

MPHTI 30.17.51

DOI: <https://doi.org/10.66941/3106-9037/2026/iss1pp29-52>**A. Kaltayev^{1,2}, Zh. Ualiev³, A. Bibossinov⁴, 2026**¹Institute of Mechanics and Engineering named after. U.A. Dzholdasbekova, Shevchenko st. 28, 050010, Almaty, Kazakhstan²Kazakh National Technical University named after K.I. Satpayev, st. Satpayev 22, 050000, Almaty, Kazakhstan³Institute of Digital Engineering and Technology, st. Satpayeva, 22/5, 050013, Almaty, Kazakhstan⁴JSC "NCGNTE", st. Bogenbay batyr, 221, 050026, Almaty, Kazakhstan**MODELING AND INVESTIGATION OF HYDRODYNAMICS AND MASS TRANSFER IN URANIUM RECOVERY IN A PACKED ION-EXCHANGE COLUMN WITH A CONICAL FLOW DISTRIBUTOR****Aidarkhan Kaltayev**, Dr.Sc, Professor, Head of the Research Laboratory "Engineering Mechanics and Modeling", KazNRTU.E-mail: Aidarkhan.kaltayev@gmail.com; <https://orcid.org/0000-0003-2180-2785>**Zhomart Ualiev**, PhD, Associate Professor.E-mail: zh-u@mail.ru; ; <https://orcid.org/0000-0002-5021-2154>**Asylkhan Bibossinov**, PhD, Chairman of the Board.E-mail: bibossinov@live.com; <https://orcid.org/0000-0002-5219-4279>

Abstract. Efficient recovery of uranium from productive leaching solutions requires a detailed understanding of hydrodynamics and mass transfer in ion-exchange sorption columns. In this work, a coupled physical and mathematical model of uranium oxide sorption in a packed ion-exchange column equipped with a conical flow distributor is developed. Fluid flow in the porous resin bed is described using the Forchheimer filtration law combined with the mass conservation equation. The mass-transfer process between the uranium-bearing solution and the ion-exchange resin is modeled by a convective-dispersion transport equation coupled with a sorption kinetics equation based on the linear driving force approximation.

To simulate the process in a domain of complex geometry, the fictitious domain method is applied. The pressure field is computed using the Ritz variational method, while the transport equation for uranium in the liquid phase is solved using the Crank-Nicolson scheme. The sorption kinetics equation is integrated analytically at each time step.

Numerical simulations show that uranium distribution in both liquid and solid phases forms a ring-shaped cylindrical region inside the column, indicating non-uniform utilization of the sorbent bed. The conical distributor does not provide sufficiently uniform radial flow distribution. Increasing the solution flow rate by a factor of two leads to an approximately 1.5-fold increase in the width of the mass-transfer zone, mainly due to enhanced longitudinal dispersion.

The proposed modeling approach can be used to analyze and optimize industrial sorption columns applied in uranium recovery processes.

Keywords: Uranium recovery; Ion exchange; Packed column; Convective-dispersion transport; Mass transfer zone; Porous media flow; Numerical simulation.

Қалтаев А.^{1,2*}, Уалиев Ж.Р.³, Бибосинов А. Ж.⁴, 2026.

¹У.А. Джолдасбеков атындағы Механика және машинатану институты, Шевченко к., 28 үй, 050010, Алматы, Қазақстан

²Қ.Сәтпаев атындағы ҚазҰҒЗУ, Сатпаев көш., 22 үй, 050000, Алматы, Қазақстан

³Сандық технологиялар және жабдықтар институты, Сатпаев к., 22/5 үй, 050013, Алматы, Қазақстан

⁴«ҰМҒ-ТО» АҚ, Богенбай батыр көш., 221, 050026, Алматы, Қазақстан

КОНУСТЫ АҒЫН ТАРАТҚЫШЫ БАР ТОЛТЫРМАЛЫ ИОНАЛМАСУ КОЛОННАСЫНДА УРАНДЫ АЛУ ПРОЦЕСІНДЕГІ ГИДРОДИНАМИКА МЕН МАССАЛМАСУДЫ МОДЕЛЬДЕУ ЖӘНЕ ЗЕРТТЕУ

Қалтаев Айдархан, ф.-м.ғ.д., проф., Қ.Сәтпаев атындағы ҚазҰҒЗУнің «Инженерлік механика және моделдеу» ҒЗЗның жетекшісі, Алматы, Қазақстан.

E-mail: Aidarkhan.kaltayev@gmail.com; <https://orcid.org/0000-0003-2180-2785>

Уалиев Жомарт Разханұлы, PhD, қаум. профессор, Алматы, Қазақстан.

E-mail: zh-u@mail.ru; ; <https://orcid.org/0000-0002-5021-2154>

Бибосинов Асылхан Жәнібекұлы, PhD, АҚ «ҰМҒ-ТО»-тың басқарма төрағасы, Алматы, Қазақстан.

E-mail: bibossinov@live.com; <https://orcid.org/0000-0002-5219-4279>

Аннотация. Сілтілеу өнімді ерітінділерінен уранды тиімді алу ионалмастырғыш сорбциялық колонналардағы гидродинамика мен массалмасу процестерін терең түсінуді талап етеді. Бұл жұмыста конус тәрізді ағын таратқышы бар толтырмалы ионалмастырғыш колоннадағы уран оксидтерінің сорбциясын сипаттайтын байланысқан физикалық және математикалық модель әзірленді. Кеуекті шайыр қабатындағы сұйықтық қозғалысы Форхгеймер сүзу заңы мен масса сақталу теңдеуі арқылы сипатталады. Уран иондары бар ерітінді мен ионалмастырғыш шайыр арасындағы массалмасу конвективті-дисперсиялық тасымалдау теңдеуі және сызықтық қозғаушы күш жуықтауына негізделген сорбция кинетикасының теңдеуі арқылы сипатталады.

Күрделі геометриялы есеп аймағында сорбция процесін сандық зерттеу үшін фиктивті облыстар әдісі қолданылды. Қысым өрісі Ритцтің вариациялық әдісімен есептелді, ал сұйық фазадағы уранның тасымал теңдеуі Кранк–Николсон схемасын қолдану арқылы шешілді. Сорбция кинетикасының теңдеуі әрбір уақыт қадамында аналитикалық түрде интегралданады.

Сандық модельдеу нәтижелері уранның сұйық және қатты фазалардағы таралуы колонна ішінде сақина тәрізді цилиндрлік аймақ түзетінін көрсетті, бұл сорбент қабатының біркелкі пайдаланылмайтынын білдіреді. Конустық ағын таратқыш колонна қимасы бойынша ерітіндінің біркелкі таралуын жеткілікті дәрежеде қамтамасыз етпейтіні анықталды. Ерітінді шығынын екі есе арттыру массалмасу аймағының енін шамамен 1,5 есе ұлғайтады, бұл бойлық дисперсияның күшеюімен түсіндіріледі.

Ұсынылған модельдеу әдісі уранды өндіруде қолданылатын өнеркәсіптік сорбциялық колонналардың жұмыс тиімділігін талдау және оңтайландыру үшін пайдаланылуы мүмкін.

Түйін сөздер: уранды алу; ионалмасу; толтырмалы колонна; конвективті-дисперсиялық тасымал; массалмасу аймағы; кеуекті ортадағы фильтрация; сандық модельдеу.

Калтаев А.^{1,2*}, Уалиев Ж.Р.^{1,2}, Бибосынов А.Ж.³, 2026.

¹Институт механики и машиноведения им. У.А. Джолдасбекова, ул. Шевченко 28, 050010, Алматы, Казахстан

²КазННТУ им. К.И. Сатпаева, ул. Сатпаева 22, 050000, Алматы, Казахстан

³ Институт цифровой техники и технологий, ул. Сатпаева, 22/5, 050013, Алматы, Казахстан

⁴АО «НЦГНТЭ», ул. Богенбай батыра, 221, 050026, Алматы, Казахстан

МОДЕЛИРОВАНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ ГИДРОДИНАМИКИ И МАССООБМЕНА ПРИ ИЗВЛЕЧЕНИИ УРАНА В НАСАДОЧНОЙ ИОНООБМЕННОЙ КОЛОННЕ С КОНИЧЕСКИМ РАСПРЕДЕЛИТЕЛЕМ ПОТОКА

Қалтаев Айдархан, д.ф.-м.н., профессор, руководитель НИЛ «Инженерная механика и моделирование», КазННТУ, Алматы, Казахстан.

E-mail: Aidarkhan.kaltayev@gmail.com; <https://orcid.org/0000-0003-2180-2785>

Уалиев Жомарт Разханович, PhD, ассоц. профессор, Алматы, Казахстан.

E-mail: zh-u@mail.ru; <https://orcid.org/0000-0002-5021-2154>

Бибосынов Асылхан Жанибекович, PhD, председатель правления НЦГНТЭ, Алматы, Казахстан.

E-mail: bibossinov@live.com; <https://orcid.org/0000-0002-5219-4279>

Аннотация. Эффективное извлечение урана из продуктивных растворов выщелачивания требует детального понимания гидродинамики и процессов массообмена в ионообменных сорбционных колоннах. В работе разработана сопряжённая физическая и математическая модель сорбции оксидов урана в насадочной ионообменной колонне с коническим распределителем потока раствора. Движение жидкости в пористом слое смолы описывается законом фильтрации Форхгеймера совместно с уравнением сохранения массы. Массообмен между урансодержащим раствором и ионообменной смолой моделируется уравнением конвективно-дисперсионного переноса вещества, сопряжённым с кинетическим уравнением сорбции на основе приближения линейной движущей силы.

Для численного исследования процесса в области сложной геометрии применён метод фиктивных областей. Поле давления вычисляется численно вариационным методом Ритца, тогда как уравнение переноса урана в жидкой фазе решается с использованием схемы Кранка-Никольсона. Кинетическое уравнение сорбции интегрируется аналитически на каждом временном шаге.

Результаты численного моделирования показывают, что распределение урана в жидкой и твёрдой фазах формирует внутри колонны кольцеобразную цилиндрическую область, что свидетельствует о неравномерном использовании слоя сорбента. Показано, что конический распределитель потока не обеспечивает достаточно равномерного распределения раствора по поперечному сечению колонны. Увеличение расхода раствора в два раза приводит к увеличению ширины зоны массообмена примерно в 1,5 раза вследствие усиления продольной дисперсии.

Предложенный подход к моделированию может быть использован для анализа и оптимизации работы промышленных сорбционных колонн, применяемых при извлечении урана.

Ключевые слова: извлечение урана; ионообмен; насадочная колонна; конвективно-дисперсионный перенос; зона массообмена; фильтрация в пористой среде; численное моделирование.

Введение

Конструкция сорбционной колонны и принцип ее работы

Многие глубокозалегающие и/или низко концентрированные месторождения редких и драгоценных металлов, вследствие экономической эффективности и относительной экологической безопасности, разрабатываются методом подземного скважинного

выщелачивания (Мамилов и др., 1980; Wang et al., 2022; Kurmanseit и др., 2022 и 2023; Li и др., 2024). На стадии переработки извлечённых растворов (продуктивных растворов) наибольшее распространение получили традиционные сорбционно-осадительные методы концентрирования полезных компонентов непосредственно на местах добычи с использованием ионообменных смол (Couper et al., 2012; Orrego, 2019; Quinn и др., 2020).

Существующие исследования, посвящённые сорбции оксидов урана, в основном направлены на моделирование процессов переноса и кинетики сорбции в прямоточных колоннах с учётом адвекции, дисперсии, а также физико-химических механизмов взаимодействия урана с сорбентом (Zhang et al., 2011; Mahmoud, 2015; Patel, 2019; Baqer et al., 2023).

В настоящей работе на основе математического и численного моделирования исследована динамика ионообменного извлечения оксидов урана из продуктивного раствора в прямоточной сорбционной насадочной колонне (СНК) сложной геометрии. Подобные колонны широко применяются в уранодобывающей промышленности для извлечения оксидов урана из продуктивных растворов (Мамилов, 1980; Patel, 2019).

Вначале приводится описание конструкции сорбера. Затем на основе экспериментальных данных, полученных в прямоточной колонне, определяются кинетические характеристики сорбента. Значения соответствующих коэффициентов устанавливаются путём сопоставления расчётных и экспериментальных кривых распределения концентрации минерала в жидкой фазе на различных сечениях насадочной сорбционной колонны и далее используются при построении математической модели процесса. С учётом найденных параметров разрабатывается математическая модель транспорта оксидов урана и их сорбции в пористом слое сорбента.

