

استفاده از دینامیک سیالات محاسباتی و روش ژئوفیزیکی VLF در مدل‌سازی دو بعدی اکسایش پیریت و تولید زهاب اسیدی در باطله‌های زغال‌شویی

فرامرزی دولتی ارده‌جانیⁱ؛ مهدی زارعⁱⁱ؛ علی مرادزادهⁱⁱⁱ

چکیده

باطله‌های بدست آمده از شستشوی زغال‌سنگ اغلب دارای مواد سولفیدی به ویژه پیریت هستند. اکسایش پیریت در مجاورت آب و هوا سبب تشکیل زهاب اسیدی شده و نفوذ آن به آب‌های سطحی و زیرزمینی باعث آلودگی آب می‌شود. در این مقاله برای بررسی اکسایش پیریت، احتمال تولید آلودگی و نشت مواد آلاینده از باطله‌های کارخانه زغال‌شویی البرز شرقی، ابتدا به روش ژئوفیزیکی الکترومغناطیس با فرکانس خیلی پائین، وجود دو ناحیه آلوده احتمالی پایین‌تر از محل انباشت باطله زغال شویی تأیید گردید. سپس با استفاده از نرم افزار دینامیک سیالات محاسباتی یک مدل عددی حجم‌های محدود یک بعدی ارائه شده و نتایج مدل‌سازی با داده‌های صحرائی مقایسه شده است. پس از کالیبراسیون، مدل‌سازی در حالت دوبعدی انجام گرفته است. نتایج مدل‌سازی با نتایج بدست آمده از تحلیل عمقی انباشت باطله برابری خوبی دارند. اکسایش پیریت و تولید زهاب اسیدی در انباشت باطله سبب افزایش غلظت برخی از عناصر می‌شود به طوری که غلظت یون سولفات در عمق ۰/۵ متری به ۳۴۹ میلی‌اکی والان بر لیتر رسیده و pH به مقدار ۳/۷ کاهش یافته است. بیش‌ترین غلظت عناصر آهن، منگنز، روی، کروم و کبالت به ترتیب برابر با ۲۷۰، ۱۲۰، ۳۷۵، ۲۵ و ۱۰ میلی‌اکی والان بر لیتر در عمق ۲ متری اندازه‌گیری شده است. مطالعات انجام شده در این پژوهش می‌تواند برای طراحی برنامه مدیریت زیست‌محیطی مفید باشد.

کلمات کلیدی

حجم‌های محدود، اکسایش پیریت، البرز شرقی، ژئوفیزیک، دینامیک سیالات محاسباتی، مدل‌سازی دوبعدی.

A Computational Fluid Dynamics Method for two-Dimensional Modeling of Pyrite Oxidation and Pollutant Generation from the Coal Washing Wastes

F. Doulati Ardejani, M. Zareh, A. Moradzadeh

ABSTRACT

Coal washing operation results in the generation of large amounts of waste materials containing pyrite. Rapid oxidation of pyrite in the presence of oxygen and moisture produces acid mine drainage. Such acidic drainages cause surface and groundwater pollution. In this study, a very low frequency (VLF) electromagnetic method was used to investigate the likely polluted zones due to leaching from the Alborz Sharghi coal washing waste dump. The geophysical VLF method indicated two low resistivity zones in

ⁱ دانشجویار دانشکده مهندسی معدن، نفت و ژئوفیزیک، دانشگاه صنعتی شاهرود؛ fdoulati@shahroodut.ac.ir

ⁱⁱ کارشناس ارشد اکتشاف معدن، دانشگاه صنعتی شاهرود؛ Mehdi_zareh001@yahoo.com

ⁱⁱⁱ دانشجویار دانشکده مهندسی معدن، نفت و ژئوفیزیک، دانشگاه صنعتی شاهرود؛ amoradzadeh@shahroodut.ac.ir



downstream of the waste dump. A one-dimensional numerical finite volume model was developed using a computational fluid dynamics (CFD) package to simulate pyrite oxidation and pollution generation from the coal washing wastes. For calibration purpose, the modeling accuracy was tested with the results obtained from the field data. A two-dimensional simulation was also performed to predict pyrite oxidation and transportation of the oxidation products from the dump. Pyrite oxidation and acid mine drainage in the waste dump has resulted in a pick concentration of SO_4 (349 m.e/L) and low pH (pH=3.7) at depth 0.5 m. The elevated concentrations of metals (Fe= 270 m.e/L, Mn= 120 m.e/L, Zn= 375 m.e/L, Cr=25 m.e/L and Co= 10 m.e/L) were found at depth 2 m. Such investigations are necessary for designing an effective environmental management program.

KEYWORDS

Finite volume, pyrite oxidation, Alborz sharghi, VLF, CFD, two dimensional modeling.

خنثی‌ساز روی جابجایی اسید و محصولات اکسایش در روباره‌های معدنی را مدل کرده‌اند. مدل فرآیندهایی مانند جریان غیراشباع آب، نفوذ اکسیژن و مغزه انقباضی برای اکسایش پیریت، شامل انتقال واکنشی آلاینده‌ها و واکنش‌های تعادل ژئوشیمیایی بین اجزاء فاز آبی و کانی می‌شود. ولی این مدل برای توده‌های باطله هتروژن یک معدن پیریتی طراحی شده است و برای مدل‌سازی اکسایش پیریت، تولید AMD و انتقال آلاینده‌ها از محل‌های انباشت باطله‌های بدست آمده از شست‌وشوی زغال مناسب نیست [۱۰]. مدل مانکور و همکاران [۱۱] توانست فرآیندهای اکسایش کانی‌های سولفیدی به‌ویژه پیریت، آزاد شدن و انتقال محصولات اکسایش شامل فلزات سنگین را در باطله‌های قدیمی بدست آمده از فرآوری مواد معدنی فلزی در منطقه شریدون، مانتیوبا کشور کانادا مدل‌سازی نماید ولی این مدل برای توضیح فرآیندهای اکسایش پیریت و انتقال محصولات اکسایش در محل انباشت باطله‌های بدست آمده از شست‌وشوی زغال سنگ مناسب نیست.

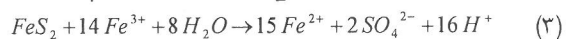
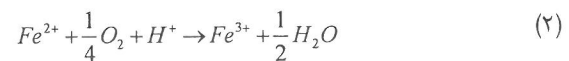
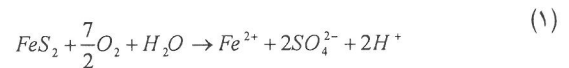
با بررسی نتایج مدل‌های طراحی شده به وسیله سایر محققین و مقایسه آن‌ها با مدل این پژوهش می‌توان فهمید که مدل‌های موجود اغلب برای محل‌های انباشت سنگ‌های باطله با دانه درشت، باطله‌های پرکننده معادن روباز نواری و باطله‌های فرآوری مواد معدنی فلزی محدود می‌شوند و برای بررسی فرآیندهای اکسایش پیریت و انتقال محصولات اکسایش در محل‌های انباشت مناسب نیستند.

