при таком подходе не удаётся обеспечить требуемый состав топливных оксидов без проведения дополнительных стадий, связанных с восстановлением водорода, что усложняет технологическую схему процесса.

Одним из направлений повышения энергетической эффективности и улучшения физико-химических характеристик получаемых материалов является применение воздушно-плазменного воздействия к водно-солеорганическим растворам (ВСОР). Подобные системы, помимо водной основы и нитратов делящихся элементов, содержат органические компоненты, такие как спирты и кетоны, что оказывает влияние на механизм протекания процессов испарения и термического разложения. Эти растворы обладают температурой горения около 1500 K [3-5].

Цель работы – определить закономерности влияния параметров воздушного плазменного потока и характеристик капель на скорость испарения и выявить оптимальные условия для синтеза топливных оксидных композиций.

2. Математическая модель кинетики испарения капель диспергированных водно-солеорганических растворов

Схематическое представление последовательности стадий формирования топливных оксидных композиций при обработке диспергированных водно-солеорганических растворов (ВСОР) в воздушно-плазменном потоке приведено на рис. 1.

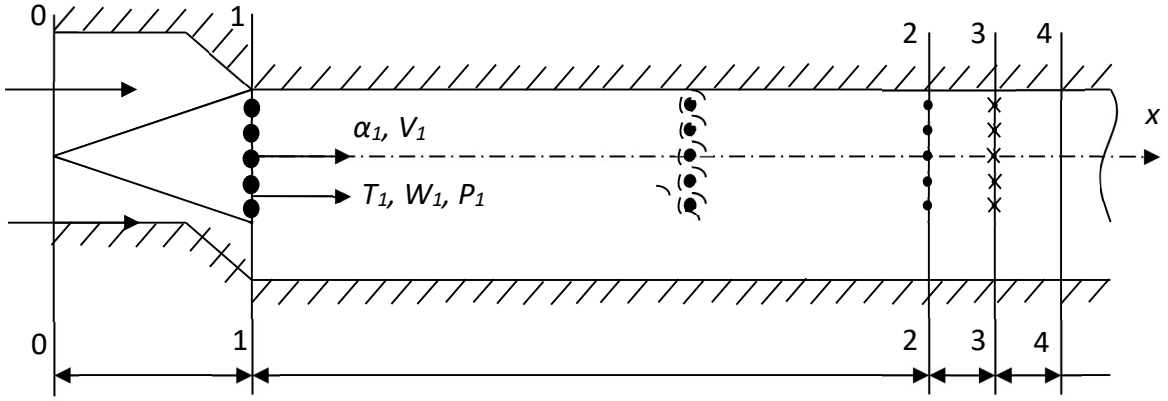


Рис. 1. Схема стадийности процесса получения топливных оксидных композиций в воздушном плазменном потоке из диспергированных растворов ВСОР по длине реактора

В рамках рассматриваемого подхода процесс может быть условно разделён на несколько характерных этапов. На начальной стадии (участок 0–1) происходит процесс перемешивания капель диспергированных растворов ВСОР с воздушно-плазменным потоком и нагрев капель от начальной температуры (300 K) до температуры равновесного испарения (373 K), при этом процесс испарения капель на участке 0–1 не учитывается. Затем следует стадия динамического испарения капель (1–2). Далее происходит нагрев образовавшегося солевого остатка до температур, соответствующих началу его термического разложения (2–3), после чего реализуется стадия термического разложения солевого остатка (3–4). Несмотря на то, что в реальных условиях указанные процессы протекают одновременно и взаимосвязано, их поэтапное выделение позволяет упростить анализ и более чётко описать механизм протекания явлений. При этом установлено, что при температурах порядка 1500 K и выше определяющим (лимитирующим) звеном процесса является испарение растворителя, преимущественно водной составляющей [5–6].