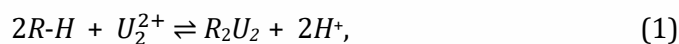
На заключительном этапе с применением метода фиктивных областей и численных методов проводится исследование эффективности работы сорбера типа СНК в зависимости от формы конусной преграды.

В работе анализируется первый цикл работы сорбционной колонны, при котором оксиды урана в сорбенте отсутствуют. Моделирование периодического режима работы сорбционной колонны возможно при наличии информации о распределении остаточной концентрации оксидов урана в сорбенте после выгрузки насыщенного слоя из колонны.

Конструкция и схема работы сорбционной насадочной колонны СНК-3 (далее — колонна или сорбер), широко применяемой в добывающих подразделениях АО «НАК Казатомпром», представляет собой цилиндрическую колонну высотой H и радиусом R с усечённым коническим днищем. В нижней части колонны, перед трубой подачи продуктивного раствора диаметром d , установлен конический распределитель потока. Его назначением является уменьшение неравномерности распределения гидродинамического потока и, соответственно, концентрации минерала по поперечному сечению колонны (рис. 1).

Колонна плотно заполняется неподвижным слоем гранулированного ионообменного сорбента (смолы фирмы *Purolite*), представляющего собой пористые сферические частицы диаметром δ с развитой внутренней поверхностью. Диаметр гранул на несколько порядков меньше диаметра подводящей трубы и, тем более, диаметра колонны $D=2R$. Поэтому слой сорбента может быть рассмотрен как пористая среда с пористостью $\phi \leq 0.4$.

Продуктивный раствор, содержащий ионы оксидов урана (например, катионы уранила U_2^{2+} или их комплексные формы), подаётся снизу вверх через подводящую трубу с постоянным объёмным расходом Q_0 . Более подвижные ионы водорода ионообменной смолы замещаются ионами оксидов урана из продуктивного раствора, в результате чего происходит ионообмен между смолой и раствором



поскольку энергия связи смолы с ионом урана превышает энергию связи с ионом водорода:

$$E(\text{смола-}U) > E(\text{смола-}H).$$

Здесь R - активный центр смолы, $R-H$ - смола с ионами H^+ , R_2U_2 - комплекс иона U_2^{2+} , закреплённый на смоле, H^+ - высвобождающийся в раствор ион водорода.

Вследствие того, что гранулы имеют развитую внутреннюю структуру и малых размеров капилляров, в гранулах смолы ионообменный процесс между раствором и сорбентом, протекающий по схеме (1), лимитируется внутридиффузионным переносом ионов по капиллярам.

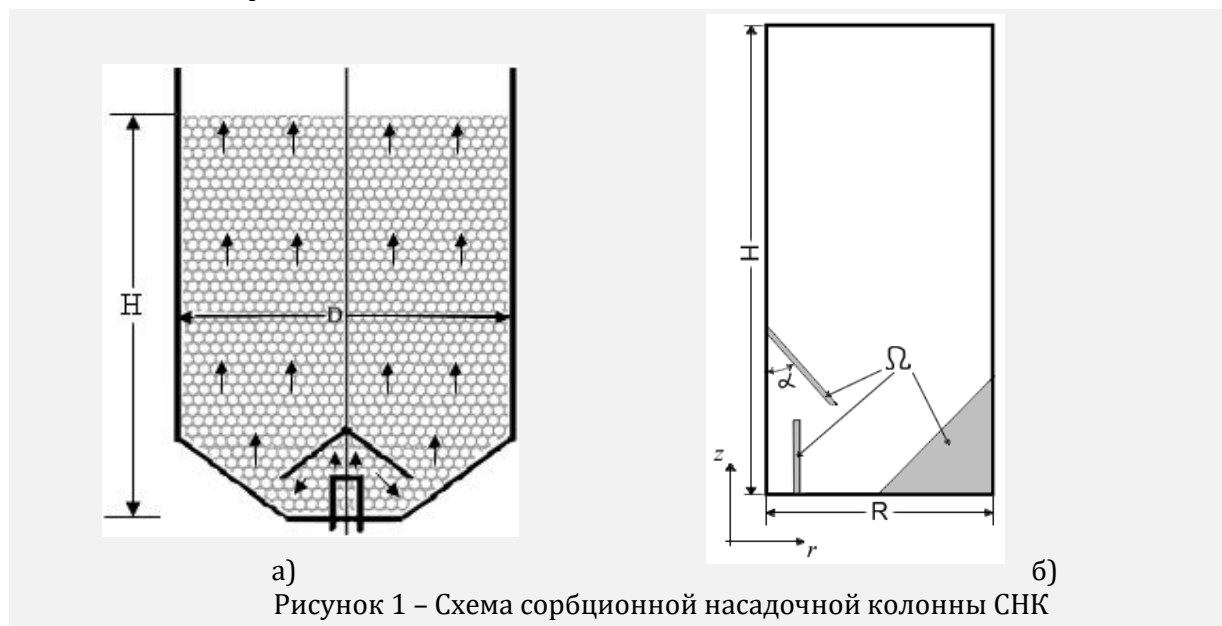


Рисунок 1 – Схема сорбционной насадочной колонны СНК

Перед входом в слой сорбента поток проходит через конический распределитель с углом раскрытия α , определяемым как угол между осью колонны и образующей распределителя.

В процессе работы колонны через заданные промежутки времени из верхней части колонны отбираются пробы раствора, которые анализируются на содержание извлекаемого минерала. Процесс сорбции продолжается до тех пор, пока средняя концентрация минерала в жидкой фазе на выходе из колонны не достигнет предельно допустимого значения. После этого наиболее насыщенная минералом нижняя часть слоя сорбента выгружается, колонна сверху дозагружается свежим сорбентом, и цикл сорбции повторяется.

Используемая в настоящее время конструкция насадочной сорбционной колонны была разработана более полувека назад эмпирическим путём на основе измерений средних значений параметров на входе и выходе колонны, то есть с использованием интегральных (осреднённых) характеристик процесса. Ограниченная информативность такого подхода в отношении локальных гидродинамических и массообменных процессов в областях сложной геометрии в течение длительного времени была обусловлена как недостаточным развитием вычислительных методов, так и ограниченными возможностями вычислительных ресурсов.

Вместе с тем, анализ только осреднённых характеристик не позволяет в полной мере оценить эффективность работы сорбера, в частности степень вовлечённости сорбента в массообменный процесс, влияние формы и размеров конического распределителя, а также средней скорости течения раствора на скорость и полноту извлечения минерала и на толщину зоны насыщения сорбента.

Очевидно, что решение указанных задач требует детального трёхмерного исследования процесса сорбции в пористом объёме сложной геометрии. Проведение такого анализа на основе современных вычислительных технологий и численных методов и составляет предмет настоящей работы.

Таким образом, целью настоящей работы является разработка физической и математической моделей процесса сорбционного извлечения оксидов урана из продуктивных растворов в насадочной ионообменной колонне сложной геометрии, оснащённой коническим распределителем потока. На основе численного моделирования проводится исследование влияния формы распределителя и скорости подачи раствора на гидродинамику потока, распределение концентрации минерала в жидкой и твёрдой фазах, а также на степень вовлечённости сорбента в массообменный процесс.

Научная новизна работы заключается в разработке сопряжённой гидродинамической и массообменной модели процесса ионообменной сорбции в сорбционной колонне сложной геометрии с использованием метода фиктивных областей, позволяющего учитывать реальные конструктивные особенности аппарата. В отличие от ранее применявшихся подходов, основанных преимущественно на анализе интегральных характеристик процесса, предложенная модель позволяет исследовать пространственное распределение гидродинамических и массообменных параметров внутри колонны и оценивать влияние конструктивных и режимных факторов на эффективность работы сорбера.

Математическая и численная модели процесса сорбции урана

Продуктивный раствор, содержащий растворённые ионы оксидов урана, по своему составу преимущественно представляет собой воду и в рассматриваемых условиях может быть аппроксимирован как несжимаемая ньютоновская жидкость с плотностью и вязкостью, близкими к соответствующим характеристикам воды.

Вследствие малости характерных размеров гранул смолы по сравнению с диаметром колонны, плотной упаковки и неподвижности сорбционного слоя, а также относительно низких скоростей потока движение раствора через слой рассматривается как фильтрационное течение в пористой среде.

Узкий гранулометрический состав и близкая к сферической форма гранул ионообменной смолы при равномерной загрузке колонны позволяют в макроскопическом приближении рассматривать сорбционный слой как однородную и изотропную пористую среду с эффективными фильтрационными характеристиками.

В силу осесимметричной конструкции сорбционной колонны и трубы подачи раствора течение жидкости и процесс сорбции также считаются осесимметричными. Соответственно, исследование трёхмерного переноса продуктивного раствора и массообмена в колонне в цилиндрической системе координат (r, φ, z) может быть сведено к осесимметричной двумерной задаче по радиальной r и осевой z координатам (рис. 1,б).

Вблизи трубы подачи продуктивного раствора и конусообразного распределителя потока число Рейнольдса может существенно превышать единицу, тогда как в основной части колонны течение сохраняет фильтрационный характер. В связи с этим движение жидкости в пористом слое описывается соотношениями теории фильтрации — законом Форхгеймера (2), применимым в широком диапазоне чисел Рейнольдса, и законом сохранения массы жидкости в порах (3) (Бэр, 1971; Коллинз, 1964; Гольдштик, 1984; Шестаков, 1995):

$$\alpha \vec{u}(r, z, t) = \alpha \phi \vec{v}(r, z, t) = -\nabla P(r, z, t), \quad (2)$$

$$\nabla \cdot \vec{u} = \nabla \cdot (\phi \vec{v}) = 0, \quad (3)$$

где $\vec{u}(r, z, t) = u_r \vec{i}_r + u_z \vec{i}_z$ — средняя скорость Дарси жидкости, $\alpha = \alpha_1 + \alpha_2 |\vec{u}|$, ϕ — пористость слоя сорбента, $\vec{v}(r, z, t) = \vec{u}/\phi = v_r \vec{i}_r + v_z \vec{i}_z$ — средняя скорость жидкости в порах, $P(r, z, t) = p(r, z, t)/\rho + \vec{g} \cdot \vec{x}$, $p(r, z, t)$ — давление в жидкости, ρ — плотность жидкости, $\vec{g}$ — ускорение силы тяжести, $\vec{x} = r \vec{i}_r + z \vec{i}_z$ — радиус-вектор точки, μ — динамический коэффициент вязкости раствора, δ — диаметр сферических гранул сорбента,

$$\alpha_1 = 633\mu(1 - \phi)/\rho\delta^2, \quad \alpha_2 = 3(1 - \phi)\phi/2\theta\delta.$$

При значениях пористости $\phi \leq 0.4$ принято, что $\theta = 0.508 - 0.56(1 - \phi)$ (Гольдштик, 1984).

Перенос ионов оксидов урана в продуктивном растворе и ионообменный процесс между жидким раствором и сорбентом является изотермичным и описывается уравнением

в частных производных (Ruthven, 1984; Гольдштик, 1984; Шестаков, 1995; Bird, 2002; Patel, 2019; Baqer et al., 2023)

$$\partial C / \partial t + \nabla \cdot (\vec{v} C) = \nabla \cdot (D \nabla C) - (\varphi^{-1} - 1) \partial \bar{C} / \partial t, \quad (4)$$

где D – гидродинамический дисперсионный тензор. Тензор D , в силу однородности и изотропности среды, является симметричным и имеет три ненулевые компоненты (Бэр, 1971; Коллинз, 1964):

$$\begin{aligned} D_{rr} &= \alpha_L \frac{v_r^2}{|\vec{v}|} + \alpha_T \frac{v_z^2}{|\vec{v}|} + D_m, \\ D_{zz} &= \alpha_T \frac{v_r^2}{|\vec{v}|} + \alpha_L \frac{v_z^2}{|\vec{v}|} + D_m, \\ D_{rz} &= D_{zr} = (\alpha_T - \alpha_L) \frac{v_r v_z}{|\vec{v}|}, \end{aligned}$$

где $\alpha_L = C_1 |\vec{v}|$ – коэффициент продольной дисперсии, пропорциональный диаметру сферических гранул-сорбентов, $\alpha_T = C_2 |\vec{v}|$ – коэффициент радиальной дисперсии, $\alpha_L / \alpha_T \approx 5$, D_m – коэффициент молекулярной диффузии жидкости.