در سال‌های اخیر استفاده از نرم‌افزارهای محاسباتی دینامیک سیالات (CFD)، ابزار مفیدی برای مطالعات زیست-محیطی در فعالیتهای معدنی است. با استفاده از نرم‌افزار تجاری PHOENICS [۱۲] که از نرم‌افزارهای مهم CFD است، پیش‌بینی فرآیندهای اکسایش و تولید آلودگی معادن ممکن شده است و حساسیت برخی از عوامل موثر روی میزان آلودگی مورد تحلیل قرار گرفته‌اند [۱۳، ۱۴]. در ایران برخی از روش‌های مدل‌سازی یک بعدی ریاضی برای بررسی

۱- مقدمه

به دلیل وجود ناخالصی در زغال استخراجی، شست‌وشوی آنها ضروری است. در فرآیند زغال‌شویی، مقداری از مواد معدنی با عیار و کیفیت پایین‌تر که دارای مواد سولفیدی به ویژه پیریت هستند به صورت باطله جدا می‌شود. انباشت باطله‌ها در مجاورت آب و هوا باعث تغییر ترکیبات آن‌ها شده و مواد سمی و خطرناک موجود در آن‌ها به محیط اطراف خود می‌روند [۲، ۱].

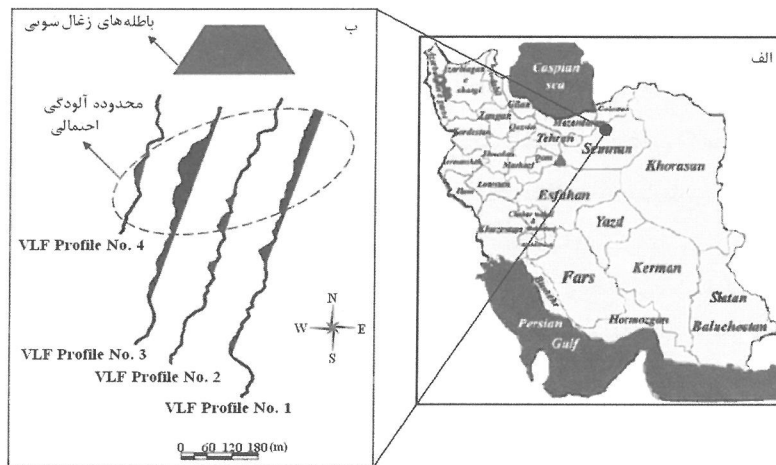
یکی از مهم‌ترین مشکلات زیست‌محیطی ناشی از انباشت باطله‌های زغال، تولید زهاب اسیدی معدن (AMD) است. به طور کلی AMD از اکسایش مستقیم پیریت با اکسیژن و آب طبق واکنش‌های (۱) تا (۳)، بدست می‌آید که نتیجه آن تولید Fe^{2+} ، SO_4^{2-} و H^+ است [۲، ۳، ۴، ۵].



بررسی‌های زیادی در زمینه طراحی مدل یک بعدی مناسب برای توضیح فرآیندهای اکسایش پیریت و کانی‌های سولفیدی دیگر و شست‌وشوی محصولات اکسایش به وسیله روگونسی و همکاران در سال ۱۹۷۷ انجام گرفته است [۶]. کاسلس و اپس در سال ۱۹۷۵ مدل یک بعدی از فرآیندهای اکسایش و لیچینگ را با در نظر گرفتن دما، یکسان بودن مقدار اکسیژن و انتقال هوا طراحی نمودند [۷]. جینز در سال ۱۹۸۴ مدلی برای اکسایش پیریت و شست و شوی یک بعدی فرآورده‌های اکسایش آن در معادن زغال روباز نواری طراحی کرده است [۸]. دیویس و ریچی در سال ۱۹۸۶ مدل یک بعدی اکسایش پیریت در محل انباشت سنگ‌های باطله درشت دانه مس را با در نظر گرفتن نفوذ اکسیژن طراحی نموده‌اند [۹]. گرک و همکاران اثرات توزیع فضایی مناطق اکسید شده، مقادیر پیریت و کانی‌های

۲- موقعیت جغرافیایی و زمین‌شناسی منطقه

منطقه زغالی البرزشرقی در ۲۵ کیلومتری شمال‌شرقی دامغان و با فاصله تقریبی ۷۵ کیلومتری از شاهرود در استان سمنان واقع شده است. در این منطقه، پدیده‌های تکتونیکی بیش‌تر دارای روند شرقی- غربی است. مهم‌ترین و فراوان‌ترین ماده معدنی منطقه، زغال‌سنگ است که در تناوب‌های شیلی سازند شمشک (مربوط به ژوراسیک) در سرتاسر منطقه به شکل رگه‌ها و عدسی‌هایی گسترش یافته است [۱۷]. زغال‌سنگ این منطقه با ظرفیت ۶۵۰ هزار تن در سال به کارخانه زغال-شویی البرزشرقی برای تغلیظ ارسال می‌شود و حدود نصف مواد ورودی، به صورت باطله در اطراف کارخانه تلنبار می‌شود. این کارخانه در شمال‌شرقی دامغان و ۵۷ کیلومتر شاهرود، بین مناطق مهماندوست و طزره قرار گرفته است (شکل ۱).



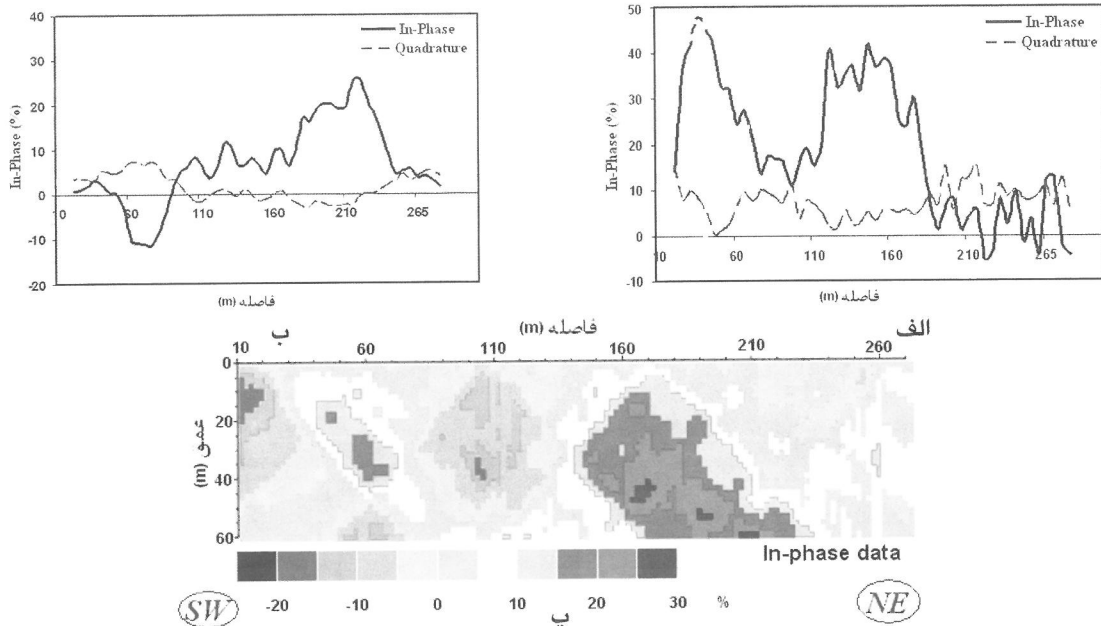
شکل (۱): (الف) موقعیت جغرافیایی منطقه (ب) نمایی از پروفیل‌های VLF اندازه‌گیری شده نسبت به انباشت باطله زغال و گسترش زون آلوده

