

Научная статья
УДК 669.85/.86:004.4
doi:10.37614/2949-1215.2025.16.1.019

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ РАСЧЕТА ЭКСТРАКЦИОННЫХ КАСКАДОВ ПО ПОЛУЧЕНИЮ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ МЕТАЛЛОВ

Виталий Александрович Федоров¹, Михаил Александрович Афонин²

^{1, 2}Санкт-Петербургский государственный технологический институт
(технический университет), Санкт-Петербург, Россия

¹fva96@mail.ru

²afonin18111956@yandex.ru

Аннотация

Рассматриваются особенности процессов экстракционного получения редкоземельных металлов (РЗМ) и их информационное описание в виде 3D-моделей. Предложена математическая модель для проектирования и эксплуатации экстракционных каскадов, позволяющая решать задачи выбора количества экстракторов и определения расходов потоков фаз и обеспечивающая требуемую степень извлечения РЗМ, для различных типов сырья, экстрагентов, типов экстракторов и составов входных потоков водной и органической фаз.

Ключевые слова:

цифровая информационная модель, экстракционный каскад, редкоземельные металлы, математическое моделирование, 3D-модель, технологическое проектирование, экстракция, PlantLinker

Благодарности:

разработка выполнена в рамках прикладной НИР «Разработка программного комплекса для технологического проектирования промышленных экстракционных каскадов» по договору СПбГТИ(ТУ) и АО «ГК «Русредмет» (Санкт-Петербург).

Финансирование:

исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 21-79-30029).

Для цитирования:

Федоров В. А., Афонин М. А. Программный комплекс для расчета экстракционных каскадов по получению редкоземельных металлов // Труды Кольского научного центра РАН. Серия: Технические науки. 2025. Т. 16, № 1. С. 101–107. doi:10.37614/2949-1215.2025.16.1.019.

Original article

SOFTWARE PACKAGE FOR CALCULATION OF EXTRACTION CASCADES FOR OBTAINING RARE EARTH METALS

Vitalii A. Fedorov¹, Mikhail A. Afonin³,

^{1, 2}Saint Petersburg State Institute of Technology (Technical University), Saint Petersburg, Russia

¹fva96@mail.ru

²afonin18111956@yandex.ru

Abstract

The features of the processes of extraction of rare earth metals (REM) and their information description in the form of 3D models are considered. A mathematical model for the design and operation of extraction cascades was proposed. It enabled us to solve the problems of selecting the number of extractors and determining the phase flow rates that ensure the required degree of REE extraction for various types of raw materials, extractants, types of extractors, and the composition of input flows of aqueous and organic phases.

Keywords:

digital information model, extraction cascade, rare earth metals, mathematical modeling, 3D model, process design, extraction, PlantLinker

Acknowledgments:

The development was carried out within the framework of the applied research project "Development of a software package for the technological design of industrial extraction cascades" under an agreement between SPbGTI (TU) and JSC GC Rusredmet (St. Petersburg).

Funding:

The study was carried out with the support of a grant from the Russian Science Foundation (project No. 21-79-30029).

For citation:

Fedorov V. A., Afonin M. A. Software package for calculation of extraction cascades for obtaining rare earth metals // Transactions of the Kola Science Centre of RAS. Series: Engineering Sciences. 2025. Vol. 16, No. 1. P. 101–107. doi:10.37614/2949-1215.2025.16.1.019.

Введение

Развитие информационных технологий связи, наукоемкого приборостроения, необходимость создания экологически чистых технологий, альтернативных источников энергии на современном этапе увеличили спрос в редкоземельных металлах (РЗМ), которые сегодня являются главными составляющими при создании новых материалов [1].

Целью работы является разработка программного комплекса, который позволяет для заданного типа и состава сырья, типа экстрагента, требований к производительности и степеням извлечения РЗМ выбрать оборудование, сформировать топологию каскада и выполнить его поверочный расчет для определения расходов потоков водной и органической фазы, обеспечивающих заданную производительность и степени извлечения РЗМ.

Результаты

Поставлены задачи технологического проектирования и эксплуатации каскада процессов экстракции РЗМ.

