

پیش‌بینی غلظت اکسیژن و پیریت باقیمانده در دمپ‌های باطله معدن مس سرچشمه بر پایه مدل‌سازی عددی حجم‌های محدود

علی بنی اسدی⁸؛ فرامرز دولتی ارده جانی^{2*}؛ غلامحسین کرمی³؛ مهدی بنی اسدی⁴

1- کارشناس ارشد زمین شناسی زیست محیطی، دانشگاه صنعتی شاهرود، Email: baniasadi39@yahoo.com

2- دانشیار دانشکده مهندسی معدن، نفت و ژئوفیزیک، دانشگاه صنعتی شاهرود، Email: fdoulati@shahroodut.ac.ir

3- استادیار دانشکده علوم زمین، دانشگاه صنعتی شاهرود، Email: karamigh@yahoo.com

3- دانشجوی کارشناسی ارشد مهندسی شیمی، دانشگاه شهید باهنر کرمان، Email: baniasadim_163@gmail.com

(دریافت 89 بهمن 8388، پذیرش 88 مرداد 8389)

چکیده

عملیات معدنکاری اغلب سبب آلودگی زیست محیطی طولانی مدت شده و مشکلات زیادی را به بار می‌آورد. از جمله این اثرات می‌توان تولید زهاب اسیدی و تخلیه فلزات سنگین به داخل آب‌های سطحی و زیرزمینی را نام برد. این مسایل در نتیجه اکسید شدن پیریت و دیگر کانی‌های سولفیدی در مجاورت آب و اکسیژن هوا رخ می‌دهند و سبب تولید زهاب اسیدی می‌شوند. اکسیژن طی مکانیزم‌های مختلفی می‌تواند وارد دمپ‌های باطله شده و با کانی‌های سولفیدی تماس حاصل نماید که غالبترین آن‌ها مکانیزم نفوذ اکسیژن در فازهای گازی و آبی از طریق منافذ موجود در دمپ است. در این تحقیق سعی شد تا میزان نفوذ اکسیژن و اکسیداسیون پیریت در دمپ‌های باطله معدن مس سرچشمه مورد بررسی و مدل‌سازی قرار گیرد. مدل‌سازی عددی با استفاده از نرم افزار PHOENICS انجام شد. نتایج حاصل از مدل‌سازی عددی با استفاده از روش‌های تحلیلی مقایسه گردید و مشخص شد که در هر دو روش تحلیلی و عددی، ضریب نفوذ اکسیژن می‌تواند نقش مهمی در فرآیند اکسیداسیون و تولید آلودگی داشته باشد. بعلاوه، نتایج به دست آمده از مدل‌سازی نشان می‌دهد که پس از 4 سال از آغاز فرآیند اکسیداسیون، درصد پیریت باقیمانده در نمونه‌های سطحی به 83/8 درصد می‌رسد. این درصد با افزایش عمق به صورت تدریجی افزایش یافته تا اینکه در عمق تقریبی 2/5 متر به مقدار اولیه پیریت در باطله‌ها یعنی حدود 88/5 درصد می‌رسد. نتایج به دست آمده از چنین مطالعاتی می‌تواند در طراحی روش‌هایی مناسب جهت به حداقل رساندن آلودگی‌های زیست محیطی و اثرات آنها روی منابع آب مورد استفاده قرار گیرد.

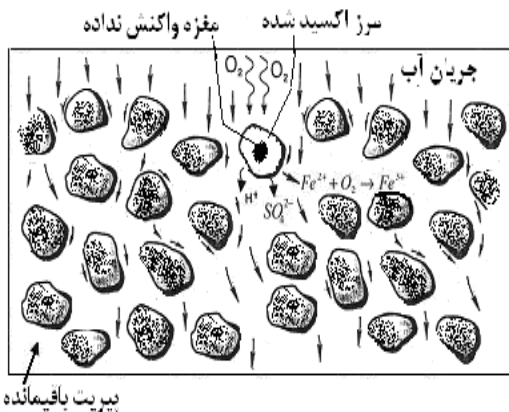
کلمات کلیدی

معدن مس سرچشمه، مدل‌سازی عددی، نفوذ اکسیژن، روش تحلیلی، دمپ باطله، نرم افزار PHOENICS

* نویسنده مسئول و عهده‌دار مکاتبات

8- مقدمه

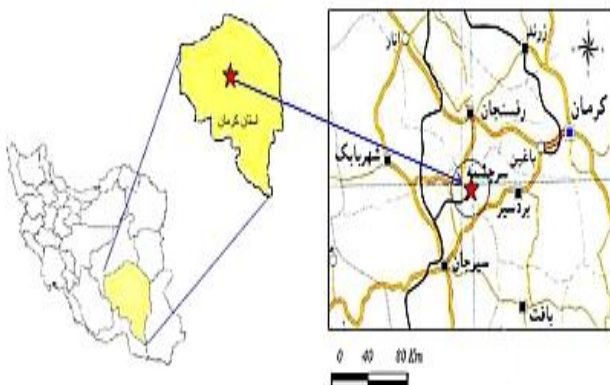
زمان با استفاده از روش‌های تحلیلی و مدل سازی عددی حجم‌های محدود محاسبه و با یکدیگر مقایسه گردد. نتایج حاصل می‌تواند جهت کنترل فرآیند اکسیداسیون کانی‌های سولفیدی بویژه پیریت در دمپ‌های باطله مفید واقع گردد.