[۲۰] با عمق فیلتر ۶۰ متر انتخاب شده است و وجود آلودگی در پایین‌دست انباشت باطله به خوبی مشخص گردید. شکل (۱) موقعیت پروفیل‌های VLF را نسبت به انباشت باطله نشان می‌دهد. در شکل (۲) نتایج مدل‌سازی پروفیل سوم آورده شده است که به خوبی می‌توان وجود دو ناحیه با مقاومت ویژه کم که دلیل وجود آلودگی احتمالی در منطقه است را مشاهده کرد. اولین ناحیه در فاصله ۳۰ تا ۷۰ متری و تا عمق ۴۵ متری گسترش یافته است. ناحیه دوم در فاصله ۱۴۰ تا ۲۴۰ متری قرار دارد و گستردگی آن به دلیل نزدیکی به محل انباشت، نسبت به ناحیه اول بیشتر و اعماق پایین‌تر است. در این ناحیه به خوبی وجود آلودگی دیده می‌شود که ممکن است بیشترین آلودگی سطحی در منطقه باشد.

فرآیندهای اکسایش پیریت در باطله‌های زغال انجام شده است [۱۵]. با اینکه فرآیندهای اکسایش پیریت و تولید AMD در باطله‌های معدن زغالسنگ "رضی" در ناحیه زغالی البرز شرقی در منطقه آزاد شهر-رامیان مدل‌سازی ریاضی شده‌اند و مشخصات کیفی و کمی آن مطالعه شده است ولی نحوه انتشار آلاینده‌های تولیدی مورد بررسی قرار نگرفته است [۱۶]. بنابراین نیاز به انجام مطالعات دقیق‌تر برای بررسی نحوه انتشار آلودگی در این باطله‌ها است. در این مقاله سعی شده است تا علاوه بر مدل‌سازی یک بعدی ریاضی، نحوه انتشار آلودگی و گسترش محصولات اکسایش حاصل از انباشت باطله کارخانه زغال‌شویی البرزشرقی با استفاده از مدل‌سازی دو بعدی ریاضی به وسیله نرم افزار PHOENICS مورد بررسی قرار گیرد.

۳- مطالعات ژئوفیزیک زیست‌محیطی

مطالعات ژئوفیزیک زیست‌محیطی با اندازه‌گیری‌های VLF^۲ [۱۸] برای تعیین مناطق آلوده ناشی از اکسایش پیریت انباشت باطله زغال‌شویی، در امتداد چهار پروفیل به فواصل ۳۰ متر و نقاط اندازه‌گیری ۵ متر در پایین‌دست انباشت باطله انجام گرفته است. انتخاب روش VLF به دلیل مناسب بودن، سادگی روش، سرعت عمل و کم هزینه بودن آن است. در ادامه داده‌های اندازه‌گیری شده با نرم‌افزار تخصصی RAMAG [۱۹]، تجزیه و تحلیل خواهد شد. مدل‌های تهیه شده شامل نمودارهای اولیه داده‌ها، نمودارهای فیلتر شده داده‌ها و شبه مقاطع عرضی چگالی جریان هستند. در تهیه مدل‌ها، فیلتر کاروس- هجلت



شکل (۲): نتایج حاصل از پروفیل ۳، (الف) نمودار خام داده‌های VLF (مؤلفه حقیقی و مجازی)، (ب) نمودار فیلتر شده داده‌های VLF (مؤلفه حقیقی و مجازی)، (پ) شبه مقطع عرضی چگالی جریان (مؤلفه حقیقی)

۵- مدل‌سازی ریاضی اکسایش پیریت و انتقال

محصولات اکسایش

فرآیندهای اکسایش پیریت و انتقال محصولات اکسایش از محل انباشت باطله‌های زغال‌شویی با استفاده از روش حجم‌های محدود و به کمک نرم افزار PHOENICS مدل‌سازی شده است.

معروف‌ترین مدلی که می‌تواند فرآیند اکسید شدن پیریت یا نرخ شستن آن را در باطله‌های دارای پیریت شرح دهد، مدل مغزه انقباضی است که اولین بار به وسیله لونشپیل ارائه شده است [۲۳]. شکل (۳)، مدل مفهومی اکسید شدن پیریت را نشان می‌دهد.

معادلات دیفرانسیل مربوط به نفوذ اکسیژن در باطله‌ها، مدل مغزه انقباضی و مدل انتقال محصولات اکسایش با در نظر گرفتن عبارتهای تولید و مصرف حجمی هر متغیر با توجه به واکنش‌های (۱) تا (۳)، به صورت روابط (۴)، (۵) و (۶) ارائه می‌شوند [۸]:

(۴)

$$\phi_a \frac{\partial u}{\partial t} = D_1 \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} - \frac{3(1-\phi)h^{-1} \rho_{py} X^{\frac{2}{3}}}{6\tau_p X^{\frac{1}{3}}(1-X^{\frac{1}{3}}) + \tau_c} - \phi_p h^{-1} [Fv^{2+}] u \left\{ K_1 \left(\frac{1}{H^+} \right)^2 + K_2 \right\}$$

۶- تعیین میزان پیریت باقی‌مانده

برای بررسی فرآیند اکسایش پیریت و تولید AMD در محل انباشت باطله‌های دارای پیریت، از باطله‌ها نمونه‌برداری عمقی شده است. نمونه‌های معرف تا عمق ۲/۲۵ متری و به فواصل ۰/۲۵ متر در دو محل بر روی محل انباشت باطله برداشته شده‌اند. نمونه‌ها هر یک وزنی برابر با یک کیلوگرم داشتند. آماده‌سازی نمونه‌ها در چند مرحله در آزمایشگاه کانه‌آرایی دانشگاه صنعتی شاهرود صورت پذیرفت که عبارتند از:

- خشک کردن نمونه‌ها به مدت ۲ روز در دسیکاتور با دمای ۱۰۵ درجه سانتی‌گراد
- تقسیم‌بندی نمونه‌های خشک شده به دو نوع نمونه‌های آزمایش و شاهد
- خردایش نمونه‌های آزمایش با استفاده از سنگ‌شکن فکی و غلطکی به طوری که همه ذرات نمونه از سرنده ۲۰ مش عبور کنند.
- تجزیه سرنده و انتخاب نمونه‌های معرف زیر سرنده ۲۰۰ مش برای تعیین درصد پیریت باقی‌مانده در نمونه‌ها
- برای تعیین درصد پیریت باقی‌مانده در نمونه، از دستگاه جذب اتمی مدل AA-670 و طبق دستورالعمل STM استفاده گردید [۲۱]. در این روش سولفات‌ها بر عکس پیریت در اسید کلریدریک رقیق حل می‌شوند و با استفاده از اسید نیتریک رقیق می‌توان پیریت را به صورت محلول از باطله‌های زغال خارج نمود. با اندازه‌گیری مقدار آهن موجود در محلول به روش جذب اتمی، می‌توان مقدار پیریت را محاسبه نمود [۲۲].