Технологическое проектирование экстракционных каскадов для извлечения РЗМ осуществляется в соответствии с техническим заданием (ТЗ) на проектирование:

$$TZ = \{R, T_{Ex}, T_{sol}, T_{add}, G_0, I_j^0, j = 1, \dots, N_b\}, \quad (1)$$

где $R = \{T_R, C_{вхj}, j = 1, \dots, N_b\}$ — характеристики сырья; T_R — тип сырья; $C_{вхj}$ — входная концентрация j -й базовой формы, моль/дм³; T_{Ex} — тип экстрагента; T_{sol} — тип растворителя; T_{add} — тип солилизирующей добавки; G_0 — требуемая производительность каскада, дм³/ч; I_j^0 — требуемая степень извлечения j -й базовой формы, %.

Задача технологического проектирования экстракционного каскада заключается в следующем.

Для характеристик процесса экстракции РЗМ, указанных в техническом задании TZ : выбрать из базы данных оборудования экстрактор с характеристиками $H_{ext} = \{T_e, V, \tau\}$, рабочий объем V которого обеспечивает заданную производительность G_0 при времени пребывания τ ; сформировать топологию экстракционного каскада (схему соединения экстракторов по водной и органической фазам) $M_{WO} = \{M_W, M_O\}$, состоящего из N_{ap} экстракторов с характеристиками H_{ext} ; выполнить поверочный расчет экстракционного каскада сформированной топологии, используя математическую модель процесса экстракции $Y = F(X, U, A)$, которая позволяет, варьируя расходы входных и выходных потоков водной и органической фаз $U = \{F_{oinp}, F_{oout}, F_{winp}, F_{wout}\}$, определить их значения, обеспечивающие выполнение требований ТЗ к степеням извлечения базовых форм, включая РЗМ, $I_j \geq I_j^0, j = 1, \dots, N_b$ [2].

Задача эксплуатации экстракционного каскада заключается в обеспечении таких расходов входных и выходных потоков водной и органической фаз, при которых в условиях заданной топологии каскада обеспечиваются степени извлечения всех базовых форм, включая РЗМ, не ниже требуемых значений, указанных в ТЗ.

В постановке задачи проектирования использованы следующие обозначения: T_e — тип экстрактора; V — рабочий объем экстрактора, дм³; τ — время пребывания в экстракторе, ч; M_W — матрица связей экстракторов по водной фазе; M_O — матрица связей экстракторов по органической фазе; N_{ap} — количество экстракторов; X — вектор входных параметров процесса; A — вектор коэффициентов математической модели; F_{oinp} — вектор расходов входных потоков в органической фазе, дм³/ч; F_{oout} — вектор расходов выходных потоков в органической фазе, дм³/ч; F_{winp} — вектор расходов входных потоков в водной фазе, дм³/ч; F_{wout} — вектор расходов выходных потоков в водной фазе, дм³/ч.

Получены и обработаны экспериментальные данные по изотермам экстракции РЗМ с использованием ТБФ для определения коэффициентов математической модели экстракции — термодинамических констант образования химических форм и параметров неидеальности фаз экстракционной системы, на основе которых вычисляются концентрационные константы равновесия химических реакций (рис. 1). Полученные результаты являются основой для разработки подсистемы обработки экспериментальных данных по изотермам экстракции, позволяющей формировать значения коэффициентов математической модели для различных типов и компонентных составов сырья и экстрагентов [3–5].