شکل 8: فرآیند اکسید شدن پیریت، تولید زهاب اسیدی معدن و نشأت آلاینده‌ها [8]

2- موقعیت جغرافیایی منطقه مورد مطالعه

کانسار مس پورفیری سرچشمه در استان کرمان و در عرض جغرافیایی 29 درجه و 58 دقیقه شمالی و طول جغرافیایی 55 درجه و 53 دقیقه شرقی از سطح دریا واقع گردیده است. این معدن در 161 کیلومتری جنوب غرب کرمان و 51 کیلومتری جنوب غرب رفسنجان و در مجموعه ارتفاعات بند ممزار - پاریز از توابع این شهرستان قرار دارد. راه‌های دسترسی به معدن از طریق جاده‌های آسفالته کرمان-رفسنجان-شهربابک، کرمان - رفسنجان - پاریز- سیرجان می‌باشد (شکل 2).



شکل 2: موقعیت جغرافیایی کانسار مس سرچشمه

معدن مس سرچشمه به علت قرار گرفتن در مناطق

فعالیت‌های معدنی تعادل سیستم‌های طبیعی موجود در داخل زمین را از بین برده و اثرات زیست محیطی دراز مدتی را به بار می‌آورد. در غالب عملیات معدن کاری، منطقه معدنی به حالتی غیر قابل استفاده رها می‌شود [1]. زهاب اسیدی معدن شاید بدترین مشکل زیست محیطی باشد که از فعالیت‌های معدنکاری منشاء گرفته و اثرات منفی و زیان باری بر روی کیفیت آب‌های سطحی و زیرزمینی دارد که عامل اساسی آلودگی منابع آب‌ها می‌باشد. زهاب‌های اسیدی معدن از اکسیداسیون کانی‌های سولفیدی خصوصاً پیریت حاصل می‌شود [2]. زهاب اسیدی معدن از اکسیداسیون مستقیم پیریت با اکسیژن و آب حاصل شده که نتیجه آن تولید Fe^{2+} ، SO_4^{2-} و H^+ می‌باشد [3]. آهن دو ظرفیتی که در نتیجه اکسیداسیون پیریت آزاد می‌گردد، در مجاورت اکسیژن اکسیده شده و به آهن سه ظرفیتی (Fe^{3+}) تبدیل می‌شود. تحت شرایط pH پایین واکنش اکسیداسیون آهن دو ظرفیتی به آهن سه ظرفیتی بسیار کند می‌باشد. در حضور باکتری‌های تیو باسیلوس فرواکسیدان سرعت این واکنش 11^6 برابر افزایش می‌یابد [4]. آهن سه ظرفیتی تولید شده می‌تواند با پیریت واکنش داده و Fe^{2+} ، SO_4^{2-} و H^+ بیشتری تولید نماید. بررسی‌ها و آزمایشات نشان داده‌اند که اکسید شدن پیریت توسط آهن سه ظرفیتی تنها وقتی حائز اهمیت است که باکتری‌های تیو باسیلوس فرو اکسیدان حضور داشته باشند. آهن سه ظرفیتی تحت pH بالای 3/5 هیدرولیز شده و تشکیل رسوب آمورف هیدروکسید آهن می‌دهد. در حالت کلی نرخ تولید اسید با مقدار اکسیژن موجود در سطح سولفید در دمپ باطله کنترل می‌گردد. نرخ نفوذ اکسیژن در زون غیر اشباع نسبت به زون اشباع بالاست، چون نرخ نفوذ اکسیژن در هوا 10000 مرتبه بیشتر از نفوذ در آب می‌باشد [5]. باید در نظر داشت که نفوذ مولکولی بویژه در فضاهای خالی هوا مهمترین مکانیزم حمل اکسیژن می‌باشد [6]. سرعت اکسایش کانی سولفیدی بویژه پیریت به دو عامل سینتیک واکنش و نرخ نفوذ اکسیژن بستگی دارد. اکسایش کانی‌های سولفیدی را می‌توان با مدل مغزه منقبض شونده، شبیه سازی نمود [7].

سرعت اکسایش با نفوذ اکسیژن از سطح تا عمق باطله‌ها کنترل می‌شود. شکل (1) مکانیزم اکسید شدن پیریت و تولید زهاب اسیدی معدن را در باطله‌های معدن روباز نشان می‌دهد.

با توجه به اهمیت موضوع، در این تحقیق تلاش گردیده است که تمرکز اکسیژن در دمپ باطله نسبت به عمق با گذشت

نمود. با اندازه‌گیری میزان آهن موجود در محلول به روش جذب اتمی، می‌توان میزان سولفید باقیمانده را محاسبه نمود [11].