اکسیژن

b_1 : نسبت استوکیومتری مصرف پیریت به مصرف آهن سه ظرفیتی (یا تولید محصولات اکسایش)

$D_e[Ox]$: ضریب نفوذ موثر ماده اکسید کننده در هاله اکسید شده اطراف هر ذره (m^2/s)

$K_{[Ox]}$: ثابت سینتیک مرتبه اول برای واکنش سطحی (m/s)

α_{py}^{rock} : سطح پیریت به واحد حجم ذرات باطله (m^{-1})

λ : ضخامت از ذره که در آن واکنش اکسایش پیریت اتفاق می افتد (عمق پوسته واکنشی) (m)

$C_{[Ox]}$: غلظت ماده اکسید کننده در فیلم آب اطراف ذرات حاوی پیریت (mol/m^3)

ϕ : تخلخل باطله ها (m^3/m^3)

ϕ_a : تخلخل هوادار (m^3/m^3)

ϕ_w : تخلخل آبدار (m^3/m^3)

Z : عمق (m)

X_j : مختصات دکارتی (m)

D_1 : ضریب نفوذ موثر اکسیژن در باطله ها (m^2/s)

u : غلظت اکسیژن در فضاهای خالی باطله ها (فاز گازی)

غلظت اکسیژن در فضاهای خالی باطله ها به وسیله قانون هنری، طبق رابطه (۹)، به غلظت آن در فاز مایع تبدیل می شود

[۹]:

$$C_{[Ox]} = \gamma u \quad (9)$$

در رابطه فوق:

$C_{[Ox]}$: غلظت اکسیژن در فاز مایع

u : غلظت گاز اکسیژن در فضاهای خالی باطله ها

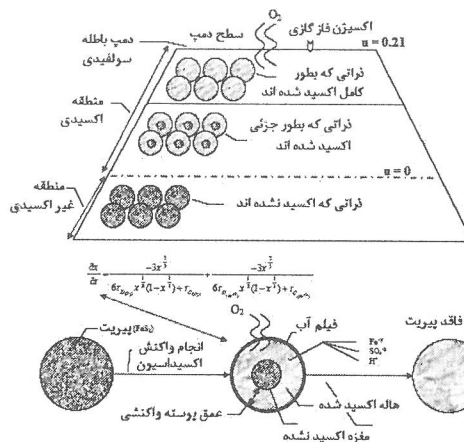
γ : عامل تبدیل یا ثابت هنری

۵-۱- محدودیت های مدل

نفوذ گازی تنها فرآیند تولید کننده اکسیژن در اعماق مختلف محل انباشت باطله ها است. این مدل واکنش شیمیایی بین AMD تولید شده و مواد باطله را در نظر نمی گیرد. از وجود باکتری های اکسیدکننده آهن دو ظرفیتی صرف نظر شده و اکسایش شیمیایی آهن دو ظرفیتی تنها فرآیند تولیدکننده آهن سه ظرفیتی در محل انباشت باطله های دارای پیریت است که در آنجا اکسیژن وجود دارد.

۵-۲- پارامترهای ورودی مدل

تحت فشار اتمسفر و دمای ۲۵ درجه سانتی گراد، غلظت اکسیژن در قسمت فوقانی محل انباشت ۹ مول بر متر مکعب



شکل (۳): مدل مفهومی فرآیند اکسایش پیریت در باطله های دارای کانی پیریت

$$\frac{\partial X}{\partial t} = \frac{-3X^{\frac{2}{3}}}{6\tau_{D[py]}X^{\frac{1}{3}}(1-X^{\frac{1}{3}}) + \tau_{C[py]}} + \frac{-3X^{\frac{2}{3}}}{6\tau_{D[ox]}X^{\frac{1}{3}}(1-X^{\frac{1}{3}}) + \tau_{C[ox]}} \quad (5)$$

$$\phi \frac{\partial C_i}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C_i}{\partial x_j^2} - q_j \frac{\partial C_i}{\partial x_j} \pm \frac{3(1-\phi)b_1^{-1}\rho_{py}X^{\frac{2}{3}}}{6\tau_{D[ox]}X^{\frac{1}{3}}(1-X^{\frac{1}{3}}) + \tau_{C[ox]}} \pm \phi_w [Fe^{2+}]u \left\{ K_1 \left(\frac{1}{[H^+]} \right)^2 + K_2 \right\} \quad i = 1, 2, \dots, n_c \quad (6)$$

مقادیر τ_D و τ_C از روابط (۷) و (۸) به دست می آیند [۲۳]:

$$\tau_D = \frac{\rho_{py} R^2}{6bD_e[Ox]C_{[Ox]}} \quad (7)$$

$$\tau_C = \frac{\rho_{py} R}{bK_{[Ox]}\alpha_{py}^{rock}\lambda C_{[Ox]}} \quad (8)$$

در روابط فوق،

X : کسر (یا درصد) پیریت باقی مانده در داخل ذره (Kg/Kg)
 t : زمان (s)

τ_C : کل زمان مورد نیاز برای اکسایش کامل پیریت درون یک ذره، در صورتی که فرآیند اکسایش فقط به وسیله کاهش سطح پیریت یا سینتیک واکنش سطحی هدایت شود (s)

τ_D : کل زمان مورد نیاز برای اکسایش کامل پیریت درون یک ذره، در صورتی که فرآیند اکسایش فقط به وسیله نفوذ ماده اکسید کننده به داخل ذره دارای پیریت هدایت شود (s)

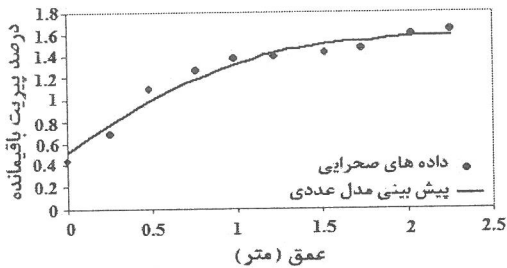
Oxd : ماده اکسید کننده (اکسیژن و یا آهن سه ظرفیتی)