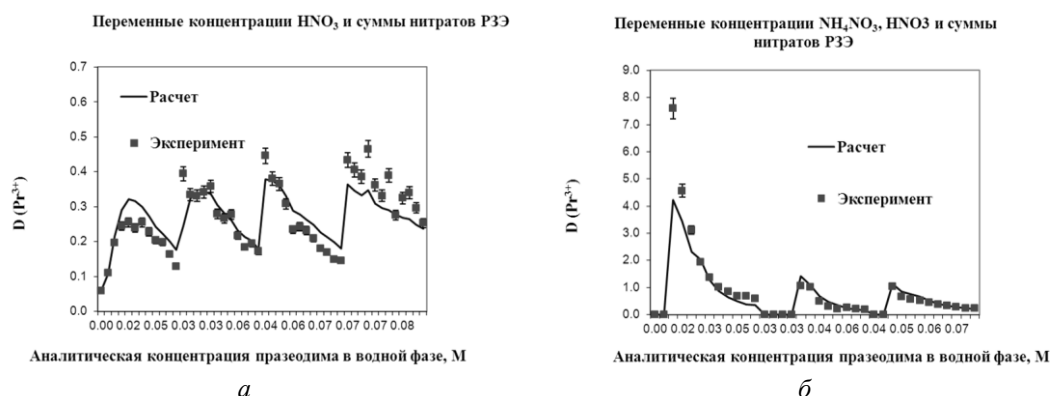


Рис. 1. Зависимость коэффициентов распределения нитрата празеодима от равновесной его концентрации в водной фазе. Переменная концентрация HNO_3 (а), переменная концентрация NH_4NO_3 (б). Экстрагент — 100 % ТБФ

Принцип работы программного комплекса проиллюстрирован на примере простейшего противоточного экстракционного каскада из трех экстракторов и простейшего процесса извлечения лантана из азотнокислого раствора три-н-бутилфосфатом (100 %). Схема каскада представлена на рис. 2.

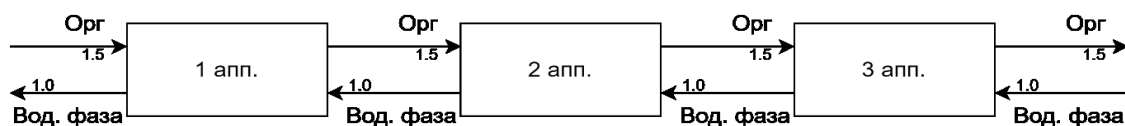
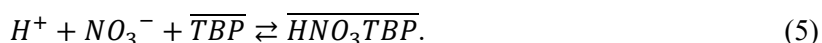
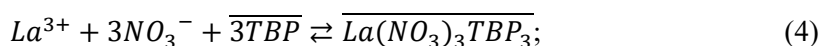


Рис. 2. Схема экстракционного каскада для извлечения лантана

Процесс экстракции, протекающий на каждой ступени каскада, описывается следующей совокупностью из 4 химических реакций:



Разработан модуль математического обеспечения в каскадах с различной конфигурацией.

Для построения математической модели процесса экстракции лантана три-н-бутилфосфатом приняты допущения о достижении экстракционной системой, в которой протекают химические реакции, равновесного состояния, взаимной нерастворимости водной и органической фаз, а также о постоянстве их объемов, идеальном смешении фаз, выполнении закона действующих масс и изотермическом характере процесса.

Получена система нелинейных алгебраических уравнений для вычисления равновесных концентраций базовых химических форм в водной и органической фазах [6]:

$$C_{k,1}^w + \alpha_{1,1}K_1C_{k,1}^w|\alpha_{1,1}|C_{k,2}^w|\alpha_{1,2}| + \beta\alpha_{4,1}K_4C_{k,1}^w|\alpha_{4,1}|C_{k,2}^w|\alpha_{4,2}|C_{k,4}^o|\alpha_{4,4}| = C_{k-1,1}^w; \quad (6)$$

$$C_{k,2}^w + \alpha_{1,2}K_1C_{k,1}^w|\alpha_{1,1}|C_{k,2}^w|\alpha_{1,2}| + \alpha_{2,2}K_2C_{k,2}^w|\alpha_{2,2}|C_{k,3}^w|\alpha_{2,3}| + \beta\left(\alpha_{3,2}K_3C_{k,2}^w|\alpha_{3,2}|C_{k,3}^w|\alpha_{3,3}|C_{k,4}^o|\alpha_{3,4}| + \alpha_{4,2}K_4C_{k,1}^w|\alpha_{4,1}|C_{k,2}^w|\alpha_{4,2}|C_{k,4}^o|\alpha_{4,4}| \right) = C_{k-1,2}^w; \quad (7)$$