4- معادله اساسی مدل PHOENICS

در این مقاله، برای حل معادلات اساسی اکسید شدن پیریت و نفوذ اکسیژن از طریق باطله‌های معدن، از نرم افزار PHOENICS استفاده شد که معادله دیفرانسیلی که توسط این نرم افزار حل می‌گردد به قرار زیر است [12]:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho u_j \phi - \Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right) = S_\phi \quad (1)$$

که در آن:

ϕ = یک متغیر؛

t = زمان؛

ρ = چگالی؛

u_j = مولفه سرعت در جهت x_j ؛

Γ_ϕ = ضریب نفوذ برای متغیر ϕ ؛

S_ϕ = نرخ تولید یا مصرف متغیر ϕ

از آنجایی که معادلات اساسی اکسیداسیون پیریت و نفوذ اکسیژن در ارتباط با مناطقی که زهاب اسیدی معدن تشکیل می‌شود، حاوی عبارت‌های تولید و مصرف می‌باشد که برای نرم افزار PHOENICS تعریف نشده است، بنابر این برای این قبیل عبارات و ترم‌ها باید ابتدا در فایل ورودی نرم افزار (Q1)، عبارات تعریف شده و سپس برنامه‌نویسی به زبان FORTRAN در زیربرنامه GROUND نرم افزار انجام پذیرد [13]. لازم به ذکر است که نرم افزار مذکور از تکنیک عددی حجم‌های محدود در بسط معادلات دیفرانسیل بهره می‌برد.

5- نفوذ اکسیژن در دمپ‌های باطله سولفیدی

در حالت کلی نرخ اکسایش پیریت و تولید اسید در دمپ‌های باطله با مقدار اکسیژن موجود در دمپ کنترل می‌شود. باید در نظر داشت که نفوذ گازی تنها مکانیزم تأمین‌کننده اکسیژن در اعماق مختلف دمپ باطله‌ها می‌باشد. جریان اکسیژن به صورت گرادیان کاهش اکسیژن همراه با افزایش عمق می‌باشد. سرعت اکسایش کانی‌های سولفیدی به‌ویژه پیریت به دو عامل سینتیک واکنش سطحی و نرخ نفوذ اکسیژن به داخل ذرات باطله حاوی کانی‌های سولفیدی بستگی

کوهستانی، دارای زمستان‌های سرد، برفگیر و بادخیز و تابستان‌های ملایم و معتدل می‌باشد. میزان ریزش‌های جوی بین 311 تا 551 میلیمتر در سال گزارش شده است. درجه حرارت هوای منطقه از 35+ درجه سانتیگراد در تابستان و 21- درجه سانتیگراد در زمستان متغیر است. منطقه به علت کوهستانی بودن حدود 3 الی 4 ماه در سال پوشیده از برف است. سرعت وزش باد در این ناحیه گاهی تا 111 کیلومتر در ساعت می‌رسد [9].

3- روش انجام کار

8-3- نمونه برداری

نمونه‌برداری از باطله‌های حاوی کانی‌های سولفیدی در سه محل روی دمپ باطله در نزدیکی هیپ شماره 3 معدن مس سرچشمه صورت گرفته است. به منظور تعیین میزان پیریت موجود در باطله‌ها، نمونه‌برداری عمقی از محل دمپ باطله انجام گرفت.

بدین ترتیب نمونه‌های معرف به صورت عمقی و تا عمق 3 متری و به فواصل عمقی 1/25 متری در دو محل بر روی محل انباشت باطله‌ها برداشته شد. نمونه‌های برداشت شده هر کدام وزنی معادل یک کیلوگرم داشتند.

آماده‌سازی نمونه‌های عمقی در آزمایشگاه کانه‌آرایی دانشگاه صنعتی شاهرود در مراحل زیر صورت پذیرفت:

- خشک کردن نمونه‌ها به مدت 2 روز در دسیکاتور با دمای 115°C
- تقسیم بندی نمونه‌های خشک شده به دو قسمت شامل نمونه‌های آزمایش و شاهد
- خردایش نمونه‌های آزمایش با استفاده از سنگ شکن فکی و غلطکی به طوری که همگی ذرات نمونه از سرنده 21 مش عبور کنند.
- تجزیه سرنده و انتخاب نمونه‌های معرف زیر سرنده 211 مش برای تعیین درصد پیریت باقیمانده در نمونه‌ها

جهت تعیین درصد کانی سولفیدی باقی‌مانده نمونه‌ها، از دستگاه جذب اتمی مدل AA-670 و مطابق دستورالعمل ASTM استفاده گردید [11]. این روش بر اساس جدایش گوگرد فاز پیریتی از گوگرد با منشاءهای دیگر استوار است. در این روش سولفات‌ها بر خلاف پیریت در اسید کلریدریک رقیق حل می‌شوند و با استفاده از اسید نیتریک رقیق می‌توان پیریت را به صورت محلول از باطله‌ها خارج

معادله انتقال اکسیژن تحت شرایط ناپایا به قرار زیر است:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_e \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - kc \quad (4)$$

5-2- شرایط مرزی برای حل مدل اکسیژن

برای حل عددی معادله دیفرانسیل حاکم بر نفوذ اکسیژن به داخل دمپ باطله (معادله 4) باید یک سری شرایط مرزی در سیستم تحت مدل سازی تعریف نمود تا اثرات خارجی سیستم در نظر گرفته شود و قیود لازم اعمال گردد تا جواب واحدی برای مسأله تحت بررسی و برای متغیر مورد نظر حاصل شود. این شرایط به قرار زیر می‌باشند:

شرط مرزی نوع اول:

در شرط مرزی نوع اول مقدار اکسیژن در مرز ورودی مدل معادل با مقدار اکسیژن در اتمسفر در نظر گرفته می‌شود، یعنی:

$$C(z=0, t) = C_0 = 0.21 \quad t > 0 \quad (5)$$

شرط اولیه:

این شرط توزیع اکسیژن را در پروفیل باطله‌ها (مدل) قبل از فرآیند مدل‌سازی بیان می‌دارد. مقدار اکسیژن قبل از فرآیند شبیه‌سازی در طول مدل صفر در نظر گرفته شده و به صورت رابطه زیر خواهد بود:

$$C(z, 0) = C_i = 0 \quad t = 0 \quad z \geq 0 \quad (6)$$

شرط مرزی نوع اول در مرز خروجی مدل:

در انتهای مدل غلظت اکسیژن را معادل مقدار اولیه آن در طول پروفیل قرار می‌دهند و از دیدگاه ریاضی به صورت معادله 7 خواهد بود:

$$C(\infty, t) = 0 \quad t \geq 0 \quad (7)$$

با در نظر گرفتن شرایط مرزی و اولیه (معادلات 5 تا 7) حل تحلیلی معادله 4 به صورت رابطه 8 خواهد بود [16]:

$$C(z, t) = C_0 \left[1 - \operatorname{erf} \left(\frac{z}{2\sqrt{D_e t}} \right) \right] e^{-kt} \quad (8)$$

دارد. اکسایش کانی‌های سولفیدی را می‌توان با مدل مغزه منقبض شونده، شبیه‌سازی نمود [14]. سرعت اکسایش با نفوذ اکسیژن از سطح تا عمق باطله‌ها کنترل می‌شود. فرآیند اکسایش منجر به کاهش سطح مغزه منقبض شونده می‌شود.

5-8- مدل ریاضی نفوذ اکسیژن در باطله‌ها

همانگونه که فوقاً بیان گردید، در مدل‌سازی نفوذ اکسیژن فرض شده که تنها فرآیند مؤثر در حرکت اکسیژن در باطله‌ها، نفوذ گازی است. البته آب نیز از عوامل مهم و تأثیرگذار در انتقال اکسیژن می‌باشد که در این مدل از آن صرف‌نظر شده است.

در این مدل، باطله‌ها به صورت همگن فرض شده اند و پیریت داخل باطله‌ها به صورت یکنواخت توزیع شده است. بعلاوه فرض شده که ضریب نفوذ در زمان‌ها و عمق‌های مختلف ثابت باشد. از اکسایش سایر سولفیدهای همراه نسبت به اکسایش پیریت صرف نظر شده است.

معادله اساسی انتقال اکسیژن در باطله‌های دمپ تحت شرایط پایا و با در نظر گرفتن عبارت مصرف حجمی اکسیژن در واکنش با پیریت به صورت زیر بیان می‌گردد [15]:

$$D_e \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} - kc = 0 \quad (2)$$

که در آن:

D_e = ضریب نفوذ مؤثر بر حسب متر مربع بر ثانیه؛

c = غلظت اکسیژن در فاز گازی؛

z = عمق به متر؛

k = ثابت سینتیک مرتبه اول

در معادله 2، ثابت k به ازای هر مرحله زمانی و با کاهش مساحت سطح پیریت، مقدار آن باید دوباره مورد محاسبه قرار گیرد. مساحت سطح هر ذره بعد از هر مرحله زمانی t از رابطه زیر محاسبه می‌گردد [15]:

$$S_t = S_{t-1} - K dt / D_{PY} \quad (3)$$

که در آن:

D_{PY} = دانسیته مولی پیریت؛

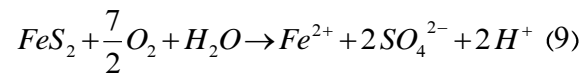
dt = گام زمانی؛

K = ثابت واکنش؛

S_t = مساحت ذره حاوی پیریت در گام زمانی t

6- معادله ریاضی اکسیداسیون پیریت

اکسایش پیریت در دمپ باطله سبب تولید آلودگی می‌گردد. واکنش اکسایش پیریت به صورت معادله 9 بیان می‌شود:



با استفاده از واکنش اکسایش پیریت (معادله 9)، ضریب استوکیومتری اکسیژن مصرفی در فرآیند اکسیداسیون پیریت حاصل شده است.

در این مقاله از مدل مغزه منقبض شونده (معادله 11) برای تشریح فرآیند اکسیداسیون پیریت استفاده شد. واکنش سینتیکی مرتبه اول اکسایش پیریت با معادله ریاضی زیر بیان می‌گردد:

$$-\frac{d(FeS_2)}{dt} = \frac{-4}{15} \frac{d(O_2)}{dt} = KSC^n \quad (11)$$

که در آن:

K = ثابت سینتیک مرتبه اول؛

S = مساحت سطح در واحد حجم؛

C = غلظت اکسیژن

در معادله 11، n معمولاً دارای مقداری بین صفر تا یک می‌باشد. برای بیان مناسب سینتیک مرتبه اول باید مقدار n را در غلظت‌های پایین اکسیژن 1 در نظر گرفت.

در فشار 1/21 اتمسفر و دمای 25 درجه سانتیگراد، غلظت اکسیژن 9 مول بر متر مکعب (معادل 21٪ درصد، به عنوان بخش مولی اکسیژن در هوا) است و ضریب K یا ثابت سینتیک مرتبه اول دارای مقادیر $5/9 \pm 2/1 \times 10^{-11} \text{ mol FeS}_2 \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1}$ و $22/1 \times 10^{-11} \text{ s}^{-1}$ می‌باشد [15].