Поле скорости жидкости, входящее в уравнение переноса ионов оксидов урана, определяется следующим образом. Из уравнения

$$(\alpha_1 + \alpha_2 |\vec{u}|) |\vec{u}| = |\nabla P|,$$

определяется модуль скорости $|\vec{u}|$ как функция модуля градиента P :

$$|\vec{u}| = f(|\nabla P|).$$

Тогда вектор скорости выражается зависимостью

$$\vec{u} = -\nabla P / (\alpha_1 + \alpha_2 f(|\nabla P|)). \quad (2')$$

Подстановка полученного выражения в закон сохранения массы (3) в цилиндрической системе координат приводит к нелинейному эллиптическому уравнению относительно давления:

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(r A \frac{\partial P}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(r A \frac{\partial P}{\partial z} \right) = 0 \quad (5)$$

где

$$A(r, z, t) = 1 / (\alpha_1 + \alpha_2 f(|\nabla P|)).$$

После решения уравнения (5) из уравнения (2') вычисляется поле скорости жидкости в сорбере.

Ионообменный процесс между раствором и сорбентом по схеме (1), лимитируется внутридиффузионным переносом и описывается дифференциальным уравнением кинетики псевдопервого порядка (Ruthven, 1984; Helfferich, 1995; Jean-Pierre Simonin, 2016; Quinn et al., 2020):

$$\partial \bar{C} / \partial t = \beta (C - \bar{C} / K_d), \quad (6)$$

где $\bar{C}$ – массовая концентрация адсорбированных сорбентом ионов оксидов урана, C – массовая концентрация ионов оксидов урана в продуктивном растворе, β – кинетический коэффициент сорбции, характеризует скорость внутридиффузионного массопереноса, K_d – коэффициент равновесия или концентрирования сорбции.

Для скорости раствора и давления в жидкости на твердых стенках колонны используется условие непротекания жидкости:

$$\alpha \vec{u} \cdot \vec{n}|_S = -\partial P / \partial n|_S = 0, \quad (7)$$

где $\vec{n}$ – нормальный к стенке колонны единичный вектор. На входе в колонну задаются площадь поперечного сечения трубы подачи S_{in} , объемный расход жидкости Q_0 и массовая концентрация минерала в растворе:

$$\vec{u} \cdot \vec{n}|_{in} = \partial P / \partial n|_{in} = \partial P / \partial z|_{in} = V_0 = Q_0 / S_{in}, \quad C|_{in} = C_{in}, \quad (8)$$

и на выходе из колонны задаются давление окружающей среды и «мягкие» условия на распределение концентрации минерала:

$$P|_{out} = P_{out}, \quad \partial C / \partial z|_{out} = 0. \quad (9)$$

В начальный момент времени сорбционная колонна заполнена жидкостью и сорбентом, не содержащим ионы оксидов урана:

$$C(\vec{x}, t = 0) = 0, \quad \bar{C}(\vec{x}, t = 0) = 0. \quad (10)$$

Входящие в уравнение (6) кинетические параметры β и K_d сорбции минерала определены с помощью сопоставления результатов расчетов с данными физического эксперимента, проведенного на сорбенте фирмы *Purolite*.

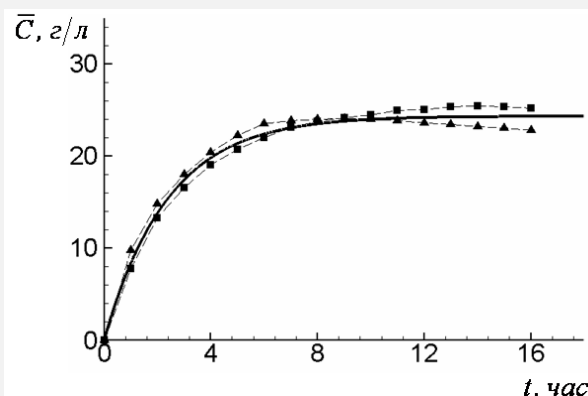


Рисунок 2 – Изменения концентрации минерала в сорбентах со временем.
Пунктирные линии со знаками – результаты эксперимента *Purolite*, сплошные линии – результаты численного расчета.

Кинетические кривые сорбции, построенные по результатам экспериментальных анализов, являлись основой для определения кинетических характеристик сорбентов: время достижения равновесия, емкость сорбентов в момент наступления равновесия, коэффициент равновесия, кинетический коэффициент сорбции (рис. 2). Рассматривая сорбционный процесс в эксперименте как массообменный процесс в идеальном реакторе, найдены значения $\beta \approx 120 \text{ час}^{-1}$ и $K_d = 286$.

Среди численных методов решения задач математической физики одним из наиболее универсальных является конечно-разностный метод. С вычислительной точки зрения данный метод наиболее эффективно реализуется на регулярных сетках в областях простой геометрии, таких как прямоугольники или их комбинации. Однако при численном исследовании задач переноса вещества, сопровождаемых физико-химическими превращениями в областях сложной формы, чаще применяются метод конечных элементов или метод конечных объемов (Флетчер, 1991; Morianou, 2023; Šimůnek, 2024 и др.).

Наряду с указанными подходами для решения задач в нерегулярных областях широко используется метод фиктивных областей (МФО) (Вабищевич, 2017; Thirumalaisamy et al, 2022; Corti et al, 2024; Kale et al, 2025), получивший значительное распространение в последние годы. В методе фиктивных областей исходная задача, заданная в нерегулярной

области Ω , продолжается на регулярную расчётную область R , образованную объединением физической области Ω и фиктивной области Ω_f , так что $R = \Omega \cup \Omega_f$ (рис. 3).

Теоретически, сходимость метода связано с получением однородного “inf - sup” условия, которое приводит к условию согласования между граничной сеткой и однородной сеткой (Вабищевич, 2017). Другим важным аспектом является то, что условие устойчивости приведенной схемы аналогично соответствующим условиям конечно-разностных схем.

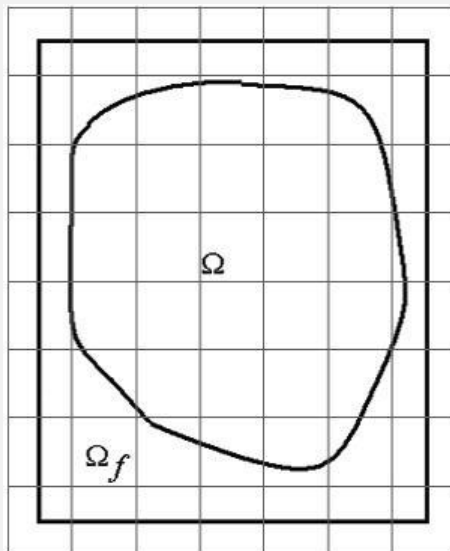


Рисунок 3 – Схемы физической и вычислительной областей в МФО.
Вычислительная область $R = \Omega \cup \Omega_f$.

В рамках метода фиктивных областей граничные условия продолжаются в фиктивную область следующим образом: для членов, содержащих производные первого порядка (конвективные члены), продолжение осуществляется по направлению потока – по младшей производной; для членов второго порядка (дисперсионно-диффузионные члены) – по старшей производной, что обеспечивает корректную аппроксимацию производных на границе (Вабищевич, 2017).

Применительно к решению эллиптического уравнения для давления (4) в методе фиктивных областей вводится коэффициент A_ε , определяемый следующим образом:

$$A_\varepsilon = H(\vec{x})rA + (1 - H(\vec{x}))\varepsilon, \quad (11)$$

где

$$H(\vec{x}) = \begin{cases} 1, & \vec{x} \in \Omega \\ 0, & \vec{x} \in \Omega_f \end{cases}$$

функция Хевисайда. Здесь ε - малая величина, $\varepsilon \ll rA$. После этого решение уравнения для давления (4) в нерегулярной физической области Ω с граничными условиями Неймана сводится к решению уравнения

$$\partial(A_\varepsilon \partial P / \partial r) / \partial r + \partial(A_\varepsilon \partial P / \partial z) / \partial z = 0 \quad (12)$$

в регулярной области R . Значения поля давления и его производные продолжаются в фиктивную область таким образом, чтобы обеспечить корректную аппроксимацию вторых производных на границе раздела областей. В частности, в задаче Неймана для давления на физической границе $\partial\Omega$ формулируются условия согласования:

$$[P(\vec{x}, t)]_{\partial\Omega} = 0, \quad \left[\sum_{i,j=1}^2 n_i A_\varepsilon \partial P / \partial x_j \right]_{\partial\Omega} = 0, \quad (13)$$

где $\vec{n}$ – внешняя нормаль к границе $\partial\Omega$, а $[\cdot]_{\partial\Omega}$ означает скачок функции на границе раздела физической и фиктивной областей.

Уравнение переноса ионов оксида урана в регулярной области R записывается следующим образом:

$$\partial C / \partial t + \nabla \cdot (\vec{v} C) = \nabla \cdot (D_\varepsilon \nabla C) - (\phi^{-1} - 1) H(\vec{x}) \partial \bar{C} / \partial t, \quad (14)$$

где

$$D_\varepsilon = H(\vec{x}) D + (1 - H(\vec{x})) \varepsilon I,$$

I – единичный тензор.

Уравнение сорбции (6) в физической области сохраняет свой вид:

$$\partial \bar{C}(\vec{x}, t) / \partial t = \beta (C(\vec{x}, t) - \bar{C}(\vec{x}, t) / K_d). \quad (15)$$

В фиктивной (дополненной) области Ω_f принимается условие

$$\bar{C}(\vec{x}, t) = 0.$$

Численное решение и анализ результатов

В силу нелинейности система уравнений (12), (14), (15) с граничными условиями (7) – (9), (13) и начальными условиями (10) решается совместно с применением численных методов.

Последовательность численного решения задачи в регулярной области R на каждом шаге интегрирования по времени имеет следующий вид.

1. Из уравнения (12) с граничными условиями (7)–(9) и (13) численным методом определяется поле давления. Нелинейное эллиптическое уравнение для давления решается численно методом Рунге (Животенко, 2021).

2. Далее, после определения поля давления используя соотношение

$$\phi \vec{v} = - \nabla P / (\alpha_1 + \alpha_2 f(|\nabla P|))$$

вычисляется поле скоростей.

3. Затем из уравнения переноса (14) с граничными и начальными условиями (8)–(10) численным методом определяется концентрация минерала в жидкой фазе. Решение проводится с применением схемы Кранка–Никольсона (Флетчер, 1991).

4. Решением обыкновенного дифференциального уравнения кинетики сорбции (6) с начальным условием (10) завершается очередной шаг интегрирования задачи по времени. Уравнение кинетики сорбции при известном на каждом временном шаге значении концентрации минерала в жидкой фазе C^{n+1} решается аналитический.

В работе выполнено численное исследование влияния наличия конического распределителя потока на входе в сорбер, его геометрической формы, а также величины расхода раствора на характеристики сорбционного процесса.

В силу осевой симметрии задачи относительно оси Oz расчёты проводились в прямоугольной вычислительной области

$$0 < r < R, \quad 0 < z < H$$

на разностной сетке размерностью 150×600 .

Проведено исследование влияния формы конического распределителя потока продуктивного раствора и скорости подачи раствора в колонну на эффективность работы сорбера и полноту ионообменного процесса. Рассмотрены следующие варианты:

1. конусный распределитель потока отсутствует, объемный расход раствора $Q_0 = 0.35$ м³/ч;

2. вершина конусного распределителя фиксирована, угол α между осью колонны и образующей распределителя равен 45° и 60° , $Q_0 = 0.35$ м³/ч;

3. различные расходы подачи раствора – $Q_0 = 0.35$ м³/ч и $Q_0 = 0.7$ м³/ч – при одинаковом угле раскрытия конического распределителя $\alpha = 45^\circ$.

Геометрические и режимные параметры сорбционной колонны приняты близкими к используемым в промышленной практике: $H = 6$ м, $R = D/2 = 1.5$ м, $d = 0.3$ м, $\delta = 0.5$ мм.

На рис. 4–8 представлены результаты расчётов пространственного распределения давления, скорости потока и концентрации минерала в неподвижной фазе (сорбенте) при отсутствии конусного распределителя ($Q_0=0.35 \text{ м}^3/\text{ч}$).

На рис. 4 представлены результаты расчёта распределения давления (кПа) и числа Рейнольдса. Число Рейнольдса вычислено по диаметру подводящей трубы продуктивного раствора $Re = V_0 \rho d / \mu$; при определении по диаметру гранул ионообменной смолы его значение на два порядка меньше. Как и ожидалось, вблизи подводящей трубы, площадь поперечного сечения которой в $(D/d)^2$ раз меньше площади поперечного сечения колонны, давление и скорость жидкости существенно выше, чем в удалённых от неё областях.