$$C_{k,3}^w + \alpha_{2,3}K_2C_{k,2}^w|\alpha_{2,2}|C_{k,3}^w|\alpha_{2,3}| + \beta\alpha_{3,3}K_3C_{k,2}^w|\alpha_{3,2}|C_{k,3}^w|\alpha_{3,3}|C_{k,4}^o|\alpha_{3,4}| = C_{k-1,3}^w; \quad (8)$$

$$C_{k,4}^o + \alpha_{3,4}K_3C_{k,2}^w|\alpha_{3,2}|C_{k,3}^w|\alpha_{3,3}|C_{k,4}^o|\alpha_{3,4}| + \alpha_{4,4}K_4C_{k,1}^w|\alpha_{4,1}|C_{k,2}^w|\alpha_{4,2}|C_{k,4}^o|\alpha_{4,4}| = C_{k+1,4}^o, \quad (9)$$

где $C_{k-1,j}^w$ — равновесная концентрация j -й химической формы в водной фазе в $(k-1)$ -м экстракторе (концентрация j -й химической формы в потоке водной фазы на входе в k -й экстрактор), моль/дм³; $C_{k,j}^w$ — равновесная концентрация j -й химической формы в водной фазе в k -м экстракторе, моль/дм³; $C_{k,j}^o$ — равновесная концентрация j -й химической формы в органической фазе в k -м экстракторе, моль/дм³; $C_{k+1,j}^o$ — равновесная концентрация j -й химической формы в органической фазе в $(k+1)$ -м экстракторе (концентрация j -й химической формы в потоке органической фазы на входе в k -й экстрактор), моль/дм³; K_i — константа равновесия i -й реакции, дм³/моль; α_{ij} — стехиометрический коэффициент j -й химической формы в i -й реакции; β — соотношение расходов потоков водной и органической фаз.

Степень извлечения целевого компонента вычисляется как его количество в потоке экстракта, выходящем из первого экстрактора каскада, к его количеству в питающем водном растворе, подаваемом в первый экстрактор:

$$I = \frac{F_o C_{1,7}^o}{F_w C_{0,3}^w} 100 = \beta \frac{C_{1,7}^o}{C_{0,3}^w} 100, \quad (10)$$

где F_w, F_o — расходы потоков водной и органической фаз, дм³/ч.

Поскольку в экстракте лантан находится в виде комплекса $\text{La}(\text{NO}_3)_3\text{TBP}_3$, в числителе формулы стоит равновесная концентрация этого комплекса в органической фазе $C_{1,7}^o$.

Программное обеспечение подсистемы разработано на объектно-ориентированном языке визуального программирования C#. Пример вывода результатов распределения концентраций базовых химических форм в органической фазе представлен на рис. 3.

В таблице представлено сравнение результатов экстракции лантана в каскадах из 3 и 4 экстракторов.



Рис. 3. Распределение концентраций базовых химических форм в органической фазе

Сравнение результатов экстракции для 3 и 4 экстракторов

Характеристика	Количество экстракторов	
	3	4
Концентрация La в органической фазе на выходе из 3, 4 аппарата, моль/дм ³	0,256	0,271
Степень извлечения, %	75,96	80,11

Из таблицы следует, что при увеличении количества экстракторов увеличивается степень извлечения лантана. Это подтверждает работоспособность созданной компьютерной модели процесса экстракции и возможность ее применения для поверочного расчета экстракционных каскадов с различным количеством ступеней.

В отечественной САПР PlantLinker разработаны 3D-модели лабораторного и промышленного экстрактора смесительно-отстойного типа, на основе которых выполнена сборка 3D-моделей экстракционных каскадов из 3 и 48 ступеней. Результаты тестирования разработанной подсистемы выбора экстракторов и формирования топологий экстракционных каскадов с различными схемами соединения экстракторов по водной и органической фазам на примерах 3D-моделей единичного лабораторного экстрактора и каскада из трех экстракторов подтвердили работоспособность системы как инструмента для автоматизированного проектирования экстракционных каскадов (рис. 4–6).

