

## Математическое моделирование химических процессов в замкнутом помещении

Производство и переработка цветных металлов сопровождается образованием разнообразных жидких, твердых и газообразных отходов. В результате этого окружающая среда загрязняется токсичными соединениями цинка, меди, свинца, никеля и других элементов. Проблема обезвреживания отходов и их переработки на товарные продукты стоит перед каждым предприятием цветной металлургии и является актуальной.

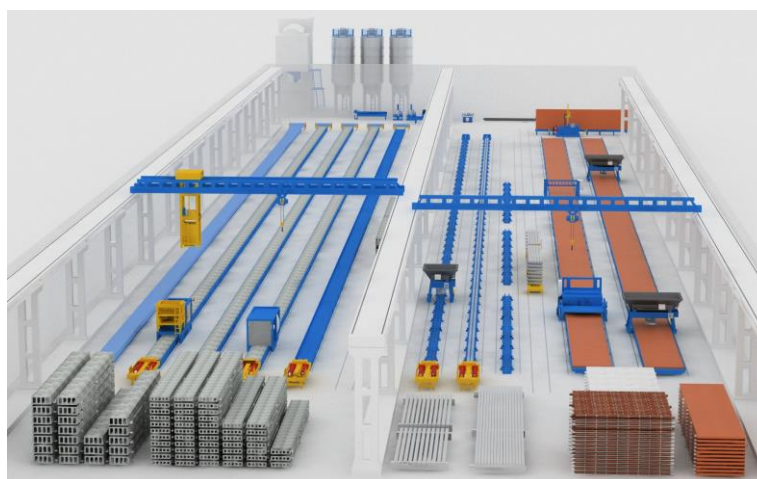
Основными отходами являются медно-цинковые возгоны, далее цинковые пыли (ЦП), образующиеся при выплавке латуни на заводах ОЦМ. Эти отходы относятся к тонким пылям, образуются за счет возгонки легколетучих  $\text{Zn}$ ,  $\text{Pb}$ ,  $\text{Sn}$  и нелетучих  $\text{Cu}$ ,  $\text{Be}$ ,  $\text{Ni}$  металлов, их окислении до оксидов и конденсации паров с образованием частиц размером  $\mu\text{m}$ . В настоящее время в месяц на одном заводе образуется  $\sim 30$  тонн ЦП. Несмотря на значительное содержание оксида цинка (до 80 масс. %), пылевозгоны как 7п-содержащее сырье не используются. Совместно с другими твердыми отходами предприятий они попадают на шламовые поля или же продаются как вторичные медьсодержащие материалы.

Для переработки этих отходов решено использовать сернокислотное выщелачивание с последующей очисткой раствора от примесей и получением технического цинкового купороса.

В отличие от известной сернокислотной схемы предложено проводить переработку пылей совместно с другими отходами производства: отработанными травильными растворами (ОТР), содержащими серную кислоту; отработанным хромовым электролитом (ОХЭ), содержащий хрома (VI), цинковой изгарью (ЦИ), содержащей металлический цинк. В настоящее время отработанные растворы нейтрализуют в цехе, полученные сточные воды очищают, затем сливают в водохранилище или ближайшую реку.

Математическое моделирование химических процессов является наиболее перспективным способом определения равновесного фазово-химического состава химических систем различной природы. Моделирование химических процессов (превращений, реакций) имеет следующие преимущества:

- 1) Возможность исследовать сложные системы, в которых участвует большое количество химических веществ в широком диапазоне параметров состояния (как внешних, так и внутренних — давление, температура, концентрация), с чем не способны справиться экспериментальные методы.
- 2) Оперативность получения результата — расчет на компьютере гораздо быстрее экспериментального определения.
- 3) Точность определения равновесного состава — в результате расчета мы получаем равновесный состав системы и тем самым определяем движущие силы процесса.