Для количественного описания испарения капель использован подход, основанный на теории двухфазных течений в одномерной постановке. При разработке модели принят ряд допущений, направленных на упрощение математического описания рассматриваемого процесса. Течение интерпретируется как идеализированный реактор вытеснения, а протекающие процессы считаются квазистационарными. Предполагается, что воздушно-плазменный поток не обменивается теплотой с окружающей средой, то есть является адиабатическим. Дисперс-

ная фаза моделируется в виде совокупности одинаковых по размеру капель, которые не взаимодействуют ни друг с другом, ни с поверхностями реактора. Кроме того, в рамках модели не учитываются возможные химические реакции между плазмой и образующимся водяным паром. Принятые предположения позволяют сосредоточить внимание на ключевых механизмах испарения, не усложняя модель второстепенными факторами. Для описания изменения параметров двухфазной системы вдоль длины зоны испарения используется система уравнений, учитывающая поведение как жидкой, так и газовой фаз, в которой приняты обозначения: *l* – жидкая фаза, *g* – газовая фаза, *vap* – пар, *dr* – капля; *mix* – газопаровая смесь, индекс 1 соответствует начальным условиям:

1. Уравнение испарения капли, когда скорость испарения определяется подводом тепла к капле

$$\frac{dm_{dr}}{d\tau} = -\pi \mathrm{Nu}^* \frac{\lambda_{mix}(T_g - T_p)}{\Delta H^*} \alpha_{dr}, \tag{1}$$

где m – масса; τ – время; T_{gl} – начальная температура воздушного потока; α_{dr}– размер капель; λ – коэффициент теплопроводности; H – энтальпия; $\mathrm{Nu}^* = 2\phi(\mathrm{Re})\,\psi_R H_1(\mathrm{B})$ – число Нуссельта, $H_1(\mathrm{B}) = \frac{ln(\,1+\mathrm{B})}{\mathrm{B}}$; $\phi(\mathrm{Re}) = 1 + 0.3\mathrm{Re}^{\frac{1}{2}}\mathrm{Pr}^{\frac{1}{3}}$; $\mathrm{B} = \frac{c_{pmix}(T_g - T_p)}{\Delta H^*}$; c_p – теплоемкость при постоянном давлении; $\psi_R = 1 + r_0(\phi(\mathrm{Re})\,H_1(\mathrm{B}))^{-1}$ – поправочный коэффициент на режим испарения; $\mathrm{Re} = \alpha_{dr}\rho_g|W - V|{\eta_g}^{-1}$ – число Рейнольдса, W и V – скорости газа и капель; ρ – плотность; η – коэффициент динамической вязкости; $\mathrm{Pr} = \frac{C_{pg}\eta_g}{\lambda_g}$ – число Прандтля.

2. Уравнение движения капли

$$m_{dr}\frac{dV}{d\tau} = \frac{\pi}{8}{C_d}^*\rho_g\alpha_{dr}^2|W - V|(W - V), \tag{2}$$

где ${C_d}^* = C_d(\mathrm{Re})H_2(\mathrm{Re},\mathrm{B})\psi(\mathrm{We})$; $\mathrm{B}^* = \ln(\,1 + \mathrm{B})/\mathrm{Pr}$; $C_d(\mathrm{Re}) = 0.32 + 4.4\mathrm{Re}^{-0.5} + 24\mathrm{Re}^{-1}$; $\mathrm{Pr} = \eta_{mix}C_{pmix}\lambda_{mix}^{-1}$; $\phi(\mathrm{We}) = \exp(\,0.003\mathrm{We}^{3/2})$; $\mathrm{We} = \alpha_{dr}\rho_g(W - V)^2\sigma_l^{-1}$ – число Вебера, σ_l – коэффициент поверхностного натяжения жидкости;
$H_2(\mathrm{Re},\mathrm{B}) = 1 - [0.25\mathrm{B}^*/(1 + 0.01\mathrm{Re} + 0.2\mathrm{B}^*\mathrm{Re}^{-1})]$.

3. Уравнение скорости движения капли

$$\frac{dx}{d\tau} = V. \tag{3}$$

4. Уравнение испаряемости капли

$$z_{vap} = 1 - \left(\frac{\alpha_{dr}}{\alpha_{dr}}\right)^3 \frac{\rho_l}{\rho_{l1}}. \tag{4}$$

5. Уравнение сохранения расхода двухфазной смеси

$$\frac{d}{d\tau}(W\rho F + m_l) = 0, \tag{5}$$

где F – площадь поперечного сечения реактора.