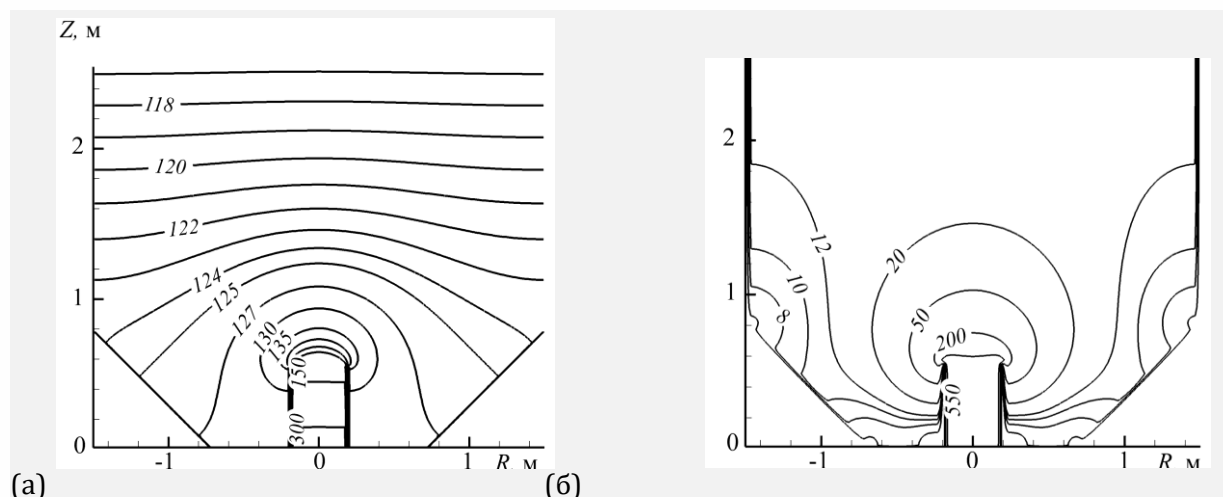


Рисунок 4 – (а) Распределение давления в жидкости (кПа), (б) распределение числа Рейнольдса течения жидкости в порах, $Q_0=0.35 \text{ м}^3/\text{ч}$.

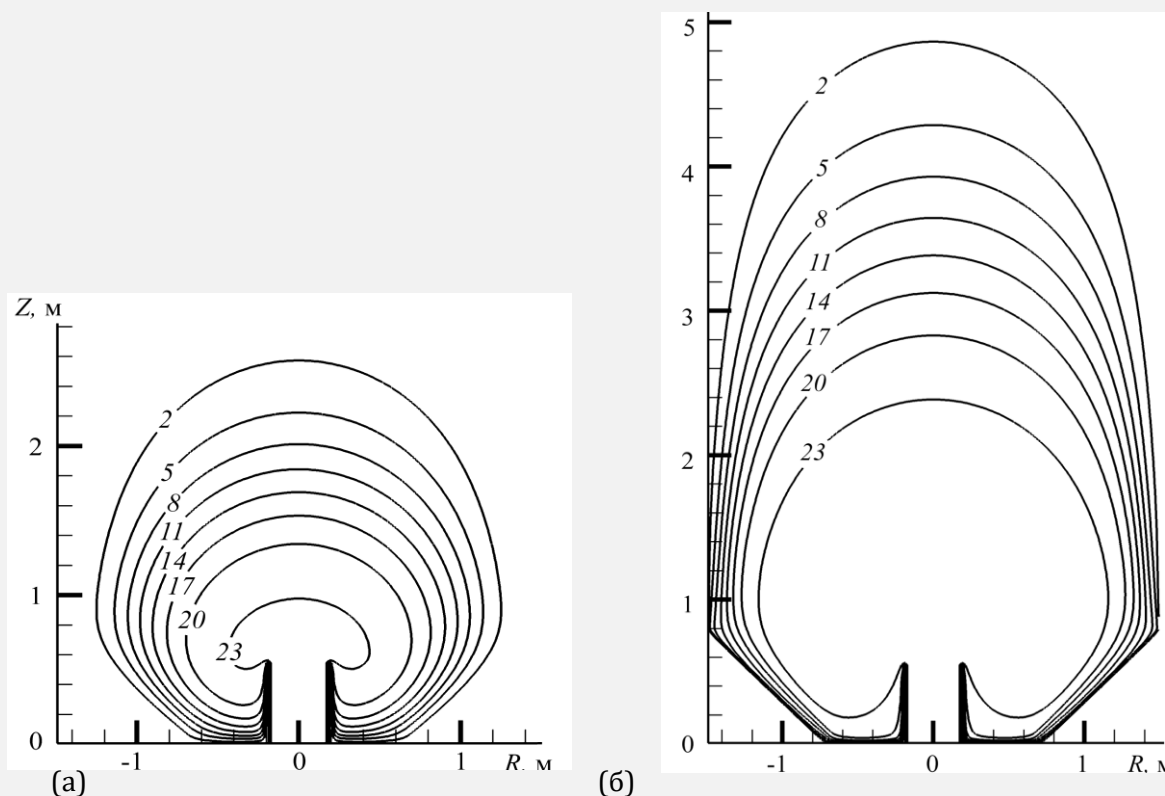


Рисунок 5 – Распределение концентрации минерала в неподвижной фазе (сорбенте) (г/л) через 10 (а) и 40 (б) часов после начала работы сорбера, $Q_0=0.35 \text{ м}^3/\text{ч}$.

На рис. 5 представлены распределения концентрации минерала в неподвижной фазе через 10 и 40 часов после начала работы сорбера. Видно, что основной поток, содержащий ионы оксидов урана, развивается в центральной части колонны, тогда как пристеночная зона сорбента вовлекается в сорбционный процесс значительно слабее. Это особенно заметно на рис. 6, где показано распределение концентрации минерала в твердой фазе по поперечному сечению колонны на уровне $z=1.5$ м в различные моменты времени после начала работы сорбера. Видно, что средняя концентрация минерала по поперечному сечению колонны

$$\bar{C}_Z(Z, t) = \int_0^{R(Z)} r \bar{C}(z, r, t) dr / (\pi R^2(Z))$$

составляет менее 60% от максимально возможной концентрации 23 г/л (см. рис. 6 и 7).

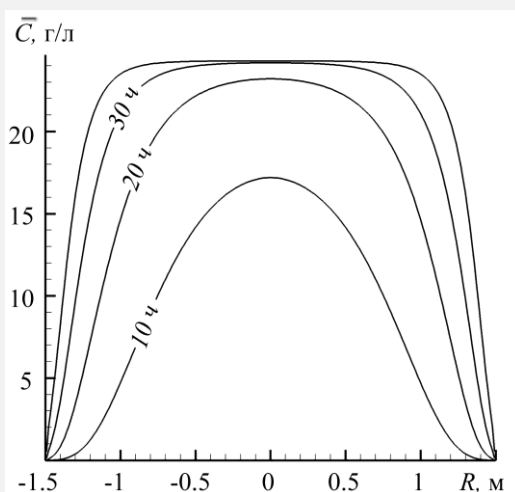


Рисунок 6 – Распределение концентрации минерала по поперечному сечению колонны в неподвижной фазе на уровне 1.5 м в различные моменты времени.

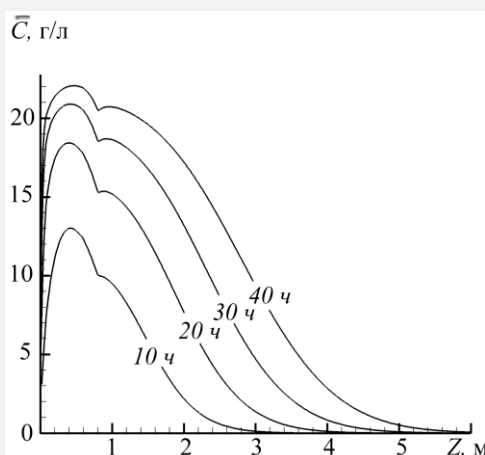


Рисунок 7 – Распределение средней по поперечному сечению колонны концентрации минерала в неподвижной фазе в различные моменты времени.

Также проанализирована степень объёмного вовлечения сорбента в процесс сорбции, в частности однородность протекания сорбционного процесса в поперечном сечении колонны, что соответствует принятой практике эксплуатации промышленных сорбционных колонн.

Для оценки степени вовлеченности сорбента (или эффективности работы сорбера) рассчитывалось отношение суммарной массы сорбированного минерала в слое высотой z

$$M(z, t) = \int_0^z \int_0^{R(z)} r \bar{C}(z, r, t) dr dz$$

к максимально возможной массе минерала, которая может быть удержана сорбентом в данном объеме:

$$M_m(z, t) = \int_0^z \int_0^{R(z)} r \bar{C}_{max}(r, z, t) dr dz = V_c K_d C_{in},$$

где $V_c(z)$ – объем колонны высотой z .

На рис. 8 представлена зависимость отношения

$$\mu(z, t) = M(z, t) / M_m(z, t)$$

от высоты и времени:

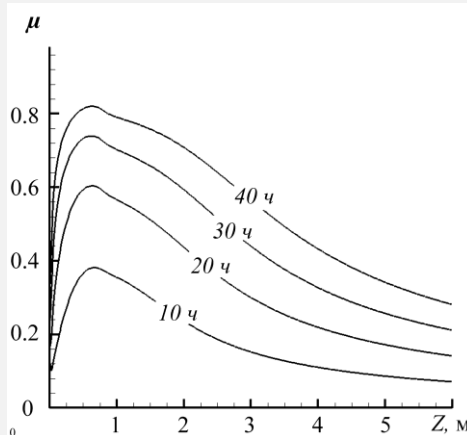


Рисунок 8 – Степень вовлеченности сорбента в процесс сорбции в зависимости от высоты и времени.

Таким образом, при отсутствии конусного распределителя установлено, что основной поток, содержащий ионы оксидов урана, формируется в центральной части колонны, тогда как пристеночная зона сорбента вовлекается в сорбционный процесс существенно слабее. Средняя по поперечному сечению колонны концентрация минерала не превышает две трети от максимально возможной (равновесной) концентрации.

Анализ степени вовлеченности сорбента (эффективности работы сорбера) также свидетельствует о низкой эффективности использования слоя сорбента.

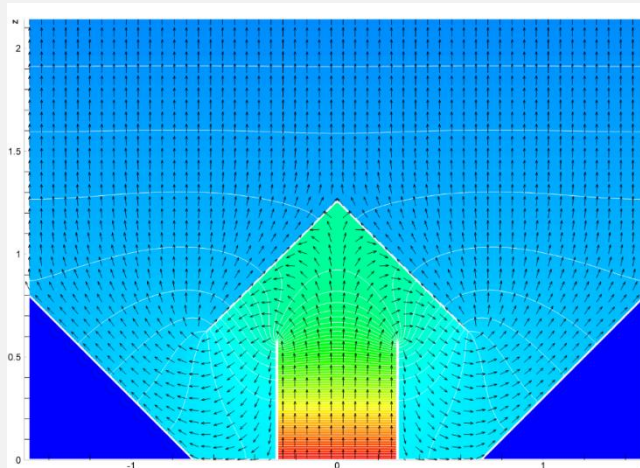
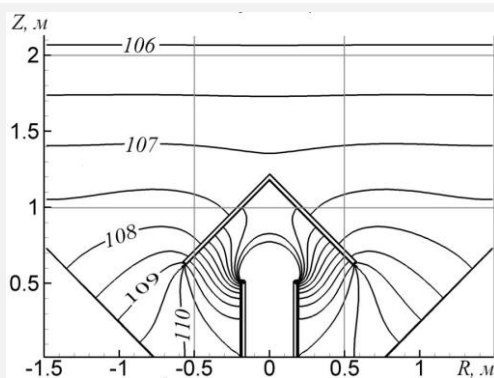


Рисунок 9 – Поля скорости течения и давления в жидкости вблизи входной трубы и конического распределителя потока раствора в колонну при угле раскрытия $2\alpha=90^\circ$. Стрелками показаны направление и локальная величина скорости течения; цветовая шкала отражает распределение давления.

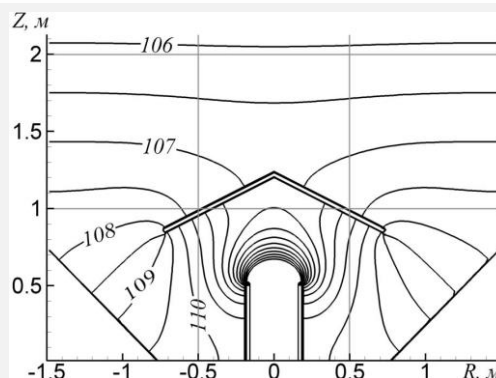
Далее рассмотрены варианты конструкции распределителя в сорбере, при которых угол между осью колонны и образующей конуса составляет 45° и 60° при расходе раствора $Q_0 = 0.35 \text{ м}^3/\text{ч}$. На рис. 9–16 приведены результаты расчётов распределений давления, скорости фильтрации и концентрации минерала в твёрдой фазе.

