

ЦИФРОВОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ОПТИМИЗАЦИЯ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ КОМПЛЕКСНОЙ ПЕРЕРАБОТКИ ГИДРОМИНЕРАЛЬНОГО СЫРЬЯ КАСПИЙСКОГО РЕГИОНА

Бердыева Эджегуль Аманбердыевна,
кандидат химических наук, ст. преподаватель,
Амангельдыева Гульширин Тойчиевна, ст. преподаватель
Борджаков Рахым Оразгулыевич, инженер-электронщик
Институт Телекоммуникаций и информатики Туркменистана,
г. Ашхабад, Туркменистан

Аннотация. Статья посвящена применению современных информационных технологий и методов численного моделирования для оптимизации процессов переработки многокомпонентного гидроминерального сырья Каспийского бассейна. Разработан программно-моделирующий комплекс для прогнозирования фазовых равновесий в водно-солевых системах, позволяющий автоматизировать расчет параметров кристаллизации. На основе вычислительных экспериментов определены оптимальные технологические режимы, обеспечивающие ресурсосбережение и получение высокочистого сульфата калия (K_2SO_4).

Ключевые слова: цифровое моделирование, оптимизация, гидроминеральное сырье, сульфата калия, Каспийский регион, информационные технологии в науке.

Введение

Современная химическая инженерия и рациональное природопользование немислимы без интеграции сквозных цифровых технологий. В рамках реализации национальных программ цифровизации научно-исследовательской деятельности, автоматизация расчетов сложных многокомпонентных систем является приоритетной задачей [1].

Гидроминеральные ресурсы Каспийского региона представляют собой сложную многокомпонентную систему ($Na^+, K^+, Mg^{2+}, Cl^-, SO_4^{2-}, -H_2O$). Разработка ресурсосберегающей технологии получения высокочистого сульфата калия «вслепую», путем проведения тысяч натуральных химических экспериментов, экономически нецелесообразна. Использование методов цифрового моделирования и построение виртуального прототипа технологического процесса позволяет радикально сократить затраты времени и ресурсов на этапе проектирования [2].

1. Математическое и программное обеспечение моделирования

Для прогнозирования фазового поведения каспийских рассолов при выпаривании и ступенчатой кристаллизации была разработана математическая модель на основе уравнений термодинамического равновесия Питцера. Информационная структура модели включает расчет активности компонентов и коэффициентов растворимости солей в зависимости от температуры (T) и концентрации (C).

Алгоритм работы программного комплекса состоит из следующих этапов:

1. **Ввод исходных данных:** ввод многокомпонентного физико-химического состава исходной рапы.
2. **Расчет итерационного цикла:** вычисление произведения растворимости солей при заданных температурных градиентах.
3. **Оптимизация критерия:** поиск экстремума целевой функции эффективности процесса:

$$F(T, \tau) = \frac{m(K_2SO_4)}{E_{energy}} \rightarrow \max$$

где $m(K_2SO_4)$ — масса целевого продукта заданной чистоты, а E_{energy} — виртуальные энергозатраты на выпаривание и охлаждение.

2. Цифровой эксперимент и оптимизация параметров

В ходе вычислительного эксперимента на ЭВМ была смоделирована многоступенчатая схема разделения солей. Информационная система позволила визуализировать «траекторию кристаллизации» и определить критические точки, в которых начинается совместное осаждение сульфата калия с нежелательными примесями (такими как галит $NaCl$ или астраханит).

Благодаря модулю оптимизации были установлены точные цифровые параметры технологического процесса:

- Оптимальный температурный режим селективной садки солей.
- Управляющее воздействие скорости охлаждения раствора, обеспечивающее формирование крупных, легко фильтруемых кристаллов сульфата калия с чистотой не менее **99.5%**.

Сгенерированные цифровые профили легли в основу разработки алгоритмов автоматизированных систем управления технологическими процессами (АСУ ТП) для потенциального опытно-промышленного производства [3].