6. Уравнение сохранения импульса двухфазной смеси

$$\frac{d}{d\tau}(mW + m_l\mathrm{B} + PF) = P\frac{dF}{d\tau}, \tag{6}$$

где $m = m_g + m_{vap}$.

7. Уравнение сохранения энергии двухфазной смеси

$$\frac{d}{d\tau}\left[m\left(I_{mix} + \frac{W^2}{2}\right) + m_l\left(I_l + \frac{V^2}{2}\right) + m_{mix}\Delta H^*\right] = 0 \tag{7}$$

8. Уравнение состояния парогазовой смеси

$$\frac{P}{\rho} = \frac{RT}{\mu(T)}, \tag{8}$$

где $1/\mu(T) = r_g/\mu_g(T) + r_{vap}/\mu_{vap}(T)$, μ – молекулярный вес, r_g и r_{vap} – массовые доли газа и пара, P – давление.

Теплофизические параметры воздуха и водяного пара были взяты из [7–8] и определялись аппроксимацией с помощью алгебраических полиномов. Параметры η_{mix}, λ_{mix}, C_{pmix}, рассчитывались по усредненной температуре T_c и концентрации пара C

$$T_c = \frac{(T_g+T_p)}{2}, \quad C = \frac{(C_0+C_\infty)}{2},$$

где C_0 и C_∞ – концентрация пара у поверхности капли и в набегающем потоке; T_p – температура равновесного испарения капли. При $T_g \gg T_p$ можно принять $T_p = T_{dr}$ (температура кипения); $C_0 = 1$ тогда $C_\infty = \beta z_n(1 + \beta z_n)$. Теплопроводность и вязкость газовой смеси определялись по формулам Васильева и Уилка [9].

3. Моделирование кинетики испарения капель диспергированных водно-солеорганических растворов

Система уравнений (1–8) была решена методом Рунге – Кутта [10]. Погрешность вычислений составила не более 0.1 %. Моделирование кинетики испарения с использованием предложенной математической модели значительно ускоряет расчеты и позволяет оценить влияние различных начальных условий. В рамках настоящего исследования была поставлена задача определения таких режимных параметров, при которых обеспечивается нагрев и последующее испарение капель до температурного уровня порядка 1500 K. Для решения данной задачи проведён расчётный анализ с варьированием ключевых характеристик процесса. В частности, рассматривался диапазон температур воздушного потока в реакторе от 2000 до 4000 K, при этом скорость введения дисперсной фазы изменялась в пределах $10 \div 100$ м/с. Дополнительно учитывалось влияние скорости газового потока, принимающей значения от 10 до 90 м/с. Размер капель варьировался в интервале $40 \div 100$ мкм, давление в системе поддерживалось на уровне 100 кПа, а массовое соотношение жидкой и газовой фаз задавалось равным $\beta = 1.4$.

Для более детального анализа особенностей протекания процесса были рассмотрены изменения нормированных параметров двухфазного потока как во времени, так и по длине зоны испарения. Соответствующие зависимости приведены на рис. 2 и 3. Расчёты выполнены для характерного режима, при котором температура плазменного потока составляет 4000 K, диаметр капель равен 100 мкм, а их начальная скорость достигает 100 м/с. Интерпретация полученных результатов показывает, что процесс испарения дисперсной фазы в условиях плазменной струи носит ярко выраженный неравномерный характер. Наиболее интенсивная стадия фазового перехода приходится на начальный участок зоны реакции, где сосредоточена основная масса испаряющихся капель. В этом же диапазоне наблюдается заметное снижение температуры плазменного потока, обусловленное затратами энергии на фазовое превращение.