ρ_{py} : دانسیته مولی پیریت داخل ذرات (mol/m^3)

R : شعاع ذرات دارای پیریت (m)

b : نسبت استوکیومتری مصرف پیریت به اکسیژن (mol/mol)

b' : نسبت استوکیومتری مصرف آهن دو ظرفیتی به



شکل (۴): مقایسه نتایج مدل‌سازی و داده‌های صحرائی (ضریب نفوذ مؤثر 6×10^{-7} متر مربع بر ثانیه، مدت زمان شبیه‌سازی ۱ سال و درصد اولیه پیریت در باطله‌ها $1/4$ تا $1/6$ در نظر گرفته شدند)

برابری مناسب بین داده‌های صحرائی و نتایج مدل، نشان‌دهنده انتخاب صحیح پارامترهای ورودی و توانا بودن مدل در شبیه‌سازی فرآیندهای مؤثر در اکسایش پیریت است. تحلیل داده‌ها به روش جذب اتمی [۲۱] نشان می‌دهد که مقدار پیریت باقی‌مانده در نمونه‌های سطحی حدود $0/58$ درصد است. نفوذ اکسیژن تا عمق تقریبی $1/5$ متر و انجام فرآیندهای اکسایش و شست‌وشو، مقدار پیریت موجود در باطله‌ها را کاهش می‌دهد. پایین‌تر از این عمق به دلیل عدم نفوذ اکسیژن، اکسایش پیریت تا اندازه‌ای متوقف می‌شود. مناسب‌ترین مقدار ضریب نفوذ مؤثر برای مدل‌سازی (D_e) برابر 6×10^{-7} مترمربع بر ثانیه انتخاب گردید. مدل نیز روند مشابهی را برای تغییرات پیریت باقی‌مانده از سطح محل انباشت تا عمق تقریبی $1/5$ متری نشان می‌دهد. از عمق $1/5$ متر به پایین پیریت در باطله‌ها به مقدار اولیه خود ($1/4$ تا $1/6$ درصد) می‌رسد.

۵-۴- مدل‌سازی دو بعدی- پیش‌بینی فرآیندهای اکسایش و انتقال محصولات آن

مدل‌سازی دو بعدی برای پیش‌بینی دقیق‌تر فرآیند اکسایش پیریت و همچنین چگونگی انتقال محصولات بدست آمده از انباشت باطله زغال‌شویی البرز شرقی انجام شده است. پارامترهای ورودی در مدل‌سازی دو بعدی، مشابه پارامترهای مورد استفاده در مدل‌سازی یک بعدی انتخاب گردید (جدول ۱). در مدل‌سازی دو بعدی، غلظت‌های اولیه و منبع گونه‌های شیمیایی Fe^{2+} ، Fe^{3+} و SO_4^{2-} به ترتیب (۱۰، ۱۰، ۱۰)، (۱۰، ۱۰، ۱۰) و (۱۰، ۱۰، ۱۰) مول بر متر مکعب و مقدار pH به ترتیب ۷ و $1/5$ انتخاب گردید. مدل دو بعدی، به شکل نوزنقه‌ای با ابعاد ۱۰۰ متر در جهت افقی و ۲۰ متر در جهت قائم (ارتفاع محل انباشت) در نظر گرفته شده است. این مدل با سلول‌های کوچک‌تری به اندازه ۲ متر در ۱ متر و تعداد 40×20 تقسیم‌بندی گردید. شبکه المان حجمی محدود مورد استفاده در مدل‌سازی در شکل (۵) نشان داده شده است.

(برابر با $21/$ درصد) در نظر گرفته شده است که برابر کسر مولی اکسیژن در هوا است. فرض شده که در ابتدا و قبل از آغاز فرآیند اکسایش پیریت، اکسیژنی در خلل و فرج باطله‌ها وجود ندارد. پارامترهای ورودی مدل در جدول (۱) آورده شده است [۲۴].

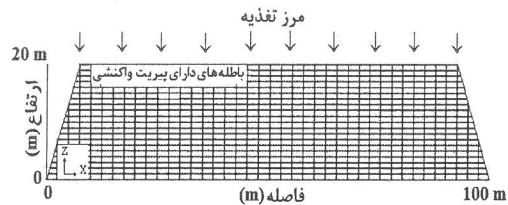
۵-۳- مدل‌سازی یک بعدی - کالیبراسیون مدل

برای کالیبره نمودن مدل، شبیه‌سازی در حالت یک بعدی انجام شده است. برای این منظور، از مدل آماده‌ای که برای پیش‌بینی اکسایش یک بعدی پیریت موجود در باطله‌های بدست آمده از شست‌وشوی زغال در منطقه البرز شرقی تهیه شده بود، استفاده گردید [۱۵]. با در نظر گرفتن پارامترهای ورودی مدل (جدول ۱) و با توجه به مفهوم سینتیک واکنش مرتبه اول در غلظت‌های پائین اکسیژن [۲۴]، معادلات (۴)، (۵) و (۶) به طور همزمان تحت گام‌های زمانی مختلف و با در نظر گرفتن مفهوم کاهش سطح پیریت ضمن انجام فعالیت‌های اکسایش، با استفاده از روش عددی حجم‌های محدود توسط نرم افزار PHOENICS حل شدند.

جدول (۱): پارامترهای ورودی مدل یک بعدی [۲۴]

مقدار / واحد	مشخصه مدل
۲/۵ متر (در امتداد z)	طول مدل
۱-۳ سال	مدت زمان شبیه‌سازی
۲۴	تعداد گام‌های زمانی
ناپایا	بستگی زمانی مدل
۲۰ (طول یکسان ۰/۱۷ متر)	تعداد المان‌های حجمی
$(1 \times 10^{-8} - 6 \times 10^{-7} m^2 / s)$	ضریب نفوذ مؤثر اکسیژن
($1/4\% - 1/6\%$)	درصد اولیه پیریت در باطله‌ها
$2300 kg/m^3$	دانسیته باطله
$5900 kg/m^3$	دانسیته پیریت
متغیر 2×10^{-6}	ضریب نفوذپذیری باطله
$90 (1/m)$	سطح پیریت به حجم باطله
$2/21 \times 10^{-9} (mol O_2/m^2s)$	ثابت سینتیک مرتبه اول برای O_2
$5/9 \times 10^{-10} (mol FeS_2/m^2s)$	ثابت سینتیک مرتبه اول FeS_2
$0/25 (m/yr)$	بارندگی متوسط سالیانه
۵۰۰	تعداد تکرارها

شکل (۴) نتیجه مدل‌سازی عددی یک بعدی برای مقدار پیریت باقی‌مانده در باطله‌های محل انباشت نسبت به عمق را با داده‌های تجزیه‌ای مربوط به یک محل نمونه‌برداری، در مدت زمان شبیه‌سازی یک سال از آغاز اکسایش پیریت، مقایسه می‌نماید.