3. Архитектурные решения программного комплекса

Разработанная информационная система представляет собой модульное программное обеспечение, спроектированное по принципу разделения вычислительной логики и интерфейса пользователя. Архитектура комплекса включает три основных компонента:

1. **База данных физико-химических констант:** содержит массивы эмпирических параметров Питцера, температурные коэффициенты растворимости солей и данные многолетних мониторингов состава каспийской рапы.
2. **Вычислительное ядро (Solver):** математический модуль, написанный на высокопроизводительном языке численных расчетов (Python/MATLAB), осуществляющий итерационное решение систем нелинейных уравнений

фазовых равновесий.

3. **Модуль визуализации и оптимизации:** генерирует графические интерфейсы, строит изотермические диаграммы растворимости и выдает оператору рекомендации по управлению температурным режимом.

4. Результаты вычислительного эксперимента и обсуждение

В ходе симуляции технологического процесса на ЭВМ был смоделирован процесс изотермического испарения рапы с последующим ступенчатым охлаждением промежуточных растворов. Информационная система позволила в режиме реального времени отслеживать динамику изменения концентраций ионов K^+ и SO_4^{2-} .

Сравнительный анализ реальных лабораторных тестов и данных, полученных в результате цифрового моделирования, представлен в Таблице 1.

Таблица 1. Верификация результатов цифрового моделирования

Технологический параметр	Экспериментальные данные	Данные цифровой модели	Относительная погрешность, %
Температура садки солей, °С	25.0	24.8	0.8%
Выход сульфата калия (K_2SO_4), %	88.4	89.1	0.79%
Чистота целевого продукта, %	99.2	99.5	0.3%
Энергозатраты на цикл, кВт·ч/т	1420	1235	13.0% (оптимизация)

Минимальная погрешность (менее 1% по химическим показателям) доказывает высокую адекватность разработанной математической модели. При этом модуль оптимизации ИТ-комплекса за счет перераспределения тепловых потоков в виртуальной модели позволил снизить расчетные энергозатраты на **13%** по сравнению с базовой «ручной» технологической схемой [4].

5. Внедрение ИТ-моделей в образовательный процесс

Помимо чисто научного значения, разработанный программный комплекс обладает высоким образовательным потенциалом в рамках концепции интеграции науки и образования. Данное ПО может быть интегрировано в учебный процесс профильных вузов Туркменистана при подготовке ИТ-специалистов, инженеров и химиков-технологов. Использование таких «цифровых двойников» в рамках лабораторных работ позволяет студентам:

- Визуально изучать сложные термодинамические процессы без использования дорогостоящих химических реактивов.
- Осваивать методы компьютерного инжиниринга и программирования на реальных производственных задачах региона [5].

Заключение

Цифровое моделирование и оптимизация технологических процессов комплексной переработки гидроминерального сырья Каспийского региона выводят региональные исследования на качественно новый уровень. Разработанный авторами программно-моделирующий комплекс позволяет:

1. Исключить метод «проб и ошибок» из процесса проектирования химических производств, заменив его высокоточными ИТ-экспериментами.
2. Математически обосновать параметры получения высокочистого сульфата калия (99.5%) при одновременном снижении энергозатрат.
3. Создать эффективный цифровой инструмент как для академической науки, так и для модернизации высшего технического образования.

Применение сквозных ИТ-технологий в ресурсосберегающих процессах вносит прямой вклад в успешное выполнение государственных задач по форсированной цифровизации экономики и научно-промышленного потенциала Туркменистана [1, 2].

Литература

1. Концепция развития цифровой экономики в Туркменистане на 2019-2025 гг. — Ашхабад, 2018.
2. Советов, Б. Я., Яковлев, С. А. Моделирование систем: Учебник для вузов. — М.: Юрайт, 2023. — 343 с.
3. Кафаров, В. В., Мешалкин, В. П. Анализ и синтез химико-технологических систем. — М.: Химия, 1991 (переизд. 2022).
4. Журнал «Наука и техника» Академии наук Туркменистана. — 2024. — № 2. — С. 64–71.
5. Дьяконов, В. П. MATLAB. Полный самоучитель. — М.: ДМК-Пресс, 2021. — 768 с.