Отдельное внимание в работе уделено анализу влияния начальных параметров потока на протяжённость зоны полного испарения капель. Результаты расчётов, представленные на рис. 4, получены для двух характерных значений скорости газового потока – 10 м/с (рис. 4, *а*) и 90 м/с (рис. 4, *б*). Сравнительный анализ показывает, что увеличение диаметра капель до 100 мкм приводит к значительному увеличению длины зоны, в пределах которой происходит их полное испарение – приблизительно в шесть раз. В то же время уменьшение скорости воздушного потока до 10 м/с сопровождается сокращением данной зоны примерно в пять раз, что указывает на существенную зависимость процесса от кинематических параметров потока. При этом влияние температуры плазменного потока на длину зоны испарения выражено менее существенно и носит вторичный характер по сравнению с геометрическими и кинематическими параметрами потока.

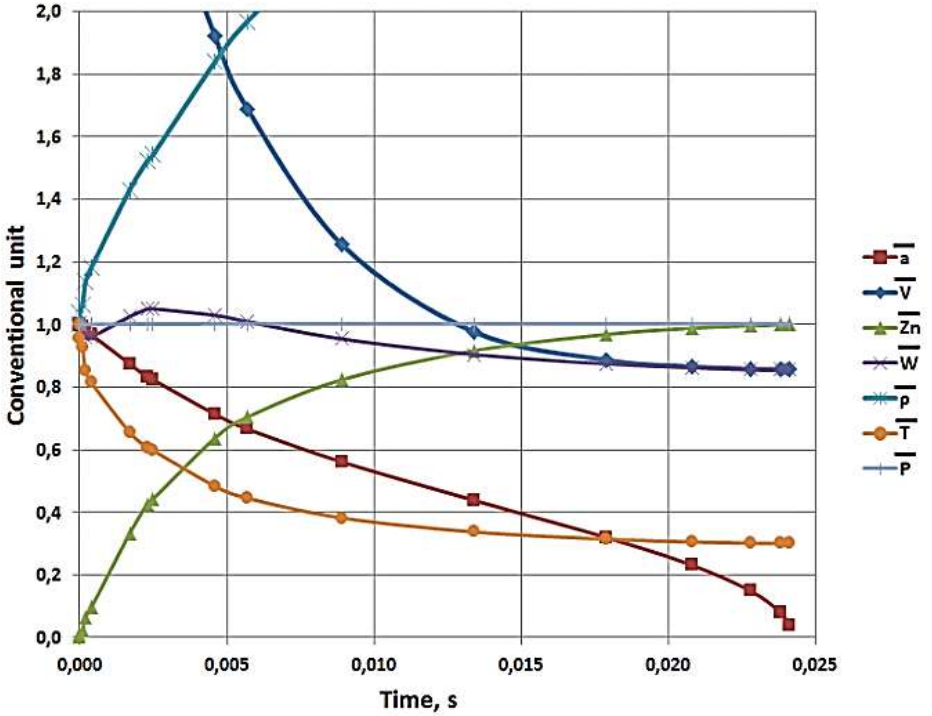


Рис. 2. График изменения параметров протекания процесса испарения капель раствора ВСОР в реакторе от времени