شکل (۵): مدل انباشت باطله کارخانه زغال‌شویی البرز شرقی

زغال است. شکل (۶-پ) تغییرات pH را پس از مدت زمان یکسال از شروع مدل‌سازی نشان می‌دهد. همان‌طور که در شکل نشان داده شده است، pH در اعماق کم به مقدار ۳/۸ می‌رسد که این امر ناشی از واکنش اکسیژن با پیریت و تشکیل AMD است. مقدار pH در جهت عمق افزایش می‌یابد و به مقدار زمین‌هاش برابر با مقدار تقریبی ۷ می‌رسد. این نتیجه با pH اندازه‌گیری شده در انباشت باطله و در اعماق مختلف آن برابری مناسبی دارد.

شکل (۶-ت) غلظت سولفات پیش‌بینی شده به وسیله مدل را برای مدت زمان شبیه‌سازی یک سال نشان می‌دهد. بیش‌ترین مقدار SO_4^{2-} در مکانی است که اکسیژن در آنجا وجود دارد. همان‌طور که در شکل دیده می‌شود، بیش‌ترین مقدار SO_4^{2-} برابر با ۴۰۰ مول بر متر مکعب است که در مدل با غلظت رنگی بالا قابل تشخیص است. مقدار سولفات تولیدی با فرآیندهای فیزیکی مانند پراکندگی، نفوذ مولکولی، پهن‌رفت و بارش جوی به اعماق بیشتر نفوذ کرده و عمل رقیق‌سازی انجام می‌شود.

شکل (۶-ث) غلظت آهن دو ظرفیتی (Fe^{2+}) را پس از مدت زمان یک سال از آغاز مدل‌سازی نشان می‌دهد. یک غلظت بیشینه برای Fe^{2+} (حدود 300 mg/L) در مکانی که اکسیژن وجود دارد، رخ داده است و در جهت عمق به دلیل نفوذ کم اکسیژن، مقدار آن به شدت کاهش می‌یابد.

پیش‌بینی مدل دو بعدی برای غلظت آهن سه ظرفیتی (Fe^{3+}) برای مدت زمان مدل‌سازی یک سال در شکل (۶-ج) نشان داده شده است. با توجه به اینکه در نبود باکتری‌های تیوباسیلوس فرو اکسیدان، تولید Fe^{3+} به کندی رخ می‌دهد، بنابراین نقش Fe^{3+} در اکسایش پیریت کم است. غلظت Fe^{3+} محدود شده است به جایی که اکسیژن در میان خلل و فرج نفوذ کرده باشد.

نتایج مدل‌سازی یک و دو بعدی ریاضی و مقایسه آن‌ها با نتایج صحرایی برای تعیین پیریت باقی‌مانده در باطله‌های زغال‌شویی البرز شرقی و همچنین مقایسه آن‌ها با نتایج تحلیل عمقی (جدول ۲) به‌دست آمده برای عناصر مختلف در یک نقطه بر روی محل انباشت باطله‌ها، نشان‌دهنده اکسایش پیریت، تولید AMD و نشت محصولات اکسایش به مناطق پایین‌دست و به ویژه منابع آب زیرزمینی است که به تنهایی می‌تواند محیط‌زیست منطقه را تهدید نماید. این نتایج با نتایج بدست آمده از روش VLF همخوانی دارد. مطالعات قبلی انجام شده در منطقه و نتایج بدست آمده از مدل‌سازی یک بعدی فرآیند اکسایش پیریت [۱۵]، نتایج به دست آمده در تحقیق فوق را تأیید می‌نماید.

در شبیه‌سازی فوق فرض شده است که واکنش پیریت فقط پهنای ۲۵ متر از انباشت باطله را شامل می‌شود. همچنین فرض بر این است که سطح آب زیرزمینی خیلی پائین‌تر از قاعده محل انباشت است و محصولات ناشی از اکسایش با بارش جوی به اعماق پایین‌تر نفوذ می‌نماید. میانگین بارش سالیانه در مدل‌سازی ۰/۲۵ متر بر سال فرض شده است. نفوذپذیری باطله‌ها حدود 2×10^{-6} متر بر ثانیه به‌دست آمد و در محاسبات مورد استفاده قرار گرفت. ضریب نفوذ مولکولی برای محصولات اکسایش 2×10^{-9} متر مربع بر ثانیه و ضریب پراکندگی طولی و عرضی، ۲ متر در نظر گرفته شده است. فرض بر این است که تغییرات دمایی در اثر فرآیندهای اکسایش پیریت کم باشد. مقدار اکسیژن در قسمت بالایی محل انباشت برابر با مقدار آن در اتمسفر که مقدار ۹ مول بر متر مکعب یا معادل ۰/۲۱ درصد است، در نظر گرفته شده و فرض گردید که درصد اولیه اکسیژن در انباشت باطله صفر باشد.

شکل (۶-الف) پیش‌بینی مدل دو بعدی برای نفوذ اکسیژن درون باطله‌ها را نشان می‌دهد. در این مدل فرض شده است که انتقال اکسیژن از طریق فضاهای خالی انباشت باطله با ضریب نفوذ مؤثر اکسیژن صورت می‌گیرد. همان‌طور که در شکل دیده می‌شود، اکسیژن از مقدار اولیه خود یعنی ۹ مول بر متر مکعب (۰/۲۱ درصد) در اتمسفر به مقدار کمتر از ۳ مول بر متر مکعب (۰/۰۷ درصد) در عمق تقریبی ۲ متر می‌رسد. علت عدم نفوذ اکسیژن به اعماق بیشتر، دانه‌ریز بودن باطله‌های دارای پیریت است.

