

В. К. БИШИМБАЕВ, А. А. АНАРБАЕВ, Г. Г. ЧУКЕНОВА

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ОЧИСТКИ ФОСФОГИПСА ОТ ВРЕДНЫХ ПРИМЕСЕЙ С ИЗВЛЕЧЕНИЕМ КОНЦЕНТРАТА РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

Эффективное использование отходов промышленности – одна из важнейших экономических и социальных задач нашего государства. Одним из крупнотоннажных отходов современной химической промышленности является фосфогипс, образующийся в процессе переработки фосфоритового концентрата с получением экстракционной фосфорной кислоты (ЭФК). При получении одной тонны ЭФК образуется четыре тонны фосфогипса, удаляемого в специальные

хранилища – отвалы, которые занимают очень большие площади и являются экологически опасными. Поэтому переработка фосфогипса является чрезвычайно актуальной проблемой на сегодняшний день.

Так как фосфогипс содержит в себе ряд примесей, таких как фосфор, фтор, оксиды металлов и др., использование его без предварительной очистки не представляется целесообразным. Также фосфогипс содержит в себе редкоземельные

элементы (РЭ), применение которых в различных сферах современной промышленности, особенно наукоемких, является показателем научно-технического развития той или иной отрасли.

Исходя из этого, нами были проведены лабораторные исследования процесса очистки фосфогипса от фосфора, в частности, P_2O_5 с извлечением концентрата РЭ.

С целью оптимизации условий очистки фосфогипса от вредных примесей и максимального извлечения концентрата РЭ на основе имитационного моделирования с использованием специально для этой цели построенных адекватных математических моделей и выделены два ос-

новных фактора, влияющих на протекание процесса:

X_1 – температура процесса, $^{\circ}\text{C}$;

X_2 – время реагирования смеси, мин.

Нами исследовалось влияние этих параметров на:

Y_1 – степень перехода P_2O_5 в раствор, %;

Y_2 – степень извлечения РЭ, %.

В табл. 1 приведены использованные исходные экспериментальные данные. Предварительно был составлен план эксперимента. При расчете использовался комбинированный факторный эксперимент на шести и четырех уровнях. Всего использованы результаты 24 проведенных опытов.

Таблица 1. Экспериментально найденные значения влияния температуры и времени реагирования на степень очистки фосфогипса от вредных примесей и степень извлечения концентрата РЭ

№ пробы	Температура, $^{\circ}\text{C}$	Время, мин	Степень перехода P_2O_5 в раствор, %	Степень извлечения РЭ, %
1	60	30	56,0	24,7
2	60	60	78,2	48,8
3	60	90	84,0	68,9
4	60	120	88,7	84,1
5	70	30	58,1	25,2
6	70	60	79,6	49,8
7	70	90	87,9	68,9
8	70	120	91,2	84,9
9	80	30	68,5	26,2
10	80	60	89,7	50,9
11	80	90	94,1	69,1
12	80	120	98,9	88,2
13	90	30	69,6	26,6
14	90	60	89,8	50,7
15	90	90	94,0	69,8
16	90	120	98,8	88,1

Значения температур ($^{\circ}\text{C}$) варьировались при шести значениях X_1 , равных:

60, 70, 80, 90, 100 и 120.

Время реагирования (мин) задавалось при четырех значениях X_2 , равных:

30, 60, 90 и 120.

Такой выбор плана эксперимента обеспечил равномерный охват интересующего нас диапазона входных параметров и, как будет показано ниже, высокую точность описания исследуемых зависимостей.

Решение данной задачи было выполнено с использованием специально разработанных программ для персонального компьютера (использованы системы Mathcad-14 [1] и STATISTICA-8 [2]) и выполнено в два этапа:

первый этап – разработка математических моделей, адекватных исследуемому объекту;

второй этап – поиск оптимального режима с использованием полученных математических моделей.

На первом этапе математической обработки результатов проведенных экспериментов нами был применен метод регрессионного анализа [1-4].