7- شرایط مرزی برای مدل اکسایش پیریت

برای مدل اکسایش پیریت تنها یک شرط اولیه وجود دارد که بیانگر درصد پیریت اولیه موجود در باطله‌ها می‌باشد. این شرط را باید در سراسر طول پروفیل باطله‌ها (مدل) اعمال نمود:

$$C(Z, 0) = C_i = 18/5 \quad (11)$$

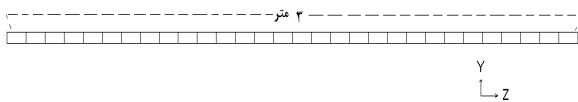
که در آن:

C_i = درصد اولیه پیریت در باطله‌ها

پس از اعمال شرایط مرزی و اولیه مناسب مدل‌های نفوذ اکسیژن و اکسایش پیریت به روش عددی حجم‌های محدود توسط نرم افزار PHOENICS حل شدند.

8- بحث و نتایج

پروفیل باطله‌ها با عمق تقریبی 3 متر به عنوان مدل انتخابی به 31 المان هم اندازه با طول 1/166 متر تقسیم گردید. شکل 3 مدل انتخابی را نشان می‌دهد. مدل مورد نظر در امتداد محور Z مختصات دکارتی در نظر گرفته شد. پارامترهای ورودی مدل در جدول 1 آورده شده است.



شکل 3: مش حجم‌های محدود دمپ باطله

جدول 8: پارامترهای ورودی مدل اصلاح شده از 85

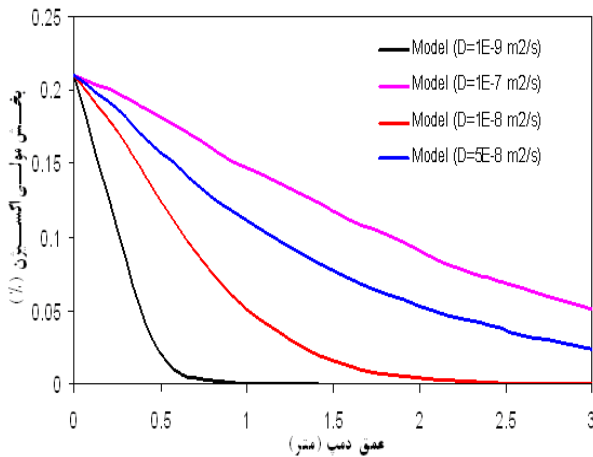
مشخصات مدل	مقدار
طول مدل	3 متر (در امتداد Z)
مدت زمان شبیه سازی	4 سال (48 ماه)
تعداد گام‌های زمانی	24
فاصله زمانی برای هر پیش بینی	2 ماه
بستگی زمانی مدل	ناپایا
تعداد المان‌های حجمی	31 (1/166 متر)
ضریب نفوذ مؤثر اکسیژن	1×10^{-8} (متر مربع بر ثانیه)
درصد اولیه پیریت	18/5٪
دانسیته باطله	2311 kg/m^3
دانسیته پیریت	5911 kg/m^3
سطح پیریت به واحد حجم باطله	121 (1/m)
ثابت سینتیک مرتبه اول O_2	$2/21 \times 10^{-9} \text{ (mol O}_2 \text{ m}^2 \text{ s)}$
ثابت سینتیک مرتبه اول FeS_2	$5/1 \times 10^{-11} \text{ (mol FeS}_2 \text{ m}^2 \text{ s)}$
تعداد تکرارها	511

با استفاده از داده‌های جدول 1، مدل مغزه منقبض شونده مربوط به اکسایش پیریت بطور همزمان با مدل نفوذ اکسیژن حل شد و نتایج مدل سازی عددی با داده‌های صحرایی برای تعیین پیریت باقیمانده در دو محل نمونه‌برداری روی دمپ باطله مقایسه گردید.

8-8- کالیبراسیون مدل نفوذ اکسیژن

جهت کالیبراسیون مدل عددی ارائه شده برای نفوذ اکسیژن به داخل باطله‌ها، ابتدا معادله 4 به صورت عددی با نرم افزار PHOENICS حل شد. نتایج حاصل از مدل عددی با نتایج به دست آمده از فرمول تحلیلی 8 مقایسه گردید که حاکی از تطابق خیلی خوب نتایج دو روش حل برای نفوذ اکسیژن می‌باشد. این مقایسه در شکل 4 نشان داده شده است. در این شبیه سازی زمان نفوذ از 6 ماه تا 1 سال تغییر داده شد.

از 1/1 متر نمی‌تواند نفوذ کند و تمامی آن مصرف می‌شود. با افزایش ضریب نفوذ مؤثر، اکسیژن تا اعماق بیشتری در دمپ باطله نفوذ می‌کند و میزان مصرف اکسیژن در واکنش با پیریت با سرعت کمتری انجام می‌پذیرد.



شکل 5: پیش بینی مدل برای تغییرات بخش مولی اکسیژن نسبت به عمق دمپ و به صورت تابعی از ضرایب نفوذ مؤثر مختلف (مدت زمان شبیه سازی 2 سال و ثابت سینتیک $8/1 \times 10^{-8}$ بر ثانیه انتخاب شده اند).