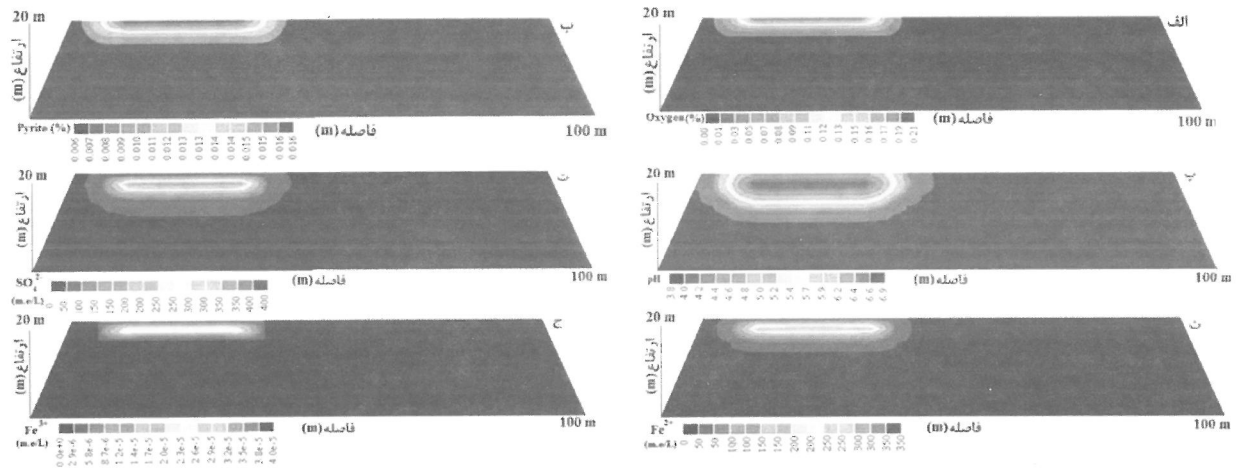
شکل (۶-ب) نتیجه مدل‌سازی دو بعدی مربوط به درصد پیریت باقی‌مانده در باطله‌های زغال‌شویی برای مدت زمان شبیه‌سازی یک سال را نشان می‌دهد. همان‌طور که دیده می‌شود، اکسایش پیریت در اعماقی صورت می‌گیرد که اکسیژن نفوذ کرده است، به‌طوری که پیریت در سطح انباشت به دلیل وجود اکسیژن به مقدار ۰/۰۰۶ کاهش یافته است و در جهت عمق مقدارش افزایش پیدا می‌کند، به‌طوری که به مقدار ثابت ۰/۰۱۶ در عمق تقریبی ۲ متر می‌رسد. این موضوع با نتایج مدل‌سازی یک بعدی و داده‌های صحرایی برابری خوبی دارد. pH عامل مهمی در کنترل کیفیت زهاب تولیدی در باطله‌های

۶- نتیجه

• نتایج به دست آمده از روش VLF، دو ناحیه با مقاومت ویژه کم که نشان دهنده وجود آلودگی احتمالی در پائین دست انباشت باطله در منطقه است را مشخص کرده است.

• نتایج به دست آمده از مدل سازی عددی یک بعدی فرآیند اکسایش پیریت و همچنین تحلیل نمونه های عمقی تهیه شده از انباشت باطله نشان دادند که، مقدار پیریت باقی مانده در نمونه های سطحی حدود ۰/۵۸ درصد است. نفوذ اکسیژن تا عمق تقریبی ۱/۵ متر و انجام فرآیندهای اکسایش و شستشو، مقدار پیریت موجود در باطله ها را به تدریج کاهش می دهد. از عمق ۱/۵ متری به پائین به دلیل عدم نفوذ اکسیژن، اکسایش پیریت متوقف شده و پیریت باقی مانده در باطله ها به مقدار اولیه خود یعنی بین ۱/۴ تا ۱/۶ درصد می رسد.

همان گونه که جدول (۲) نشان می دهد، فرآیند اکسایش پیریت در محل انباشت باطله سبب افزایش غلظت برخی از عناصر شده است. بطوری که غلظت یون سولفات (SO_4^{2-}) در عمق ۰/۵ متری به ۳۴۹ میلی اکی والان بر لیتر رسیده و pH در این عمق به مقدار ۳/۷ کاهش یافته است. بیشترین غلظت عناصر آهن، منگنز، روی، کروم و کبالت به ترتیب برابر با ۲۷۰، ۱۲۰، ۳۷۵، ۲۵ و ۱۰ میلی اکی والان بر لیتر در عمق ۲ متر، و بیشترین غلظت منیزیم به ۳۰۴ میلی اکی والان بر لیتر در عمق ۰/۵ متر رسیده است. غلظت مس در سرتاسر پروفیل انتخابی روی محل انباشت باطله مقدار ثابتی (۵ میلی اکی والان بر لیتر) را نشان داد. اسید تولید شده از فرآیند اکسایش پیریت سبب گردیده تا کانی های کربناته در باطله ها بطور کامل ناپدید شوند که به همین دلیل غلظتی برابر با صفر برای یون CO_3^{2-} به دست آمده است.



شکل (۶): پیش بینی مدل دو بعدی پس از یک سال از آغاز مدل سازی برای (الف) مقدار اکسیژن نفوذی به داخل باطله ها، (ب) درصد پیریت باقی مانده در باطله ها، (پ) pH، (ت) غلظت SO_4^{2-} ، (ث) غلظت Fe^{2+} ، (ج) غلظت Fe^{3+}

عمق (m)	پارامتر ژئوشیمیایی (m.e/L)														
	pH	Ca	Mg	Na	Fe	Mn	Cu	Zn	Cr	Co	SO_4^{2-}	HCO_3	Cl	CO_3^{2-}	$EC \times 10^3 (\mu S/cm)$
۰	۳/۹	۳۶	۳۰	۱۷۰	۹۰	۸۰	۵	۲۰	۲۰	۰	۱۲۸	۲۰	۰	۰	۲۲/۴
۰/۵	۳/۷	۲۸	۳۰.۴	۸/۰	۱۱۰	۸۳/۰	۰	۲۵	۰	۰	۳۴۹	۰	۰	۰	۳۰
۱	۴/۱	۲۲	۲۲.۴	۷۸/۰	۱۰۰	۶۰	۰	۱۵	۰	۰	۳۲۴	۰	۰	۰	۳۲/۴
۱/۵	۴/۶	۲۲	۲۹	۵۴۰	۱۴۰	۷۸	۰	۴۰	۱۰	۰	۲۹۰	۸۷/۰	۲۲۰	۰	۶۰/۴
۲	۳/۴.۳	۴۰	۲۰	۵۳.۴	۲۷۰	۱۲۰	۰	۳۷۰	۲۰	۱۰	۲۹۱	۷۰	۲۲۰	۰	۵۹/۲

در جهت عمق مقدارش افزایش پیدا می کند، به طوری که به مقدار ثابت ۱/۶ درصد در عمق تقریبی ۲ متر می رسد. این موضوع با نتایج مدل سازی یک بعدی و داده های صحرایی برابری خوبی دارد. pH در اعماق کم به مقدار ۳/۸ می رسد که این ناشی از واکنش اکسیژن با پیریت و تشکیل AMD است. مقدار pH در

نتایج مدل سازی دو بعدی نشان دادند که اکسیژن از مقدار اولیه خود یعنی ۹ مول بر متر مکعب (۰/۲۱ درصد) در اتمسفر، به مقدار کمتر از ۳ مول بر متر مکعب (۰/۰۷ درصد) در عمق تقریبی ۲ متر می رسد. پیریت در سطح محل انباشت باطله ها به دلیل وجود اکسیژن، به مقدار ۰/۶ درصد کاهش یافته است و

از فرآوری مواد معدنی فلزی ریزدانه مورد استفاده قرار گیرد.
 * پیشنهاد می‌شود تا یک گمانه در پائین دست محل انباشت باطله‌ها حفر شود و وضعیت گسترش آلودگی در اعماق بیشتر مورد بررسی قرار گیرد.
 * نمونه‌برداری و تجزیه آب‌های زیرزمینی از طریق چاه آب شهرک مسکونی مهماندوست، آب‌های سطحی و خاک در پائین- دست محل انباشت باطله‌ها پیشنهاد این تحقیق است.