На рис. 9 представлены детальные поля скорости и давления вблизи трубы подачи и конического распределителя потока при угле $2\alpha=90^\circ$, вполне соответствующие форме сорбционной колонны и фильтрационному характеру течения.

На рис. 10–16 представлены результаты сравнительного анализа работы сорбционной колонны при углах раскрытия конического распределителя $\alpha = 45^\circ$ и 60° . Расход раствора во всех случаях одинаков и равен $Q_0 = 0.35 \text{ м}^3/\text{ч}$.



$2\alpha=90^\circ$



$2\alpha = 120^\circ$

Рисунок 10 – Изолинии давления в жидкости в сорбере (кПа). Углы раскрытия распределителя $2\alpha = 90^\circ$ и 120° , $Q_0 = 0.35 \text{ м}^3/\text{ч}$.

На рис. 10–11 показаны распределения давления в жидкости и местного числа Рейнольдса

$$Re = Vd\rho/\mu,$$

определенного по диаметру входной трубы. Как видно из результатов расчётов, давление, также, как и местное число Рейнольдса, быстро падает в окрестности конического распределителя потока раствора в обеих колоннах. При большем угле раскрытия падение

давления вблизи конуса несколько выше, чем при меньшем угле. Однако далее по потоку давление в обоих случаях быстро выравнивается.

Закон Дарси, применимый при $Re \leq 10$, выполняется практически во всей области за коническим распределителем (рис. 11).

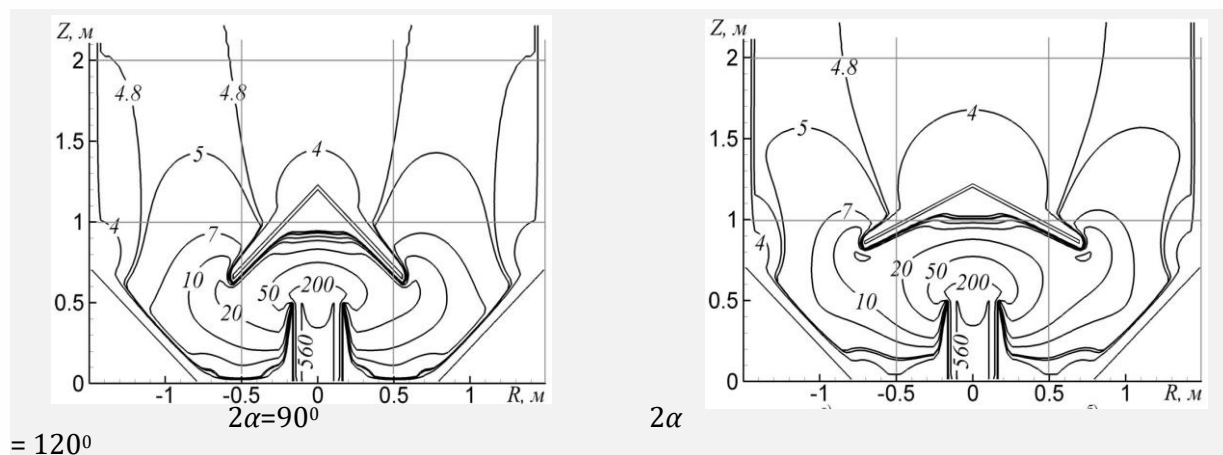


Рисунок 11 – Изолинии местного числа Рейнольдса течения жидкости в порах при углах раскрытия распределителя $2\alpha = 90^\circ$ и 120° , $Q_0 = 0.35 \text{ м}^3/\text{ч}$.

Для более детального анализа влияния угла раскрытия конического распределителя на процесс сорбции на рис. 12 и 13 приведены распределения минерала, поглощённого сорбентом, в колонне при двух различных углах раскрытия через 10 и 40 часов после начала работы сорбера. Из рисунков видно, что при большем угле раскрытия зона насыщения распространяется дальше вдоль колонны. Вместе с тем область, не вовлечённая в сорбционный процесс непосредственно за распределителем, оказывается заметно шире по сравнению со случаем меньшего угла раскрытия.

Концентрация минерала в каждом сечении колонны с течением времени возрастает до достижения предельного – равновесного – значения, что следует из уравнения (6), описывающего сорбцию минерала из жидкой фазы в твёрдую.

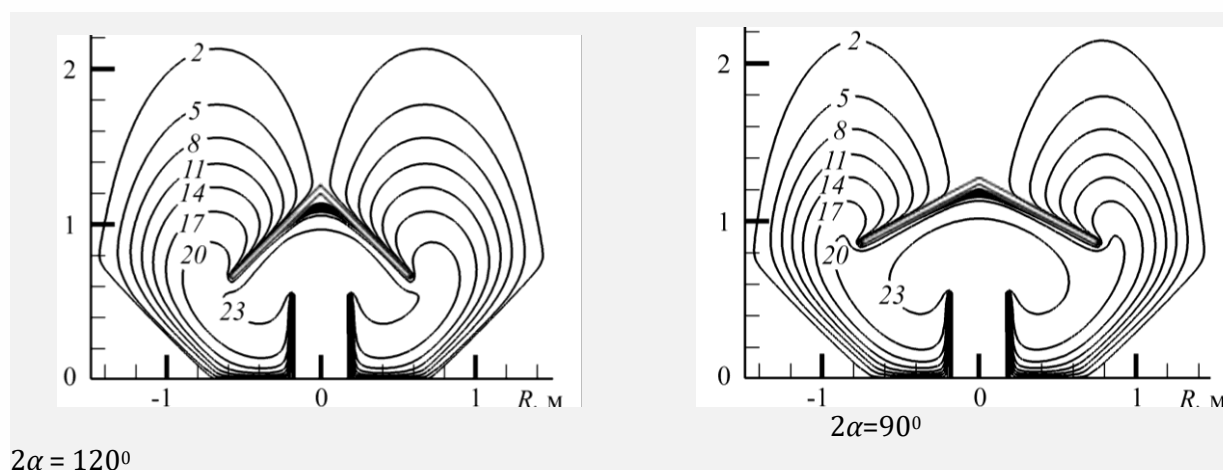
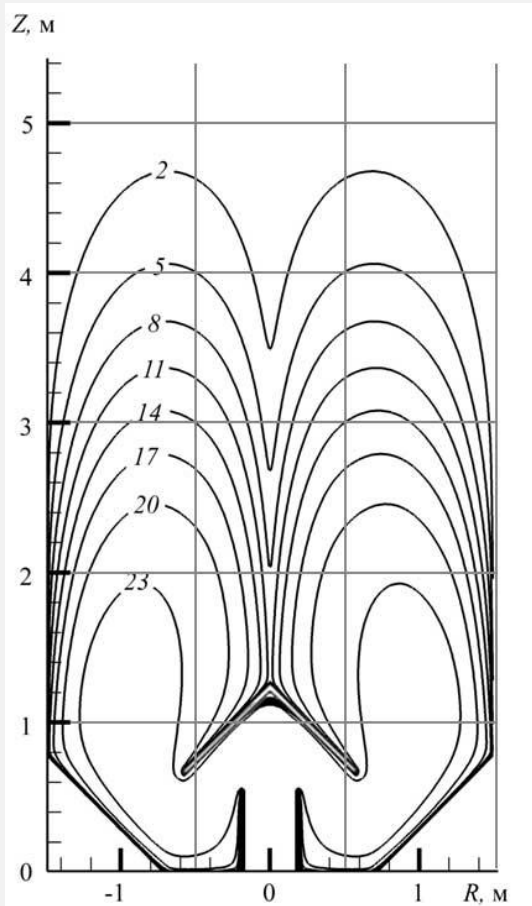
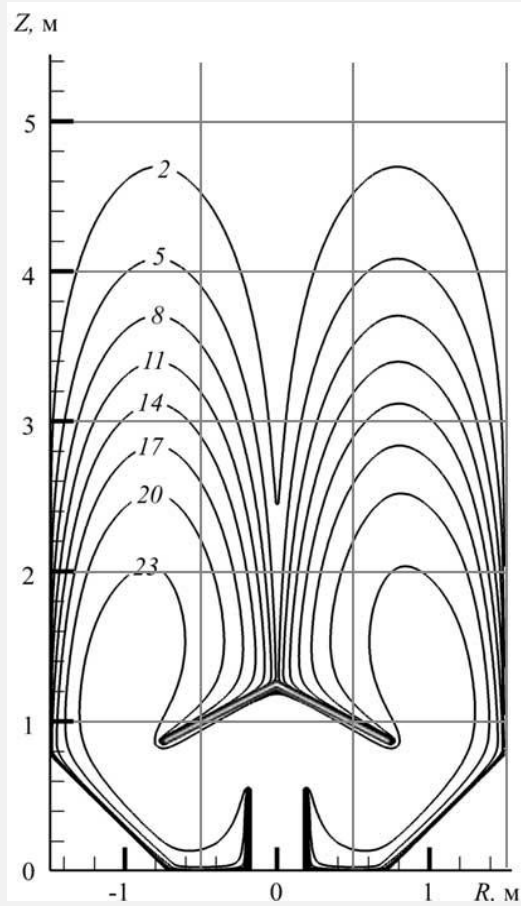


Рисунок 12 – Распределение минерала в неподвижной фазе через 10 часов после начала работы сорбера при углах раскрытия распределителя $2\alpha = 90^\circ$ и $2\alpha = 120^\circ$, $Q_0 = 0.35 \text{ м}^3/\text{ч}$. Числа на изолиниях соответствуют массовой концентрации минерала (г/л).

Анализ графиков показывает, что распределение концентрации минерала в неподвижной фазе формируется в виде волны насыщения, распространяющейся вдоль колонны; при этом фронт волны постепенно растягивается по направлению потока. Данное явление обусловлено продольной дисперсией минерала в пористом слое сорбента.

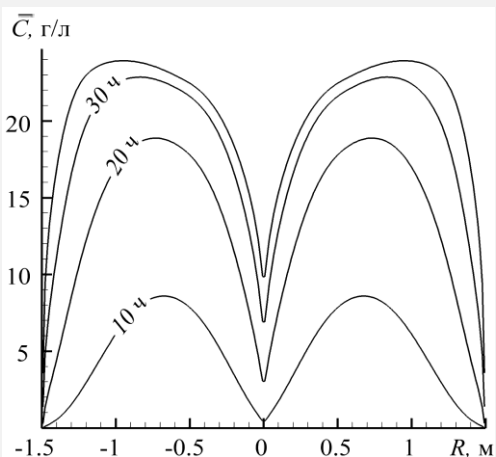


$2\alpha = 90^\circ$

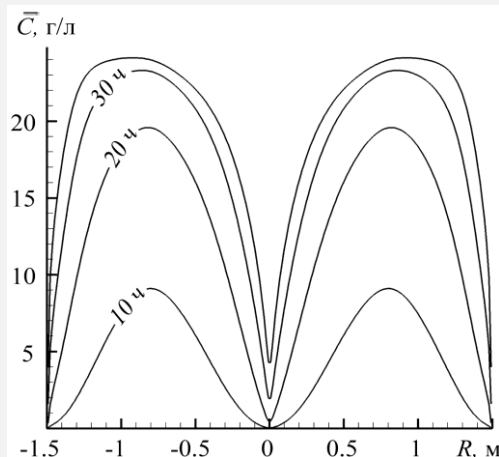


$2\alpha = 120^\circ$

Рисунок 13 – Распределение минерала в неподвижной фазе через 40 часов после начала работы сорбера при углах раскрытия распределителя $2\alpha = 90^\circ$ и $2\alpha = 120^\circ$, $Q_0 = 0.35$ м³/ч. Числа на изолиниях соответствуют массовой концентрации минерала (г/л).



$2\alpha = 90^\circ$



$2\alpha = 120^\circ$

Рисунок 14 – Поперечное распределение концентрации минерала в неподвижной фазе на уровне $z = 1.5$ м от входа в сорбер при углах раскрытия распределителя $2\alpha = 90^\circ$ и $2\alpha = 120^\circ$, $Q_0 = 0.35$ м³/ч.

На рис. 14 представлено поперечное распределение концентрации минерала в неподвижной фазе на уровне $z = 1.5$ м от входа в сорбер в различные моменты времени при

разных углах раскрытия распределителя. Видно, что при угле $2\alpha = 120^\circ$ волна насыщения распространяется дальше по колонне, чем при угле $2\alpha = 90^\circ$.