Целью данного этапа исследования являлось определение значимых коэффициентов b_i математической модели, адекватно описывающей режим очистки фосфогипса от вредных примесей и степени извлечения концентрата РЭ, имеющей вид уравнения регрессии (1), где y – расчетное значение выхода:

$$\hat{Y} = b_1 + b_2 \cdot X_1 + b_3 \cdot X_2 + \\ + b_4 \cdot X_1^2 + b_5 \cdot X_2^2 + b_6 \cdot X_1 \cdot X_2. \quad (1)$$

Выбор на модели вида (1) был остановлен после опробования ряда других математических выражений, отличающихся как формой (показательные, степенные и др.), так и степенью использованного полинома. При виде выражения (1) получена большая степень совпадения экспериментальных и расчетных значений при достаточной простоте выражения математической модели. Ниже приведены полученные значения коэффициентов b_i для каждой из полученных моделей, они должны быть подставлены в выражение (1) с учетом их знаков.

Адекватность полученных математических моделей проверялась нами по т.н. критерию пригодности приближения R-квадрат (коэффициент детерминации), используемому для оценки точности нелинейных моделей [3, 4]. Критерий R-квадрат может принимать значения только от нуля до единицы, и чем ближе он к единице, тем лучше параметрическая модель приближает исходные данные.

Для его определения вначале вычисляем критерий SSE (Sum of Squares due to Error) – сумма квадратов ошибок по формуле:

$$SSE = \sum_{k=1}^n w_k \cdot (\hat{y}_k - \bar{y}_k)^2, \quad (2)$$

где w_k – масса навески (у нас они не заданы, и считаются равными единице); \bar{y}_k – экспериментальные (исходные) значения данных для каждого опыта; \hat{y}_k – расчетные (предсказанные) значения данных для каждого опыта, получены по формуле (1); n – количество экспериментальных значений (у нас $n = 66$).

Критерий R-квадрат, (обозначенный ниже как R), определяется как отношение суммы квадратов относительно регрессии SSR к полной сумме квадратов (SST), т.е.:

$$SSR = \sum_{k=1}^n w_k \cdot (\hat{y}_k - \bar{y}_k)^2; \\ SST = \sum_{k=1}^n w_k \cdot (y_k - \bar{y}_k)^2; \\ R = \frac{SSR}{SST} = 1 - \frac{SSE}{SST}, \quad (3)$$

где \bar{y}_k – среднее значение экспериментальных (исходных) данных.

Близость полученных значений критерия R-квадрат к единице говорит о высокой точности описания эксперимента, например, выражением вида (1). Обычно приемлемыми для практики считаются значения критерия R-квадрат выше 0,9 [1].

Полученные нами значения критерия R-квадрат для математической модели вида (1) достаточно близки к единице для каждой математической модели и приведены ниже для каждой полученной модели.

На втором этапе математической обработки результатов проведенных экспериментов для поиска оптимальных условий процесса нами применен метод нелинейного программирования на основе т.н. квазиньютоновского алгоритма [5, 6], реализованного в системе Mathcad-14. Поиск оптимума производился в диапазоне температур от 60 до 120°C и времени реагирования от 30 до 120 минут.

Дополнительно нами было проведено имитационное компьютерное моделирование с использованием уравнения вида (1) и найденных параметров моделей. В результате этого нами получены графики зависимостей степени извлечения концентрата РЗЭ и степени перехода P_2O_5 в раствор от значений температуры и времени реагирования.

В результате расчетов получены следующие выражения математической модели вида (1):

$$\hat{Y} = -32,80405 + 1,3337 \cdot X_1 + \\ + 1,173035 \cdot X_2 - 0,00546 \cdot X_1^2 - \\ 0,004907 \cdot X_2^2 - 0,00139 \cdot X_1 \cdot X_2. \quad (4)$$

Соответствующее этим параметрам модели значение критерия $R^2=0,9691$, что подтверждает адекватность полученной математической модели.

На рис. 1 и 2 показаны трехмерные графики, полученные в результате компьютерного моделирования. На них показано влияние температуры и времени реагирования на степень перехода P_2O_5 в раствор и степень извлечения концентратата РЗЭ.