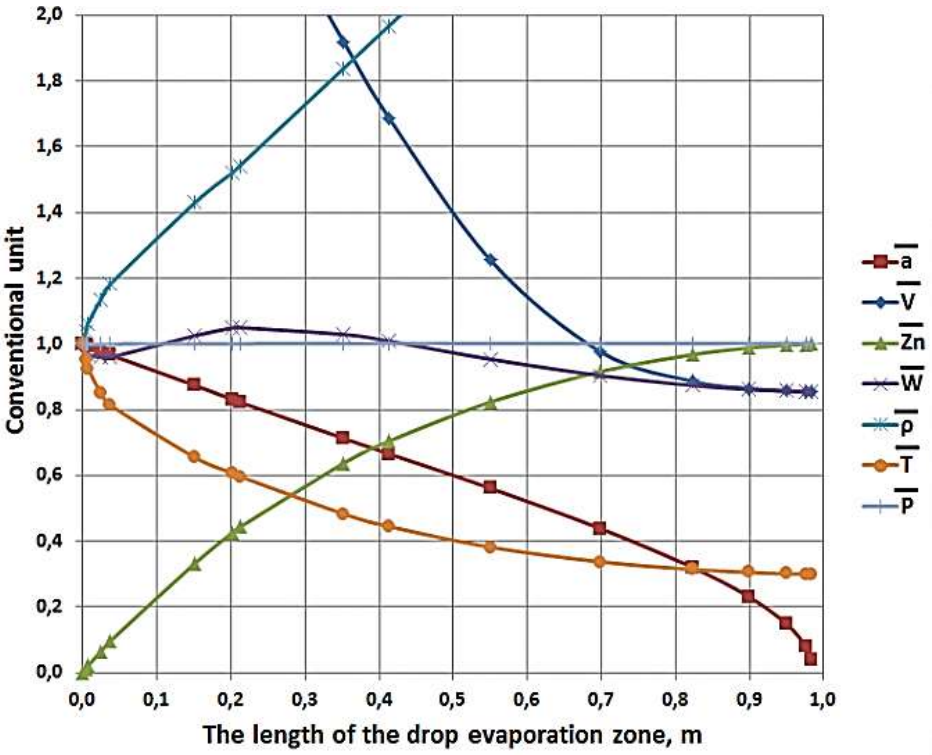
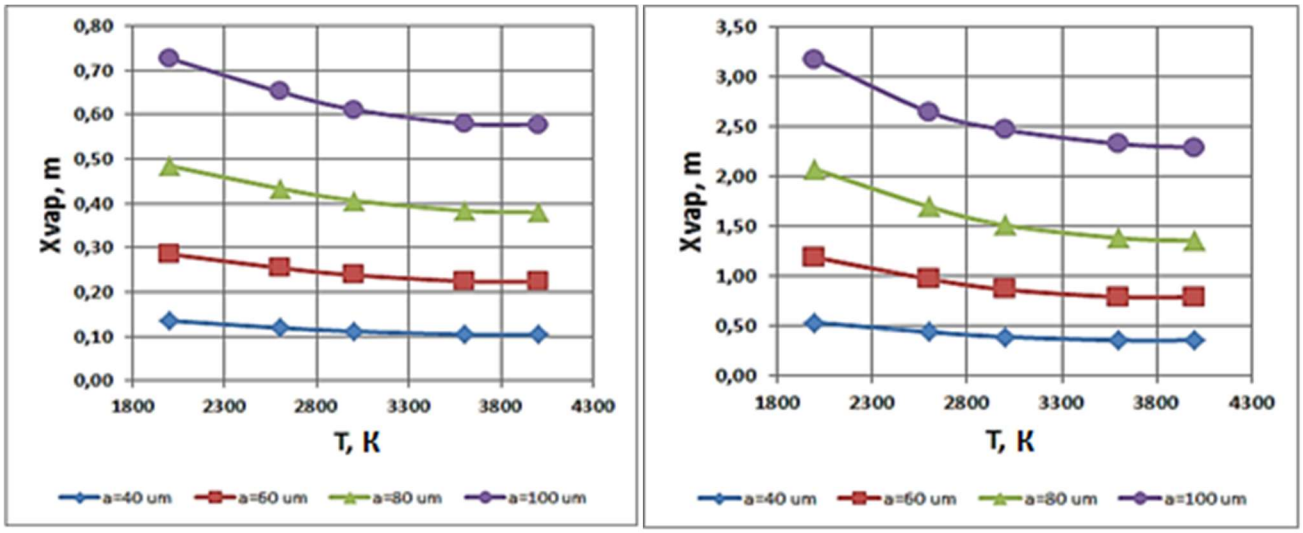