Распределение средней по поперечному сечению концентрации минерала, адсорбированного сорбентом, по высоте колонны определяется выражением

$$\bar{C}_z(z, t) = \frac{1}{\pi R^2(z)} \int_0^{R(z)} r \bar{C}(z, r, t) dr.$$

На рис. 15 показано распределение средней по сечению концентрации $\bar{C}_z$ в различные моменты времени при разных углах раскрытия распределителя. Влияние угла раскрытия на общий характер распределения концентрации невелико и проявляется преимущественно на начальной стадии процесса: при более узком распределителе ($2\alpha = 90^\circ$) наблюдается более интенсивная адсорбция минерала, что связано с повышенной скоростью фильтрационного потока в данной области сорбера (см. рис. 11).

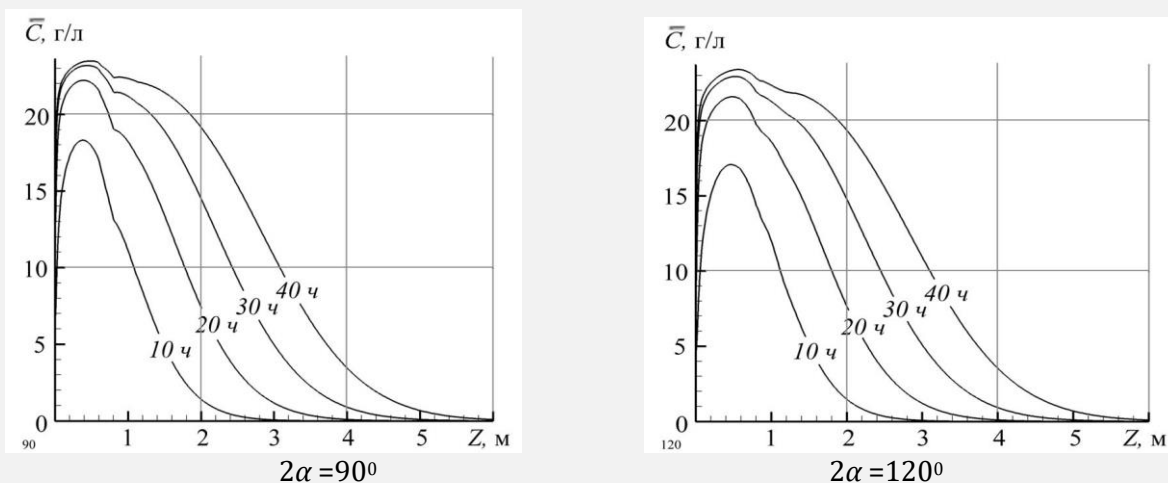


Рисунок 15 – Распределение средней по поперечному сечению колонны концентрации минерала в неподвижной фазе по высоте колонны в различные моменты времени при углах раскрытия распределителя $2\alpha = 90^\circ$ и $2\alpha = 120^\circ$, $Q_0 = 0.35 \text{ м}^3/\text{ч}$.

Эта особенность также наглядно представлена на рис. 16, где показано распределение степени вовлеченности сорбента в процесс сорбции вдоль высоты колонны при различных углах раскрытия конического распределителя.

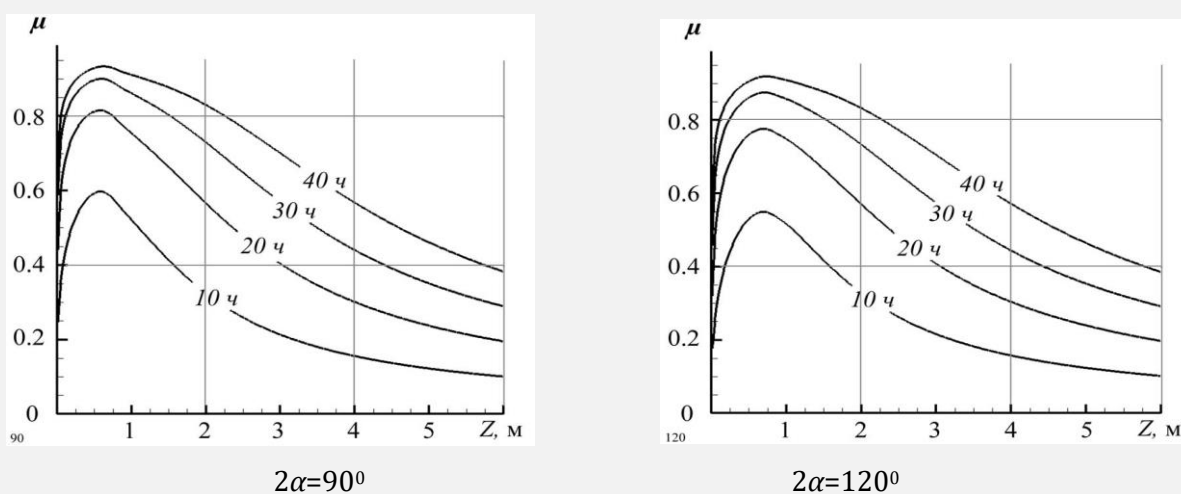


Рисунок 16 – Распределение степени вовлеченности сорбента в процесс сорбции по высоте колонны при углах раскрытия распределителя $2\alpha = 90^\circ$ и $2\alpha = 120^\circ$, $Q_0 = 0.35 \text{ м}^3/\text{ч}$.

На основании проведенных исследований можно заключить, что неравномерное распределение концентрации оксидов урана по поперечному сечению сорбера свидетельствует о неполной сорбции минерала сорбентом и указывает на недостаточную эффективность работы колонны. В частности,

1. основной объем минерала в подвижной и неподвижной фазах формирует кольцообразную цилиндрическую область толщиной примерно в два раза меньше радиуса колонны;
2. массовая концентрация минерала в центральной части колонны в обеих фазах значительно ниже полной насыщенности сорбента;
3. конический распределитель потока на входе в сорбер не обеспечивает равномерного распределения раствора по поперечному сечению колонны.

Далее на рис. 17–21 представлены результаты сравнительного анализа работы сорбционной колонны при двух различных расходах подачи раствора: $Q_0=0.35 \text{ м}^3/\text{ч}$ и $Q_0=0.7 \text{ м}^3/\text{ч}$.

Во всех случаях угол раскрытия конического распределителя одинаков и составляет $2\alpha=90^\circ$.

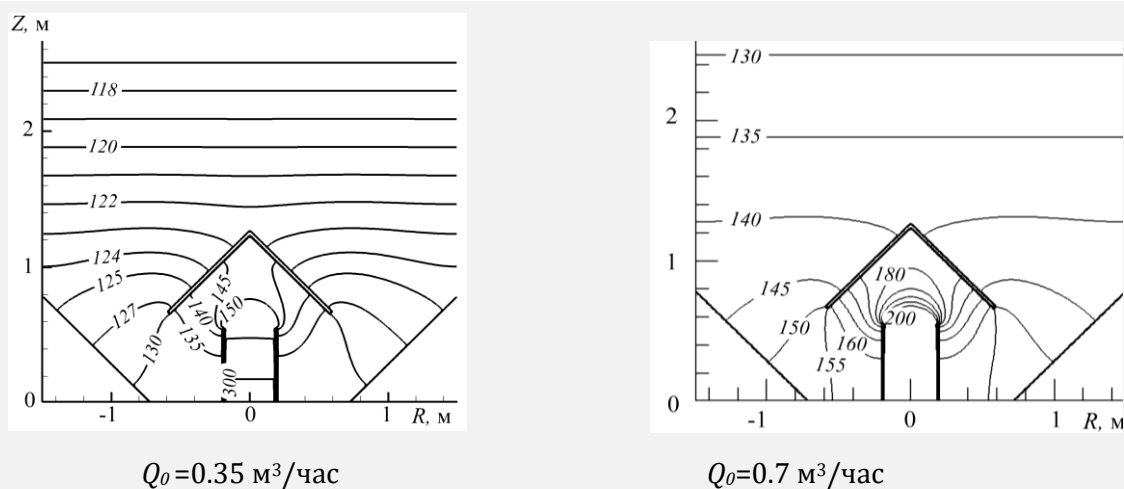


Рисунок 17 – Изолиний давления в жидкой фазе в колонне (кПа).

С увеличением расхода раствора существенно возрастает градиент давления, следовательно, и гидравлическое сопротивление слоя смолы. Значительная часть падения давления приходится на область между входной трубой и распределителем потока, где скорость жидкости максимальна (рис. 17). Местное число Рейнольдса, как и градиент давления, резко уменьшается за коническим распределителем в обеих колоннах (рис. 17 и 18).

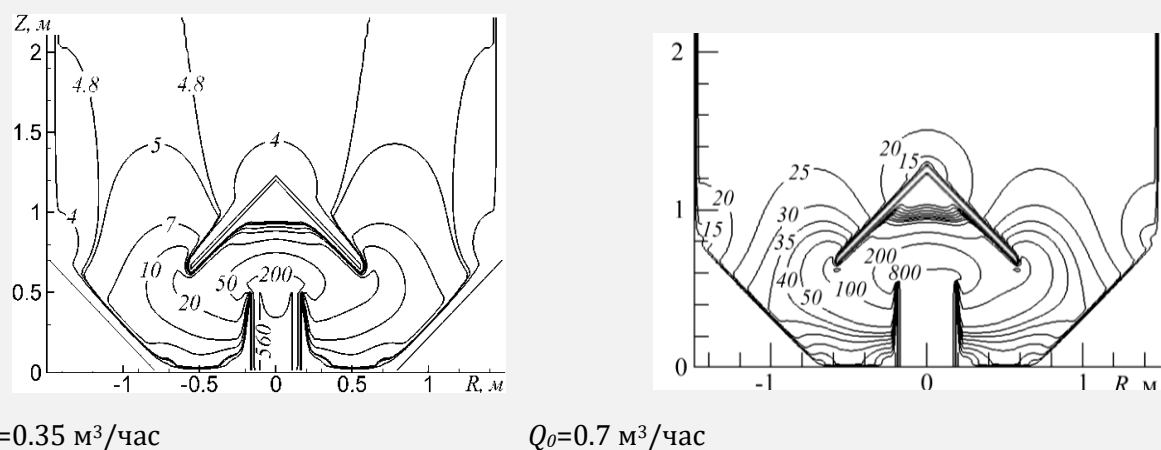


Рисунок 18 – Изолиний местного числа Рейнольдса течения жидкости в порах.

Для эффективного использования сорбента в проточной колонне число Дамкёлера

$$Da = \beta H/V$$

должно удовлетворять условию $Da \geq 1$, что обеспечивает формирование узкой зоны массообмена и эффективную работу колонны (Bird et al.).

При практических значениях параметров:

$$\beta = 120 \text{ ч}^{-1}, \quad \varphi = 0.35, \quad H = 6 \text{ м}, \quad R = 1.5 \text{ м}, \quad S = \pi R^2, \quad Q > 0.35 \text{ м}^3/\text{ч}, \quad V = Q/(\varphi S),$$

гидродинамическое время пребывания раствора в колонне $\tau_{\text{гид}} = H/V$ значительно превышает характерное время сорбции $\tau_{\text{кин}} = 1/\beta$. Следовательно, $\tau_{\text{гид}} \gg \tau_{\text{кин}}$, $Da \gg 1$, или $\beta \gg V/H$. То есть, сорбция протекает значительно быстрее, чем конвективный перенос. В этом случае структура зоны массообмена определяется главным образом гидродинамикой потока и продольной дисперсией.