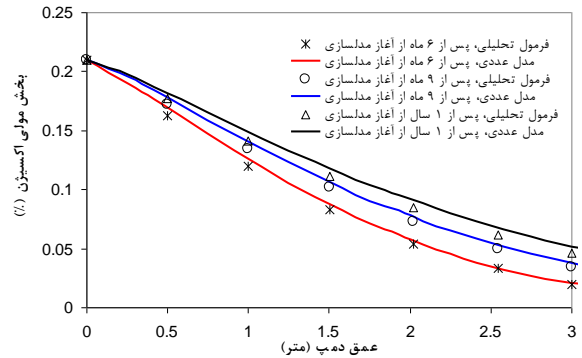
8-3-3- مدل سازی اکسیداسیون پیریت

با استفاده از نرم افزار PHOENICS، مدل مغزّه منقبض شونده اکسایش پیریت بطور همزمان با مدل نفوذ اکسیژن حل شد و نتایج مدل سازی عددی با داده‌های صحرایی برای تعیین پیریت باقیمانده در محل‌های نمونه برداری روی دمپ باطله مقایسه گردید. در این بررسی، در سه نقطه متفاوت روی دمپ باطله به صورت عمقی و در اعماق مختلف نمونه برداری شد و نمونه‌ها برای تعیین پیریت باقیمانده به روش جذب اتمی-آنالیز گردید. داده‌های حاصل از آنالیز نمونه 3 به دلیل خطای آزمایشگاهی و یا خطای نمونه برداری برای فرآیند مدل سازی مناسب تشخیص داده نشد و تنها نتایج مدل سازی با داده‌های صحرایی به دست آمده از دو نقطه دیگر روی دمپ مقایسه گردید که ذیلاً مورد بررسی قرار می‌گیرند:

8-3-3-8- مدل سازی اکسایش پیریت در نمونه 8

شکل 6 نتایج مدل را برای مقدار پیریت باقیمانده در باطله‌ها نسبت به عمق باطله برای مدت زمان 4 سال از آغاز اکسایش پیریت نشان می‌دهد. در این شکل نتایج مدل سازی عددی با داده‌های صحرایی (نمونه 1) مقایسه شده است. تطابق نسبتاً مناسب بین داده‌های صحرایی و نتایج مدل‌سازی

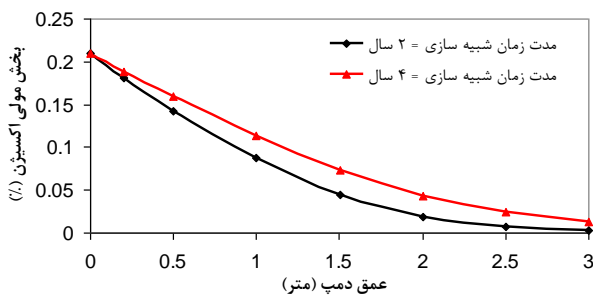
ضریب نفوذ مؤثر برای اکسیژن 1×10^{-7} متر مربع برثانیه در نظر گرفته شد. قابل ذکر است که در این شبیه سازی عبارت مصرف اکسیژن در واکنش با پیریت در نظر گرفته نشده است.



شکل 4: مقایسه نتایج مدل سازی‌های عددی (خطوط) و تحلیلی (نقاط) برای بررسی تغییرات بخش مولی اکسیژن نسبت به عمق دمپ و تابعی از زمان به ازای ضریب نفوذ مؤثر 8×10^{-7} مترمربع بر ثانیه

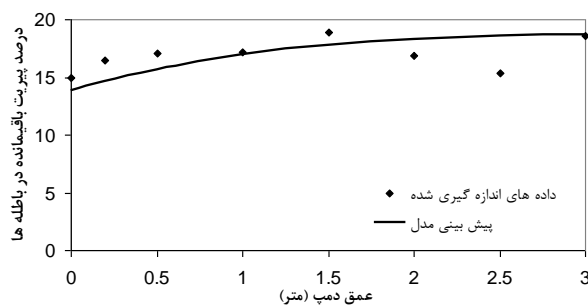
8-2- پیش بینی نفوذ اکسیژن در دمپ باطله

پس از انجام کالیبراسیون مدل نفوذ اکسیژن، مدل‌سازی همزمان معادلات نفوذ اکسیژن و اکسایش پیریت با در نظر گرفتن عبارت مصرف حجمی اکسیژن در واکنش پیریت - اکسیژن انجام گردید. مدل‌های مذکور با اعمال شرایط مرزی و اولیه مناسب به روش عددی حجم‌های محدود توسط نرم افزار PHOENICS حل شدند. با توجه به اینکه مقدار اکسیژن در طول مدل با توجه به ضریب نفوذ مؤثر آن تغییر می‌کند در نتیجه میزان اکسایش پیریت بسته به مقدار اکسیژن موجود در پروفیل متفاوت خواهد بود. در فرآیند مدل سازی، تغییرات بخش مولی اکسیژن بر حسب درصد با توجه به ضرایب نفوذ مؤثر مختلف (از 1×10^{-9} تا 1×10^{-7}) مورد بررسی قرار گرفت. نتایج مربوط به مدل سازی در شکل 5 آورده شده است. بهترین ضریب نفوذ مؤثر در مدل 1×10^{-8} متر مربع بر ثانیه انتخاب شد. این انتخاب بر اساس تحقیقات انجام شده روی دمپ‌های باطله در نقاط مختلف دنیا که در آن ذرات باطله ابعاد مشابه ای با ابعاد باطله‌های دمپ مورد مطالعه دارند، صورت پذیرفته است. بعلاوه اینکه با این ضریب نفوذ مؤثر انطباق مناسب بین داده‌های صحرایی و نتایج مدل سازی برای مدل اکسایش پیریت به دست آمد. مقدار بخش مولی اکسیژن در سطح دمپ 1/21 درصد می‌باشد. با افزایش عمق و نفوذ اکسیژن در باطله‌ها اکسیژن مصرف می‌شود. به طوریکه با ضریب نفوذ 1×10^{-9} متر مربع بر ثانیه اکسیژن تا عمق بیشتر



شکل 7: نتایج مدل برای بخش مولی اکسیژن نسبت به عمق باطله (ضریب نفوذ موثر $8/1 \times 10^{-8}$ متر مربع بر ثانیه و ثابت سینتیک $2/2 \times 10^{-81}$ بر ثانیه انتخاب شده اند).