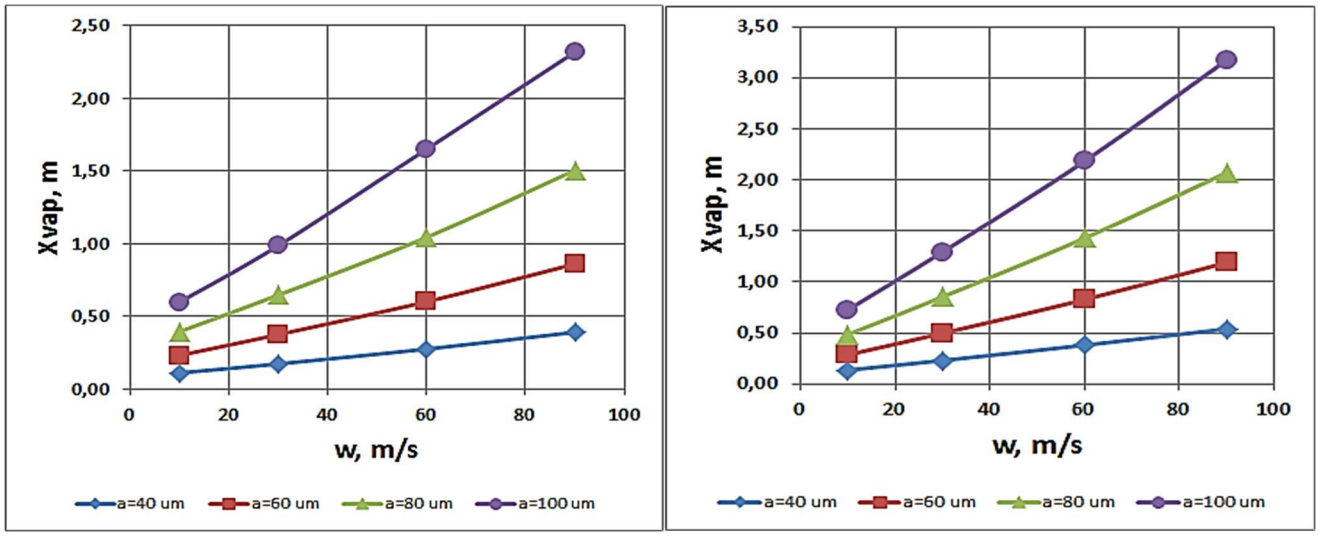
Рис. 3. График изменения параметров протекания процесса испарения капель раствора ВСОР по длине реактора



а *б*

Рис. 4. Влияние начальной температуры потока T_{g1} на протяженность x_{vap} при скорости газового потока: *а* – 10 м/с, *б* – 90 м/с

На рис. 5 демонстрируется, как изменение начальной скорости воздушного потока влияет на длину области полного испарения капель при температурах 2000 K (рис. 5, *а*) и 4000 K (рис. 5, *б*).



а *б*

Рис. 5. Влияние начальной скорости потока W_{g1} на x_{vap} при температуре: *а* – 2000 K, *б* – 4000 K

Дополнительное рассмотрение зависимостей, приведённых на рис. 5, позволяет уточнить влияние скорости плазменного потока на характеристики испарения. Установлено, что минимальная протяжённость зоны полного испарения достигается при относительно низких скоростях потока. В частности, снижение начальной скорости плазменной струи с 90 до 10 м/с приводит к уменьшению длины зоны испарения примерно в четыре раза, что подтверждает значимость гидродинамических условий при формировании эффективного режима обработки. Данный результат подчёркивает определяющую роль гидродинамических условий в формировании эффективного режима обработки.

4. Заключение

На основании проведённого моделирования могут быть рекомендованы следующие оптимальные условия синтеза топливных оксидных композиций в воздушно-плазменном потоке из диспергированных ВСОР:

- скорость воздушно-плазменного потока $W_1 \approx 30$ м/с;
- скорость подачи капель растворов в реактор $V_1 \approx 10$ м/с;
- размер подаваемых капель $a_1 \approx 40$ мкм;
- температура плазменного потока $T_1 \approx 3400 \div 3600$ K.

Данные параметры обеспечат полное испарение капель раствора, подаваемых в реактор длинной не более 1 м. Предложенная модель позволяет выполнять расчеты и оптимизировать режимы плазменной переработки как отходов переработки ОЯТ, так и иных жидких радионуклидных отходов, реализованных в виде диспергированных ВСОР.