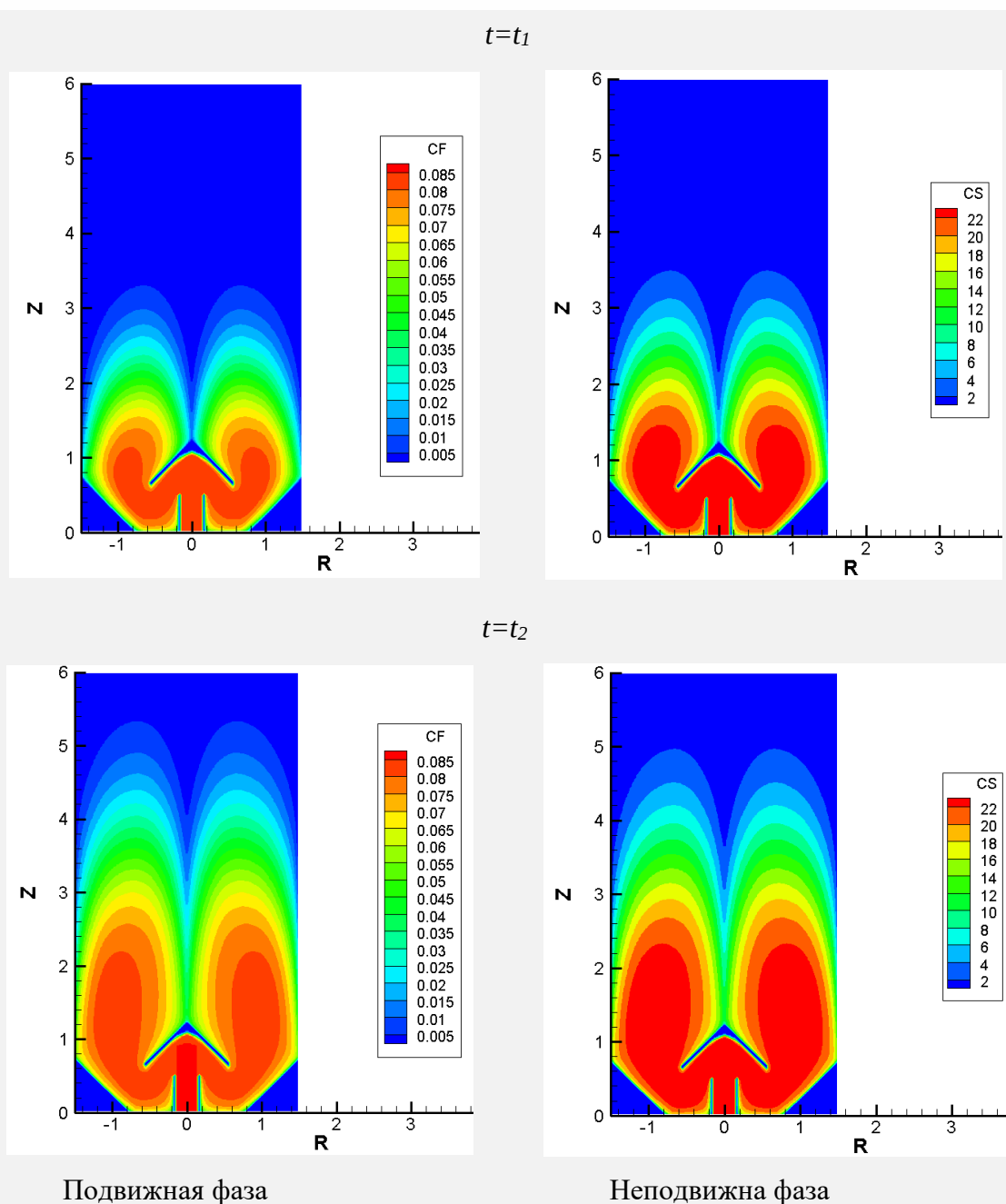


Рисунок 19 – Распределения концентрации минерала (г/л) в жидкой (подвижной) и неподвижной фазах в два различных момента времени $t = t_1$ и $t = t_2$.

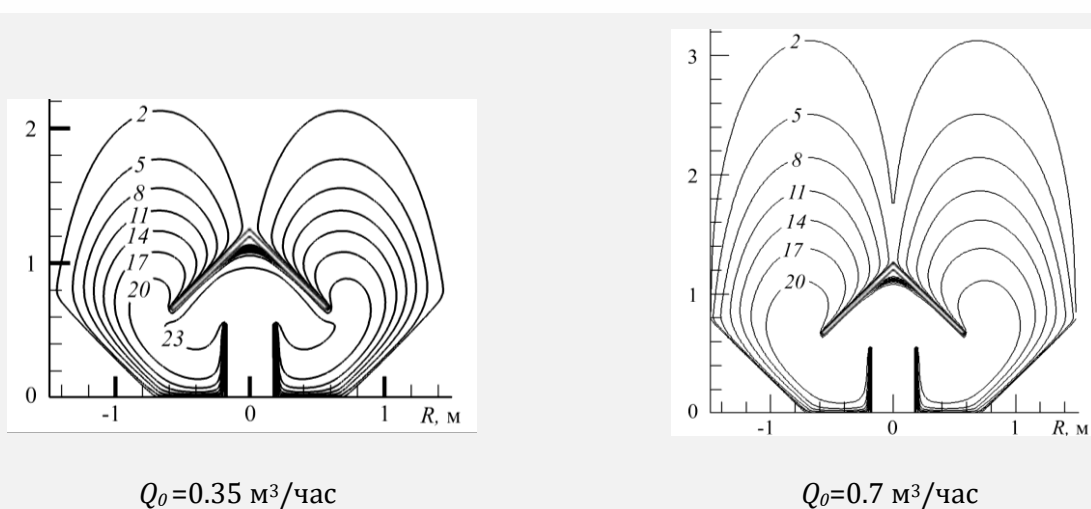
Действительно, при $\beta \gg V/H$ из уравнений (4) и (6) следует

$$\bar{C} \approx K_d C,$$

что заметно на рисунках 19.

Таким образом для используемых параметров сорбционной колонны сорбция оксидов урана по сравнению с конвективным переносом минерала протекает практически мгновенно, и ионообменный процесс лимитируется главным образом гидродинамикой потока. Это наглядно подтверждается цветными иллюстрациями на рис. 19, где представлены распределения минерала в подвижной (жидкой) и неподвижной (адсорбированной) фазах в два различных момента времени.

(а) Через 10 часов после начала работы сорбера



(б) Через 20 часов после начала работы сорбера

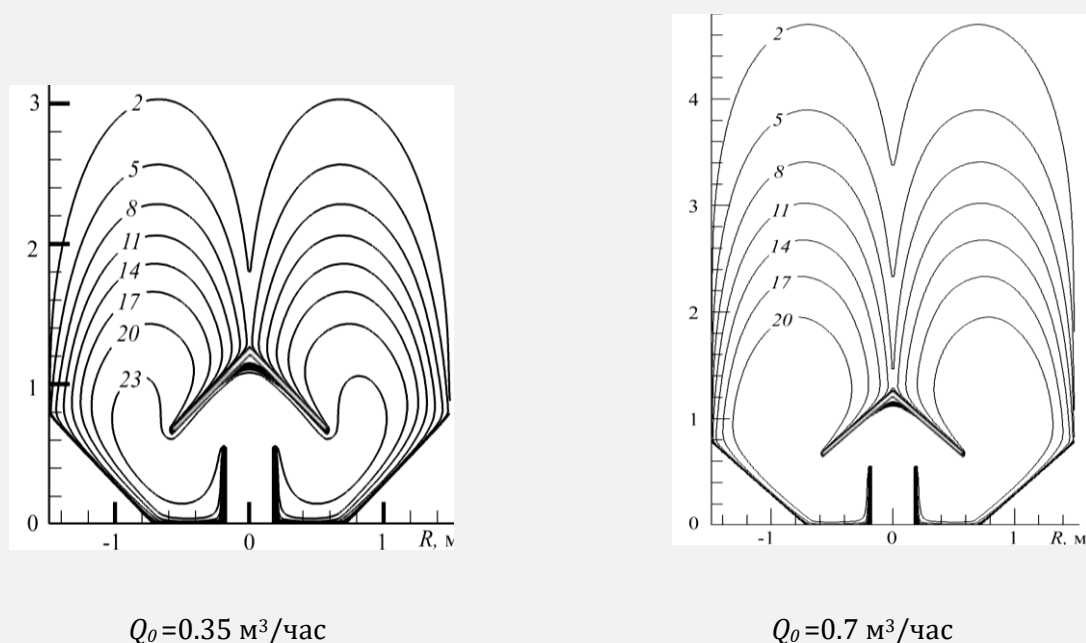


Рисунок 20 – Распределение минерала в неподвижной фазе при различных скоростях потока в трубе подачи через 10 и 20 часов после начала работы сорбера. Числа на изолиниях соответствуют массовой концентрации минерала (г/л).

Из проведенных расчетов также вытекает, что увеличение расхода раствора (средней линейной скорости) в два раза приводит к расширению фронта сорбции (ширины зоны массообмена) примерно в 1,5 раза (рис. 20 а, б). Это обусловлено увеличением коэффициента продольной дисперсии, пропорционального продольной скорости потока. Чрезмерное увеличение расхода раствора также вызывает существенный рост гидравлического сопротивления слоя смолы и увеличения энергозатрат.

Заключение

В работе разработаны физическая, математическая и численная модели процесса сорбции оксидов урана из продуктивного раствора в насадочной ионообменной колонне с коническим распределителем потока, установленным перед трубой подачи раствора.

Движение жидкости в пористом слое описано соотношениями теории фильтрации – законом Форхгеймера и законом сохранения массы жидкости в порах. Массообменный процесс между раствором, содержащим ионы оксидов урана, и ионообменной смолой описан уравнением конвективно-диффузионного переноса вещества и уравнением кинетики сорбции.

Для численного исследования сорбционного процесса в области сложной формы применён метод фиктивных областей. Решение уравнения для давления выполнено методом Рунге, а решение уравнения переноса минерала в жидкой фазе — с использованием схемы Кранка–Никольсона. Уравнение кинетики сорбции при известном значении концентрации минерала в жидкой фазе на каждом временном шаге решается аналитически.

Разработан программный комплекс, позволяющий проводить детальный анализ гидродинамики и массообменных процессов в сорбционной колонне произвольной формы и исследовать влияние конструктивных и режимных параметров на эффективность её работы.

На основе численного моделирования определены кинетические параметры сорбента фирмы Purolite – кинетический коэффициент сорбции β и коэффициент распределения K_d .

Проведено исследование влияния формы конического распределителя потока и скорости подачи раствора на эффективность работы сорбционной колонны. Рассмотрены следующие варианты:

1. отсутствие распределителя при расходе раствора $Q_0=0.35 \text{ м}^3/\text{ч}$;
2. распределитель с фиксированной вершиной и углами раскрытия $\alpha=45^\circ$ и $\alpha=60^\circ$ при $Q_0=0.35 \text{ м}^3/\text{ч}$;
3. различные расходы раствора $Q_0=0.35$ и $0.7 \text{ м}^3/\text{ч}$ при одинаковом угле раскрытия распределителя $\alpha=45^\circ$.

Геометрические и режимные параметры колонны приняты близкими к используемым в промышленной практике.

Установлено, что при отсутствии конического распределителя основной поток, содержащий ионы оксидов урана, формируется в центральной части колонны, тогда как пристеночная зона сорбента вовлекается в сорбционный процесс значительно слабее. Средняя по поперечному сечению колонны концентрация минерала не превышает 60 % от максимально возможной равновесной концентрации, что свидетельствует о неполном использовании сорбционного слоя.

Численные расчёты показали, что:

- давление и местное число Рейнольдса резко уменьшаются в области конического распределителя, после чего их значения быстро выравниваются вдоль колонны;
- зона насыщения сорбента минералом при большем угле раскрытия распределителя распространяется дальше вдоль колонны;
- на начальной стадии процесса степень вовлечённости сорбента при большем угле раскрытия несколько ниже, что связано с повышенной скоростью фильтрационного потока вблизи распределителя.

Показана возможность определения высоты выгружаемого насыщенного слоя сорбента при достижении предельно допустимой концентрации минерала в выходящем растворе.

Установлено, что неравномерное распределение концентрации оксидов урана по поперечному сечению колонны приводит к снижению эффективности использования сорбционного слоя. Основной объём минерала концентрируется в кольцевой области, расположенной между центральной и пристеночной зонами колонны.

Проведён сравнительный анализ работы колонны при расходах раствора $Q_0=0.35$ и $0.7 \text{ м}^3/\text{ч}$. Показано, что увеличение расхода раствора в два раза приводит к расширению фронта сорбции примерно в 1.5 раза вследствие роста продольной дисперсии. Одновременно возрастает гидравлическое сопротивление слоя смолы и увеличиваются энергозатраты на перекачку раствора.

Разработанная методика моделирования может быть использована для анализа эффективности работы действующих сорбционных колонн в добывающих подразделениях АО «НАК Казатомпром», а также при проектировании и оптимизации новых сорбционных установок.

Итоговые выводы

На основании проведённого численного моделирования получены следующие основные результаты.

1. Установлено, что гидродинамическая структура потока в сорбционной колонне существенно зависит от наличия и геометрии конического распределителя потока. При отсутствии распределителя основной поток раствора формируется в центральной части колонны, тогда как пристеночная зона сорбента вовлекается в процесс сорбции значительно слабее, что приводит к снижению эффективности использования сорбционного слоя.