درصد پیریت باقیمانده در باطله‌ها بتدریج از 15 درصد در سطح دمپ باطله به 18/6 درصد در عمق حدود 2/5 متری می‌رسد. در عمق 2/5 متری درصد پیریت به دست آمده از نتایج آزمایشگاهی در تطابق خوبی با پیش‌بینی مدل قرار ندارد که آن هم ممکن است به دلیل وجود خطا در آزمایشات باشد. همچنین خطا ممکن است از نمونه برداری و مخلوط شدن نمونه‌ها حاصل شده باشد. در مجموع پیش‌بینی مدل برای تعیین میزان اکسایش پیریت نسبت به عمق پروفیل در انطباق خوبی با داده‌های صحرایی برخوردار است. با افزایش عمق پروفیل، مقدار پیریت اکسید شده، به دلیل کاهش مقدار اکسیژن نفوذی، کاهش می‌یابد بطوری که در اعماق تقریبی بیش از 2/5 متر به علت کم شدن اکسیژن، فرآیند اکسایش پیریت بشدت کاهش می‌یابد.

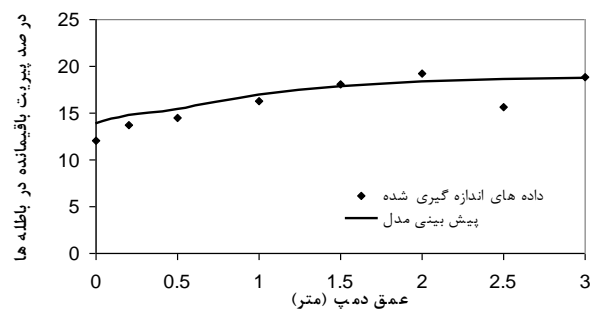


شکل 8: مقایسه داده‌های صحرایی و پیش‌بینی مدل برای تعیین درصد پیریت باقیمانده نسبت به عمق باطله مربوط به نمونه 2

9- نتیجه‌گیری

اکسید شدن کانی‌های سولفیدی بویژه پیریت و تولید زهاب اسیدی معدن یکی از مهمترین مسائل زیست محیطی در محیط‌های معدنکاری نظیر کانسار مس سرچشمه می‌باشد.

حاصل شد. داده‌های صحرایی نشان می‌دهد که مقدار پیریت باقیمانده در نمونه‌های سطحی حدود 12 درصد است. با توجه به اینکه مقدار نفوذ اکسیژن با ضریب نفوذ موثر 1×10^{-9} متر مربع بر ثانیه تا 2/5 متر می‌باشد، از این عمق به بعد فرآیند اکسایش پیریت متوقف شده و پیریت باقیمانده در اعماق بیشتر از 2/5 متر به مقدار اولیه خود در باطله‌ها یعنی 18/8 درصد می‌رسد. مدل نیز روند مشابهی را برای تغییرات پیریت باقیمانده از سطح دمپ تا عمق تقریبی 2/5 متر نشان می‌دهد. نتایج به دست آمده از مدل سازی نشان می‌دهد که پس از 4 سال از آغاز فرآیند اکسایش، درصد پیریت باقیمانده در نمونه‌های سطحی به 13/8 درصد می‌رسد. این درصد با افزایش عمق، به صورت تدریجی افزایش یافته تا اینکه در عمق تقریبی 2/5 متر به مقدار اولیه پیریت در باطله‌ها یعنی 18/7 درصد می‌رسد. در شکل 7 نتایج مدل برای بخش مولی اکسیژن نسبت به عمق باطله در نمونه 1 با یک ضریب نفوذ موثر $1/1 \times 10^{-8}$ متر مربع بر ثانیه، ثابت سینتیک $2/2 \times 10^{-81}$ بر ثانیه و برای دو زمان مختلف شبیه سازی 2 و 4 سال نشان داده شده است. همانگونه که این شکل نشان می‌دهد، مقدار اکسیژن تدریجاً از سطح دمپ به داخل باطله‌ها کاهش نشان می‌دهد. برای یک مدت زمان 2 ساله، اکسیژن حداکثر تا عمق تقریبی 2/5 متر نفوذ می‌نماید حال آنکه وقتی زمان از دو سال به 4 سال افزایش می‌یابد، عمق نفوذ اکسیژن نیز افزایش می‌یابد.