Литература

1. Алексеев С. В., Зайцев В. А., Толстоухов С. С. Дисперсионное ядерное топливо. М.: Техносфера, 2015. 248 с.
2. Туманов Ю. Н. Плазменные и высокочастотные процессы получения и обработки материалов в ядерном топливном цикле: настоящее и будущее. М.: Физматлит. 2003. 759 с.
3. Karengin A. G., Karengin A. A., Novoselov I. Yu., Tundeshev N. V. Calculation and Optimization of Plasma Utilization Process of Inflammable Wastes after Spent Nuclear Fuel Recycling. Advanced Materials Research. 2014. Vol. 1040. Pp. 433–436.
4. Karengin A. G., Karengin A. A., Podgornaya O. D., Shlotgauer E. E. Complex utilization of snf processing wastes in air plasma of high–frequency torch discharge. IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. 2014. Pp. 1–6.
5. Каренгин А. Г., Каренгин А. А. Математическая модель кинетики процесса плазменной утилизации отходов переработки ОЯТ в виде диспергированных горючих водно-органических композиций // Известия вузов. Физика. 2014. Т. 57. № 11/2. С. 373–378.
6. Karengin A. G. A. A., Novoselov I. Yu., et al. // Journal of Physics: Conference Series. 2021. Vol. 1989. Pp. 1–5.
7. Варгафтик Н. В. Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей. М.: Наука. 1972.
8. Рид Р., Шервуд Т. Свойства газов и жидкостей. Л.: Химия, 1971.
9. Тихомиров И. А., Каренгин А. Г., Квеско С. Б. Расчет параметров плазмотермического процесса переработки диспергированных водных растворов солей металлов // Физика и химия обработки материалов. 1984. № 5. С. 42–46.
10. Karengin A. A., Karengin A. G. and Vlasov V. A. Kinetic Model of Evaporation of Droplets Dispersed in Aqueous-Organic Compositions in an Air-Plasma Flow // Rus. Phys. J. 2015. Vol. 58, issue 5. Pp. 730–736.

References

1. Alekseev S. V., Zaitsev V. A., Tolstoukhov S. S., *Dispersion nuclear fuel*, Moscow: Technosfera, 2015, 248 p. [in Russian].
2. Tumanov Yu. N., *Plasma and high-frequency processes for the production and processing of materials in the nuclear fuel cycle: present and future*. Moscow: Fizmatlit, 2003, 759 p. [in Russian].
3. Karengin A. G., Karengin A. A., Novoselov I. Yu., Tundeshev N. V., Calculation and Optimization of Plasma Utilization Process of Inflammable Wastes after Spent Nuclear Fuel Recycling, *Advanced Materials Research*, 2014, vol. 1040, pp. 433–436.

4. Karengin A. G., Karengin A. A., Podgornaya O. D., Shlotgauer E. E., Complex utilization of snf processing wastes in air plasma of high–frequency torch discharge, *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, 2014, pp. 1–6.
5. Karengin A. G., Karengin A. A., Mathematical model of the kinetics of the plasma disposal process for spent nuclear fuel processing waste in the form of dispersed combustible water-organic compositions, *Proceedings of Higher Education Institutions. Physics*, 2014, vol. 57, no. 11/2, pp. 373–378 [in Russian].
6. Karengin A. G. A. A., Novoselov I. Yu., et al., *Journal of Physics: Conference Series*, 2021, vol. 1989, pp. 1–5.
7. Vargaftik N. V., *Handbook of Thermophysical Properties of Gases and Liquids*, Moscow: Science, 1972 [in Russian].
8. Reed R., Sherwood T., *Properties of Gases and Liquids*, Leningrad: Khimiya, 1971 [in Russian].
9. Tikhomirov I. A., Karengin A. G., Kvesko S. B., Calculation of parameters for the plasma-thermal processing of dispersed aqueous solutions of metal salts, *Physics and Chemistry of Materials Processing*, 1984, no. 5, pp. 42–46 [in Russian].
10. Karengin A. A., Karengin A. G. and Vlasov V. A., *Rus. Phys. J.*, 2015, vol. 58, pp. 730–736. DOI: 10.1007/s11182-015-0558-x

Статья поступила в редакцию 1 июня 2026 г.