2. Показано, что при используемых параметрах сорбционной колонны число Дамкёлера значительно превышает единицу ($Da \gg 1$), что свидетельствует о том, что ионообменный процесс протекает существенно быстрее конвективного переноса. В этих условиях структура зоны массообмена определяется главным образом гидродинамикой потока и продольной дисперсией.

3. Установлено, что увеличение расхода продуктивного раствора приводит к росту коэффициента продольной дисперсии и расширению зоны массообмена. При увеличении расхода раствора в два раза ширина фронта сорбции возрастает примерно в 1.5 раза, что сопровождается увеличением гидравлического сопротивления слоя сорбента и ростом энергозатрат.

Перспективы дальнейших исследований

Перспективным направлением дальнейших исследований является разработка конструктивных решений, обеспечивающих более равномерное распределение потока по поперечному сечению сорбционной колонны и снижение гидродинамической дисперсии в слое ионообменной смолы. Это позволит уменьшить ширину зоны массообмена, повысить степень использования сорбента и сократить цикл работы сорбционной колонны.

Информация о финансировании. Исследования проводились в рамках базового финансирования фундаментальных исследований МНВО Республики Казахстан «Разработка и развитие интеллектуальных методов решения фундаментальных задач механики, динамики и управления в машиностроении, робототехнике, сенсорных и дорожных системах», номер гранта: BR31715767.

Литература

1. Бэр Я., Заславский Д., Ирмей С. Физико-математические основы фильтрации воды. М.: Мир, 1971.
2. Вабищевич П.Н. Метод фиктивных областей в задачах математической физики. 2-е изд. М., 2017.
3. Гольдштик М.А. Процессы переноса в зернистом слое. Новосибирск, 1984.
4. Добыча урана методом подземного выщелачивания / Под ред. М.А. Мамилова. М.: Атомиздат, 1980.
5. Животенко Н. Метод Ритца. 2021. DOI: 10.13140/RG.2.2.30683.44323.
6. Коллинз Р. Течение жидкостей через пористые материалы. М.: Мир, 1964.

7. Флетчер К. Вычислительные методы в динамике жидкостей. Т. 2. М.: Мир, 1991.
8. Шестаков В.М. Гидрогеодинамика. М.: Изд-во МГУ, 1995.
9. Baqer Y., Thornton S., Stewart D., Norris S., Chen X. Analysis of uranium sorption in a laboratory column experiment using a reactive transport and surface complexation model. *Transport in Porous Media*. 2023;149:423–452. <https://doi.org/10.1007/s11242-023-01956-y>.
10. Bird R.B., Stewart W.E., Lightfoot E.N. *Transport Phenomena*. 2nd ed. Wiley; 2002.
11. Corti D.C., Delay G., Fernández M.A., Vergnet F., Vidrascu M. A low-order fictitious domain method with enhanced mass conservation for the Stokes interface problem. *ESAIM: Mathematical Modelling and Numerical Analysis*. 2024;58:303–333. <https://doi.org/10.1051/m2an/2023103>.
12. Couper J.R., Penney W.R., Fair J.R., Walas S.M. *Chemical Process Equipment: Selection and Design*. Elsevier; 2012:529–558.
13. Helfferich F. *Ion Exchange*. Dover Publications; 1995.
14. Kale S., Pradhan D., Kumar S. Analysis of H^1 -penalized fictitious domain method for parabolic problems. *Computers & Mathematics with Applications*. 2025;196:183–200. <https://doi.org/10.1016/j.camwa.2025.07.009>.
15. Kurmanseit M.B., Tungatarova M.S., Kaltayev A., Royer J.-J. Reactive transport modeling during uranium in situ leaching (ISL): the effects of ore composition on mining recovery. *Minerals*. 2022;12:1340. <https://doi.org/10.3390/min12111340>.
16. Kurmanseit M.B., Tungatarova M.S., Royer J.-J., Aizhulov D.Y., Shayakhmetov N.M., Kaltayev A. Streamline-based reactive transport modeling of uranium mining during in-situ leaching: advantages and drawbacks. *Hydrometallurgy*. 2023;220:106107. <https://doi.org/10.1016/j.hydromet.2023.106107>.
17. Li Y., Zhang C., Tang Z., Li C., Liu Z., Tan K., Liu L. Hydrodynamics control for the well field of in-situ leaching of uranium. *Nuclear Engineering and Technology*. 2024. <https://doi.org/10.1016/j.net.2024.05.021>.
18. Mahmoud M. Kinetics studies of uranium sorption by powdered corn cob in batch and fixed bed systems. *Journal of Advanced Research*. 2015. <https://doi.org/10.1016/j.jare.2015.02.004>.
19. Morianou G., Kourgialas N.N., Karatzas G.P. A review of HYDRUS-2D/3D applications for simulations of water dynamics, root uptake and solute transport. *Water*. 2023;15:741. <https://doi.org/10.3390/w15040741>.
20. Orrego P., Hernández J., Reyes A. Uranium and molybdenum recovery from copper leaching solutions using ion exchange. *Hydrometallurgy*. 2019;184:116–122. <https://doi.org/10.1016/j.hydromet.2018.12.021>.
21. Patel H. Fixed-bed column adsorption study: a comprehensive review. *Applied Water Science*. 2019;9:45. <https://doi.org/10.1007/s13201-019-0927-7>.
22. Quinn J.E., Sedger D.S., Brennan A.T., Ring R., Soldenhoff K. Recovery of uranium from carbonate solutions using Lewatit TP 107 resin. *Hydrometallurgy*. 2020;194:105360. <https://doi.org/10.1016/j.hydromet.2020.105360>.
23. Ruthven D.M. *Principles of Adsorption and Adsorption Processes*. Wiley; 1984.
24. Simonin J.-P. On the comparison of pseudo-first order and pseudo-second order rate laws in the modeling of adsorption kinetics. *Chemical Engineering Journal*. 2016;300:254–263. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2016.04.079>.
25. Šimůnek J., Brunetti G., Jacques D., van Genuchten M.Th., Šejna M. Development and applications of the HYDRUS software packages since 2016. *Vadose Zone Journal*. 2024;23. <https://doi.org/10.1002/vzj2.20310>.
26. Thirumalaisamy R., Patankar N.A., Bhalla A.P. Treatment of Neumann and Robin boundary conditions in fictitious domain methods. *Journal of Computational Physics*. 2022;448:110726.
27. Wang B., et al. Ion migration in in-situ leaching (ISL) of uranium: field trial and reactive transport modelling. *Journal of Hydrology*. 2022;615:128634.
28. Zhang F., Luo W., Parker J., Brooks S., Watson D., Jardine P., Gu B. Modeling uranium transport in acidic contaminated groundwater with base addition. *Journal of Hazardous Materials*. 2011;190:863–868. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2011.04.022>.

References

1. Bear J., Zaslavskiy D., Irmey S. Fiziko-matematicheskie osnovy fil'tratsii vody [Physical-mathematical principles of water filtration]. Moscow: Mir, 1971. (in Russian).
2. Vabishchevich P.N. Metod fiktivnykh oblastey v zadachakh matematicheskoy fiziki [The fictitious domain method in problems of mathematical physics]. 2nd ed. Moscow, 2017. (in Russian).
3. Goldshtik M.A. Protsessy perenosa v zernistom sloe [Transport processes in granular media]. Novosibirsk, 1984. (in Russian).
4. Mamilov M.A. (Ed.). Dobycha urana metodom podzemnogo vyshchelachivaniya [Uranium mining by in-situ leaching]. Moscow: Atomizdat, 1980. (in Russian).
5. Zhivotenko N. Metod Rittsa [Ritz method]. 2021. <https://doi.org/10.13140/RG.2.2.30683.44323>. (in Russian).
6. Kollinz, R. Tehenie zhidkostey cherez poristye materialy [Flow of fluids through porous materials]. Moscow: Mir, 1964. (in Russian).
7. Fletcher C. Vychislitel'nye metody v dinamike zhidkostey [Computational techniques for fluid dynamics]. Vol. 2. Moscow: Mir, 1991. (in Russian).
8. Shestakov V.M. Gidrogeodinamika [Hydrogeodynamics]. Moscow: Moscow State University Press, 1995. (in Russian).

9. Baqer Y., Thornton S., Stewart D., Norris S., Chen X. Analysis of uranium sorption in a laboratory column experiment using a reactive transport and surface complexation model. *Transport in Porous Media*. 2023;149:423–452. <https://doi.org/10.1007/s11242-023-01956-y>.
10. Bird R.B., Stewart W.E., Lightfoot E.N. *Transport Phenomena*. 2nd ed. Wiley; 2002.
11. Corti, D.C., Delay, G., Fernández, M.A., Vergnet, F., Vidrascu, M. A low-order fictitious domain method with enhanced mass conservation for the Stokes interface problem. *ESAIM: Mathematical Modelling and Numerical Analysis*. 2024;58:303–333. <https://doi.org/10.1051/m2an/2023103>.
12. Couper J.R., Penney W.R., Fair J.R., Walas S.M. *Chemical Process Equipment: Selection and Design*. Elsevier; 2012.
13. Helfferich F. *Ion Exchange*. Dover Publications; 1995.
14. Kale S., Pradhan D., Kumar S. Analysis of H^1 -penalized fictitious domain method for parabolic problems. *Computers & Mathematics with Applications*. 2025;196:183–200. <https://doi.org/10.1016/j.camwa.2025.07.009>.
15. Kurmanseit M.B., Tungatarova, M.S., Kaltayev, A., Royer, J.-J. Reactive transport modeling during uranium in situ leaching (ISL): the effects of ore composition on mining recovery. *Minerals*. 2022;12:1340. <https://doi.org/10.3390/min12111340>.
16. Kurmanseit M.B., Tungatarova, M.S., Royer, J.-J., Aizhulov, D.Y., Shayakhmetov, N.M., Kaltayev, A. Streamline-based reactive transport modeling of uranium mining during in-situ leaching: advantages and drawbacks. *Hydrometallurgy*. 2023;220:106107. <https://doi.org/10.1016/j.hydromet.2023.106107>.
17. Li Y., Zhang C., Tang Z., Li, C., Liu, Z., Tan, K., Liu, L. Hydrodynamics control for the well field of in-situ leaching of uranium. *Nuclear Engineering and Technology*. 2024. <https://doi.org/10.1016/j.net.2024.05.021>.
18. Mahmoud, M. Kinetics studies of uranium sorption by powdered corn cob in batch and fixed bed systems. *Journal of Advanced Research*. 2015. <https://doi.org/10.1016/j.jare.2015.02.004>.
19. Morianou G., Kourgialas N.N., Karatzas, G.P. A review of HYDRUS-2D/3D applications for simulations of water dynamics, root uptake and solute transport. *Water*. 2023;15:741. <https://doi.org/10.3390/w15040741>.
20. Orrego P., Hernández J., Reyes A. Uranium and molybdenum recovery from copper leaching solutions using ion exchange. *Hydrometallurgy*. 2019;184:116–122. <https://doi.org/10.1016/j.hydromet.2018.12.021>.
21. Patel H. Fixed-bed column adsorption study: a comprehensive review. *Applied Water Science*. 2019;9:45. <https://doi.org/10.1007/s13201-019-0927-7>.
22. Quinn J.E., Sedger D.S., Brennan, A.T., Ring, R., Soldenhoff, K. Recovery of uranium from carbonate solutions using Lewatit TP 107 resin. *Hydrometallurgy*. 2020;194:105360. <https://doi.org/10.1016/j.hydromet.2020.105360>.
23. Ruthven D.M. *Principles of Adsorption and Adsorption Processes*. Wiley; 1984.
24. Simonin J.-P. On the comparison of pseudo-first order and pseudo-second order rate laws in the modeling of adsorption kinetics. *Chemical Engineering Journal*. 2016;300:254–263. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2016.04.079>.
25. Šimůnek J., Brunetti G., Jacques D., van Genuchten, M.Th., Šejna, M. Development and applications of the HYDRUS software packages since 2016. *Vadose Zone Journal*. 2024;23. <https://doi.org/10.1002/vzj2.20310>.
26. Thirumalaisamy, R., Patankar, N.A., Bhalla, A.P. Treatment of Neumann and Robin boundary conditions in fictitious domain methods. *Journal of Computational Physics*. 2022;448:110726.
27. Wang B., et al. Ion migration in in-situ leaching (ISL) of uranium: field trial and reactive transport modelling. *Journal of Hydrology*. 2022;615:128634.
28. Zhang F., Luo W., Parker J., Brooks S., Watson D., Jardine P., Gu, B. Modeling uranium transport in acidic contaminated groundwater with base addition. *Journal of Hazardous Materials*. 2011;190:863–868. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2011.04.022>.