Поиск оптимума показал, что максимальное значение степени перехода P_2O_5 (98,9%) в раствор и степень извлечения концентратата РЗЭ (88,2 %)

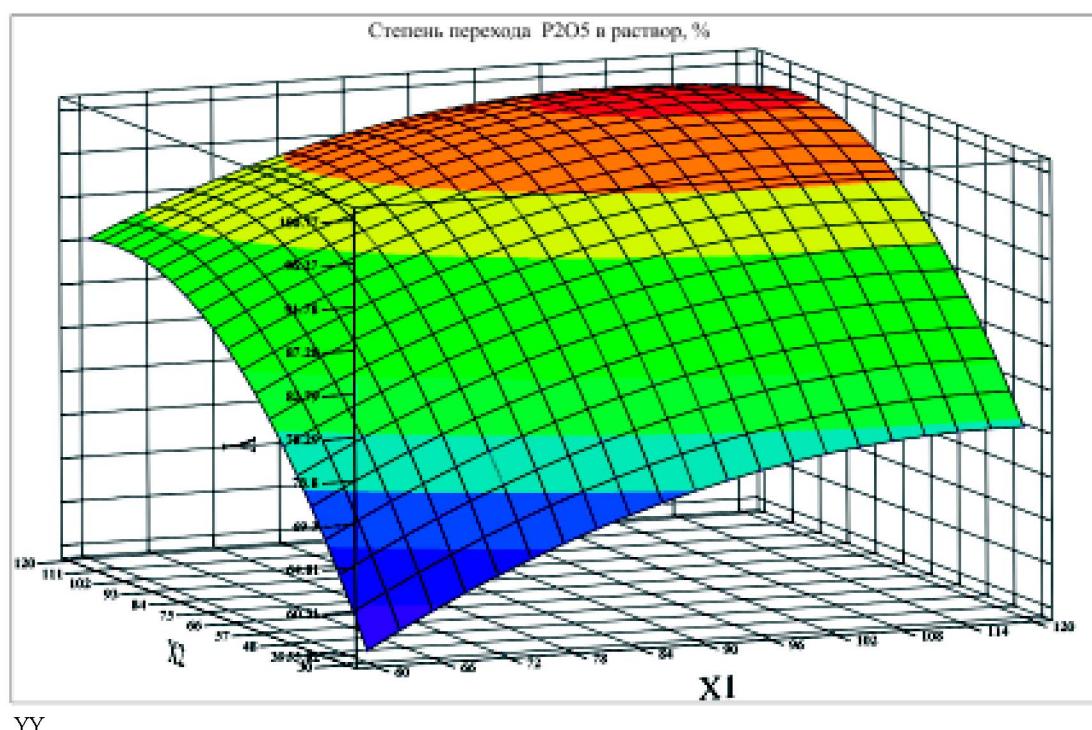


Рис. 1. Трехмерный график влияния температуры и времени реагирования на степень перехода P_2O_5 в раствор