۷- تقدیر و تشکر

از دانشگاه صنعتی شاهرود و شرکت زغال‌سنگ البرزشرقی به دلیل حمایت از این تحقیق قدردانی می‌گردد.

جهت عمق افزایش می‌یابد و به مقدار زمین‌ه‌اش برابر مقدار تقریبی ۷ می‌رسد. بیش‌ترین مقدار SO_4^{2-} برابر با ۴۰۰ مول بر متر مکعب پیش بینی شده است. مقدار سولفات تولیدی با فرآیندهای فیزیکی مانند پراکندگی، نفوذ مولکولی، پهن‌رفت و بارش جوی به اعماق بیشتر نفوذ کرده و عمل رقیق‌سازی صورت می‌گیرد. غلظت بیشینه تولیدی برای Fe^{+2} (حدود 300 mg/L) در مکانی که اکسیژن وجود دارد رخ داده است و در جهت عمق به دلیل نفوذ کم اکسیژن، مقدار آن به شدت کاهش می‌یابد. البته در عمقی که اکسیژن نفوذ دارد، بخشی از Fe^{2+} به Fe^{3+} تبدیل شده است.

* مدل ارائه شده در این مقاله می‌تواند برای پیش‌بینی فرآیندهای اکسایش پیریت و تولید AMD در باطله‌های حاصل از شست و شوی زغال‌سنگ و هم چنین نرمه‌های بدست آمده

۸- مراجع

- [۱] Moncur, M.C.; Ptacek, C.J.; Blowes, D.W.; Jambor, J.L.; "Release, transport and attenuation of metals from an old tailings impoundment", *Applied Geochemistry* 20, 639-659, 2005.
- [۲] Spalding, D.B.; "A general purpose computer program for multi-dimensional one- and two-phase flow", *Mathematics and Computers in Simulation* 23(3), 267-276, 1981.
- [۳] Singh, R.N.; Doulati Ardejani, F.; "Finite volume discretisation for solving acid mine drainage problems", *Archives of Mining Science* 49 (4), 531-556, 2004.
- [۴] Doulati Ardejani, F.; Singh, R.N.; Baafi, E.Y.; "Use of PHOENICS for solving one dimensional mine pollution problems", *The PHOENICS Journal: Computational Fluid Dynamics and its applications*, Vol. 16, CHAM, UK, 23p., 2004.
- [۵] Doulati Ardejani, F.; Jodieri Shokri, B.; Moradzadeh, A.; Soleimani, E.; Ansari Jafari, M.; "A combined mathematical-geophysical model for prediction of pyrite oxidation and pollutant leaching associated with a coal washing waste dump", *International Journal of Environmental Science and Technology* 5 (4), 517-526, 2008.
- [۶] Doulati Ardejani F.; Jodieri Shokri B.; Bagheri M.; Soleimani E.; "Investigation of pyrite oxidation and acid mine drainage characterization associated with Razi active coal mine and coal washing dumps in the Azad Shahr-Ramian region, northeast Iran", *Environmental Earth Sciences*, 61, 1547-1560, 2010.
- [۷] گروه تهیه گزارشات دفتر فنی اکتشافات؛ اکتشافات تفصیلی منطقه زغالی پشکلات، شرکت زغال‌سنگ البرز شرقی، ۱۳۵۷، ص ۱۸۳.
- [۸] ABEM Interpretation Guide; "ABEM WADI VLF Interpretation", 1989.
- [۹] Ramag instruction manual; "VLF survey planning and interpretation software", 2002.
- [۱] Kleinmann, R.L.P.; "Prediction of Water Quality at Surface Coal Mines", *The National Mine Land Reclamation Center*, pp.73-129, 2001.
- [۲] Herbert Jr., R.B.; "Metal transport in groundwater contaminated by acid mine drainage", *Nordic Hydrology* 25, 193-212, 1994.
- [۳] Singer, P.C.; Stumm, W.; "Acidic mine drainage: The rate determining step", *Science* 167, 1121-1123, 1970.
- [۴] Williams, R.E.; Baldwin, J.; Ralston, D.R.; "Coping with mine drainage regulations", *Proc. First Int. Mine Drainage Symposium*, Denver, Colorado, pp.184 -218, 1979.
- [۵] Guedes de Carvalho, R.A.; Gonzalez Bega, C.G.; Martins Sampaio, M.N.; Neves, O; Sol Pereira, M.C.; "A study of the drainage of the pyrite mines of Aljustrel (Portugal)", *International Journal of Mine Water* 5(2), 43-56, 1986.
- [۶] Rogowski, A.S.; Pionke, H.B.; Broyan, J.G.; "Modelling the impact of strip mining and reclamation processes on quality and quantity of water in mined areas: A review", *Journal of Environmental Quality* 6 (3), 237-244, 1977.
- [۷] Cathles, L.M.; Apps, J.A.; "A model of the dump leaching process that incorporates oxygen balance, heat balance and air convection", *Metallurgical Transactions B. Volume 6B*, 617-624, 1975.
- [۸] Jaynes, D.B.; Rogowski, A.S.; Pionke, H.B.; "Acid mine drainage from reclaimed coal strip mines, 1, Model description", *Water Resources Research* 20 (2), 233-242, 1984.
- [۹] Davis, G.B.; Ritchie, A.I.M.; "A model of oxidation in pyritic mine wastes: part 1: Equations and approximate solution", *Applied Mathematical Modelling* 10 (5), 314-322, 1986.
- [۱۰] Gerke, H.H.; Molson, J.W.; Frind, E.O.; "Modelling the impact of physical and chemical heterogeneity on solute leaching in pyritic overburden mine spoils", *Ecological Engineering* 17, 91-101, 2001.



ص ۱۰۶۰-۱۰۵۱:۱۳۸۳.
Levenspiel, O.; Chemical Reaction Engineering, John Wiley, New York, 1972.

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

[۲۰] Karous, M.; Hjelt, S.E.; "Linear filtering of VLF dip angle measurements", Geophysical Prospecting 39, 567-580, 1989.

[۲۱] زارع، مهدی؛ سلیمانی، اسماعیل؛ دولتی ارده‌جانی، فرامرز؛ مرادزاده، علی؛ "بررسی تغییرات اکسایشی پیریت باطله‌های زغال به روش جذب اتمی". بیست و ششمین گردهمایی علوم زمین، ۲۸ تا ۳۰ بهمن ۸۶، ص ۸، ۱۳۸۶.

[۲۲] عبداللهی، م؛ شهبازی، ب؛ "بررسی پارامترهای مؤثر در حذف مغناطیسی پیریت از زغال‌سنگ طیس با استفاده از طراحی آزمایشها". کنفرانس مهندسی معدن، جلد دوم،

۹- زیرنویس ها

^۱ Acid mine drainage

^۲ Dump

^۳ Very low frequency