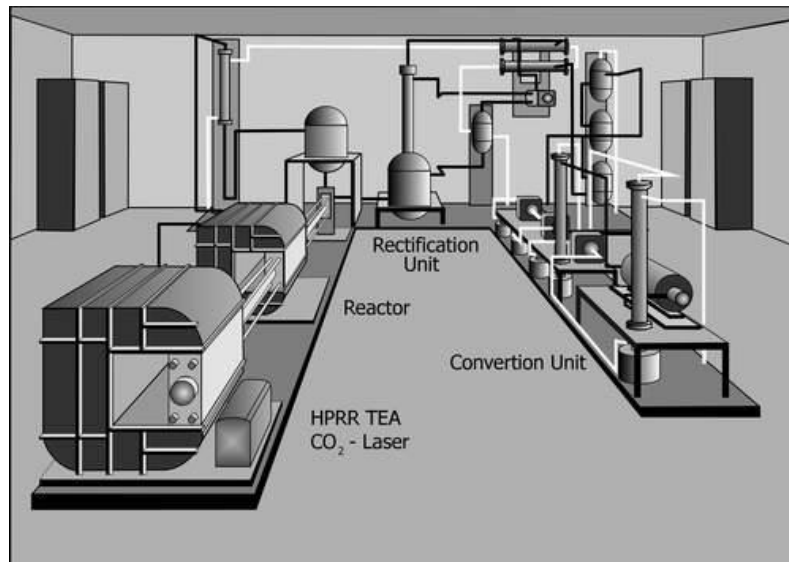


Рис. 4.5 Разные примеры химических процессов в замкнутом помещении.

$$\begin{aligned}
 1) \quad & \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} + \\
 & + \frac{\partial}{\partial x} \left( k_1 \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( k_2 \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( k_3 \frac{\partial u}{\partial z} \right)
 \end{aligned} \tag{1}$$

$$\begin{aligned}
 2) \quad & \frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial y} + \\
 & + \frac{\partial}{\partial x} \left( k_1 \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( k_2 \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( k_3 \frac{\partial v}{\partial z} \right)
 \end{aligned} \tag{2}$$

$$\begin{aligned}
 3) \quad & \frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial z} + \\
 & + \frac{\partial}{\partial x} \left( k_1 \frac{\partial w}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( k_2 \frac{\partial w}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( k_3 \frac{\partial w}{\partial z} \right)
 \end{aligned} \tag{3}$$

$$4) \quad \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \tag{4}$$

$$\begin{aligned}
 5) \quad & \frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} + w \frac{\partial T}{\partial z} = \\
 & = \frac{\partial}{\partial x} \left( k_1 \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( k_2 \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( k_3 \frac{\partial T}{\partial z} \right)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 6) \quad & \frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z} = \\
 & = \frac{\partial}{\partial x} \left( k_1 \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( k_2 \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( k_3 \frac{\partial C}{\partial z} \right)
 \end{aligned}$$

$$7) \quad \rho = \rho_0 (1 - \beta T + \alpha S)$$

Поставим единственное граничное условие  $u = v = w = 0$ .

$$x, y \in \Gamma_1 \quad w = -f$$

$$x, y \in \Gamma_2 \quad w = f$$

$$\frac{\partial T}{\partial n} = \frac{\partial C}{\partial n} = 0$$

$$x, y \in \Gamma_3 \quad \frac{\partial C}{\partial z} = g$$

$$x, y \in \Gamma_4 \quad \frac{\partial T}{\partial z} = h$$

#### Численный алгоритм для системы уравнения:

- 1) Решаем уравнения (5) с помощью метода дробных шагов, который был подробно описан в главах 3.1 и 3.7.
- 2) Уравнения (6) решаются аналогично 1 пункту.
- 3) Найденную температуру (T) и концентрацию (S) подставляем в уравнение (7) и находим плотность  $\rho$ .
- 4) Найденную плотность ( $\rho$ ) подставляем в уравнения (1) и (2) и так же решаем с помощью метода дробных шагов. Но так как в двух уравнениях ~~у~~нае три неизвестных решение системы не очевидно. Для этого необходимо применить метод разложение по физическим параметрам. Для этого мы решаем (1) и (2) уравнения методом дробных шагов без давления.

$$u^{n+1} = u^* - \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} \quad (5)$$

$$v^{n+1} = v^* - \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial y} \quad (6)$$

$$w^{n+1} = w^* - \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial z} \quad (7)$$

Далее в уравнения неразрывности (4) подставляем (5), (6) и (7)

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( u^* - \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( v^* - \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( w^* - \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial z} \right) = 0$$

И приводим к такому виду

$$\frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 P}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 P}{\partial z^2} = \rho \left( \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v^*}{\partial y} + \frac{\partial w^*}{\partial z} \right)$$

Полученное трехмерное уравнение Пуассона решается с помощью метода Фурье