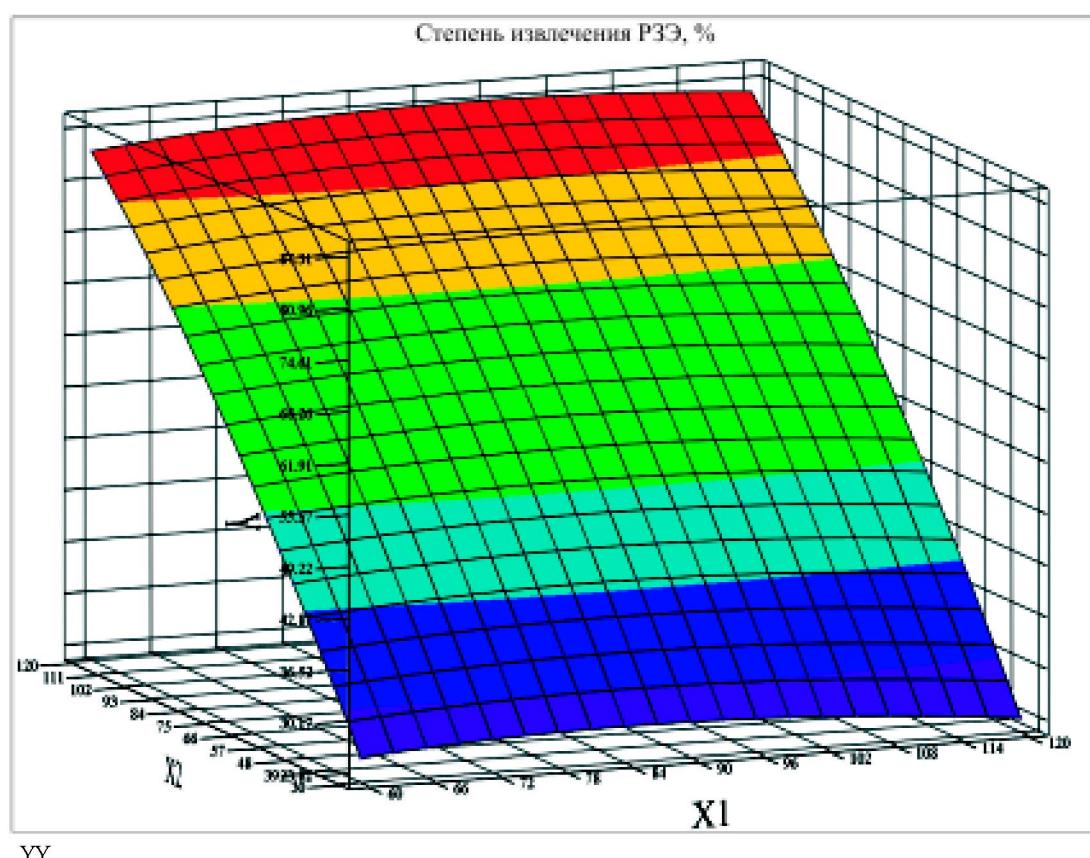


Рис. 2. Трехмерный график влияния температуры и времени реагирования на степень извлечения концентратра РЗЭ

близкое к 100 % достигается при значении температуры, равной 105°C, и времени реагирования, равном 100 минут.

Таким образом, математическая обработка результатов эксперимента позволила определить оптимальные условия перехода P_2O_5 в раствор и степень извлечения концентрата РЗЭ из отхода производства ЭФК – фосфогипса.

ЛИТЕРАТУРА

1. Очков В. Mathcad 14 для студентов, инженеров и конструкторов БНВ. СПб., 2007.
2. Боровиков В.П., Боровиков И.П. Statistica – статистический анализ и обработка данных в среде Windows. М.: Филинъ, 2004.
3. Афиши А., Эйзен С. Статистический анализ: подход с использованием ЭВМ. М.: Мир, 1982. С. 141-379.
4. Abraham B., Ledolter J. Statistical methods for forecasting. New York: Wiley, 1983.
5. Химмельблau Д. Применение нелинейное программирование. М.: Мир, 1985. 554 с.

6. Черноруцкий И. Г. Методы оптимизации в теории управления. Учебное пособие. СПб.: Питер, 2004. 256 с.

Резюме

Экстракциялық фосфор қышқылы (ЭФК) өндірісінің қалдығы – фосфогипсті әдістің әртүрлі жағдайларында сүйытылған күкірт қышқылымен ыдыратып, оның құрамында бар зиянды коспалардан тазалаудың және сирек кездесетін элементтер шоғырын алушың математикалық моделі қарастырылған.

Summary

In this article the mathematical modeling of processes of a production wastes of extracted phosphoric acid (EPA) clearing from harmful impurities with extraction of rare metal elements concentrate and rare metal elements concentrate with sulfuric acid at various parameters of process by decomposition have been considered.

УДК 669.91.2:661.842.532

ЮКГУ им. М. Ауэзова,
г. Шымкент

Поступила 24.11.10г.