شکل 6: مقایسه داده‌های صحرایی (نقاط) و نتایج مدل (خط) برای تعیین درصد پیریت باقیمانده نسبت به عمق باطله در نمونه 8

8-3-2- مدل سازی اکسایش پیریت در نمونه 2

در شکل 8 نتایج حاصل از مدل عددی برای درصد پیریت باقیمانده در باطله‌ها نسبت به عمق، با داده‌های صحرایی مربوط به نقطه 2 برای مدت زمان 4 سال مقایسه شده است. با توجه به این شکل ملاحظه می‌گردد که با افزایش عمق پروفیل،

strip mines, 1, Model description; Water Resources Research, 20 (2), pp. 233-242.

[7] Davis, G.B. and Ritchie, A.I.M. 1986; *A model of oxidation in pyretic mine wastes: part 1: Equations and approximate solution*; Applied Mathematical Modelling, 10 (5), pp. 314-322.

[8] Doulati Ardejani, F., Singh, R.N. and Baafi, E.Y. 2004; *Use of PHOENICS for solving one dimensional mine pollution problems*; The PHOENICS Journal: Computational Fluid Dynamics & its applications, Volume 16, CHAM, UK, p 23.

[9] بنی اسدی، علی؛ 1386؛ *بررسی هیدرولوژیکی و زیست محیطی هیپ شماره 3 معدن مس سرچشمه*، پایان نامه کارشناسی ارشد، دانشکده علوم زمین دانشگاه صنعتی شاهرود.

[10] Gladfelter, W.L., Dickerhoof D.W., 1976. *Use of atomic absorption spectrometry for iron determinations in coals*; Fuel 55 (4), pp. 360-361.

[11] عبداللهی، م؛ شهبازی، ب؛ *«بررسی پارامترهای مؤثر در حذف مغناطیسی پیریت از زغال سنگ طیس با استفاده از طراحی آزمایشها»*. کنفرانس مهندسی معدن، جلد دوم، ص 1161-1151؛ 1383.

[12] Spalding, D.B., 1981 *A general purpose computer program for multi-dimensional one- and two-phase flow*; Mathematics and Computers in Simulation 23(3), pp. 267-276.

[13] CHAM, 2008; *The PHOENICS On-Line Information System*; http://www.cham.co.uk/phoenics/d_polis/polis.htm

[14] Levenspiel, O. 1972; *Chemical Reaction Engineering*; John Wiley, New York, 578p.

[15] Elberling, B, Nicholson, R.V. and Scharer, J.M. 1994; *A combined kinetic and diffusion model for pyrite oxidation in tailings: a change in controls with time*; Journal of Hydrology, 157 (1), pp. 47-60.

[16] Ghez, Richard, 1988; *A primer diffusion problems*; John Wiley & Sons, Inc. ISBN: 0-471-84692-9.

یکی از عوامل مؤثر در تولید زهاب اسیدی در دمپ‌های باطله حضور و تمرکز اکسیژن در اعماق مختلف آن می‌باشد. با انجام مدل سازی عوامل تاثیرگذار در اکسیداسیون پیریت، می‌توان اثرات زیست محیطی آن را کاهش و یا از بین برد. در این تحقیق نتایج حاصل از مدل سازی اکسیژن با استفاده از روش‌های تحلیلی و عددی مقایسه گردید و مشخص شد که در هر دو روش تحلیلی و عددی ضریب نفوذ اکسیژن می‌تواند نقش مهمی در فرآیند اکسیداسیون و تولید آلودگی داشته باشد. همچنین مشخص شد که روش‌های تحلیلی به دلیل در نظر نگرفتن تمامی شرایط موجود در دمپ باطله به نسبت روش‌های عددی از دقت کمتری برخوردار می‌باشند. نتایج مدل سازی عددی نشان می‌دهد که تنها اکسیداسیون مقدار کمی پیریت کافی است تا سبب ایجاد مشکلات زیست محیطی طولانی مدت ناشی از تشکیل پساب اسیدی معدن گردد. نتایج حاصل از چنین مدل سازی‌هایی می‌تواند اطلاعات گرانمایی در مورد وضعیت توزیع آلودگی در منابع آب‌های سطحی و زیرزمینی و نحوه کنترل آنها ارائه نماید. با پوشش مناسب باطله‌های معدن و با جلوگیری از نفوذ اکسیژن نیز می‌توان از تشکیل اسید تا حد زیادی جلوگیری نمود.

منابع

- [1] دولتی ارده جانی، فرامرز؛ شفایی تنکابنی، سید ضیاءالدین؛ میرحبیبی، علیرضا؛ بدیعی، خشایار؛ 1384؛ *بیوتکنولوژی، ژئوشیمی زیست محیطی و مدیریت پسابها*؛ جلد اول؛ انتشارات دانشگاه صنعتی شاهرود.
- [2] Atkin, A.S., and Pooley, F.D.; 1982; *The effects of bio-mechanisms on acid mine drainage in coal mining*; International Journal of Mine Water, NO. 1, PP.31-44.
- [3] Singer, P.C. and Stumm, W. 1970; *Acidic mine drainage: The rate determining step*; Science, 167, pp.1121-1123.
- [4] Xavier, A.G. 1990; *Environmental-biochemical aspects of heavy metals in acid mine water*; International Symposium on Acid Mine Water in Pyritic Environment, Lisbon, Portugal, pp. 43-55.
- [5] Yanful, E.K., 1993; *Oxygen diffusion through soil covers on sulfidic mine tailings*; Journal of Geotechnical Engineering 119, pp. 1207-1228.
- [6] Jaynes, D.B., Rogowski, A.S. and Pionke, H.B., 1984; *Acid mine drainage from reclaimed coal*