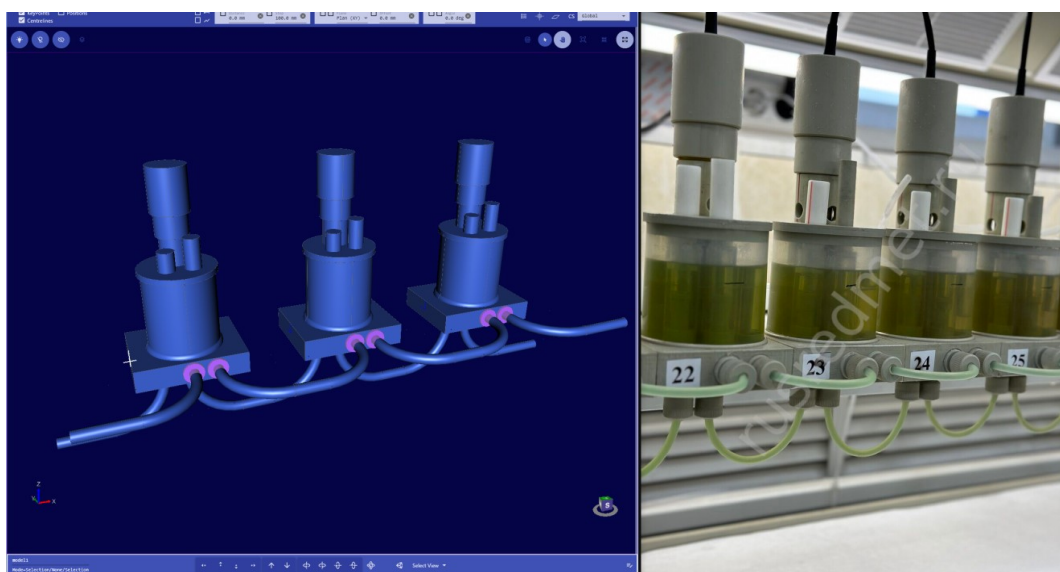


Рис. 4. 3D-модель единичного лабораторного экстрактора в скомпонованном виде каскада из трех экстракторов, обвязанного патрубками органической и водной фаз и моделируемый технический объект (справа)

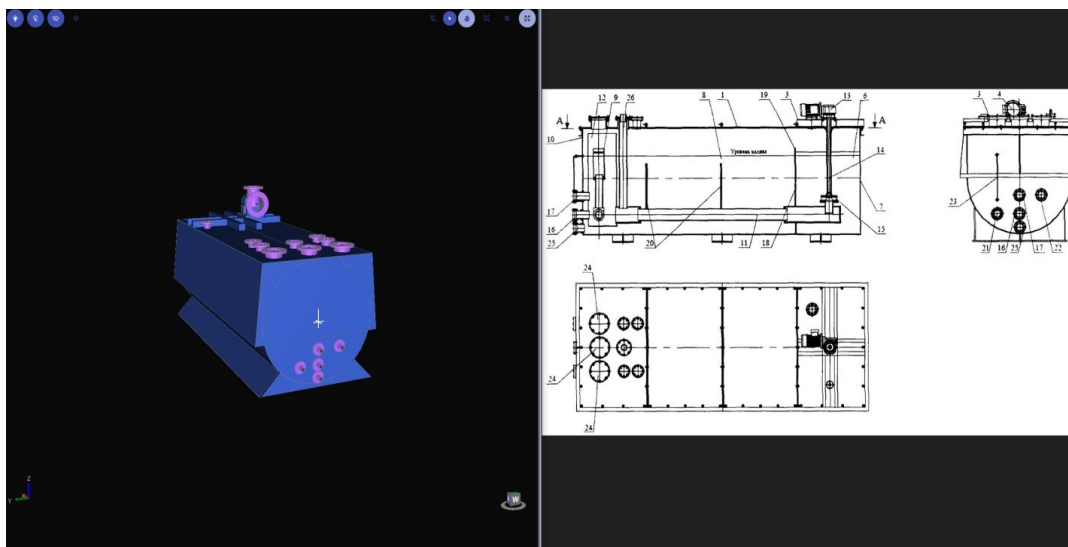


Рис. 5. 3D-модель единичного промышленного смесительно-отстойного экстрактора и моделируемый технический объект (справа)

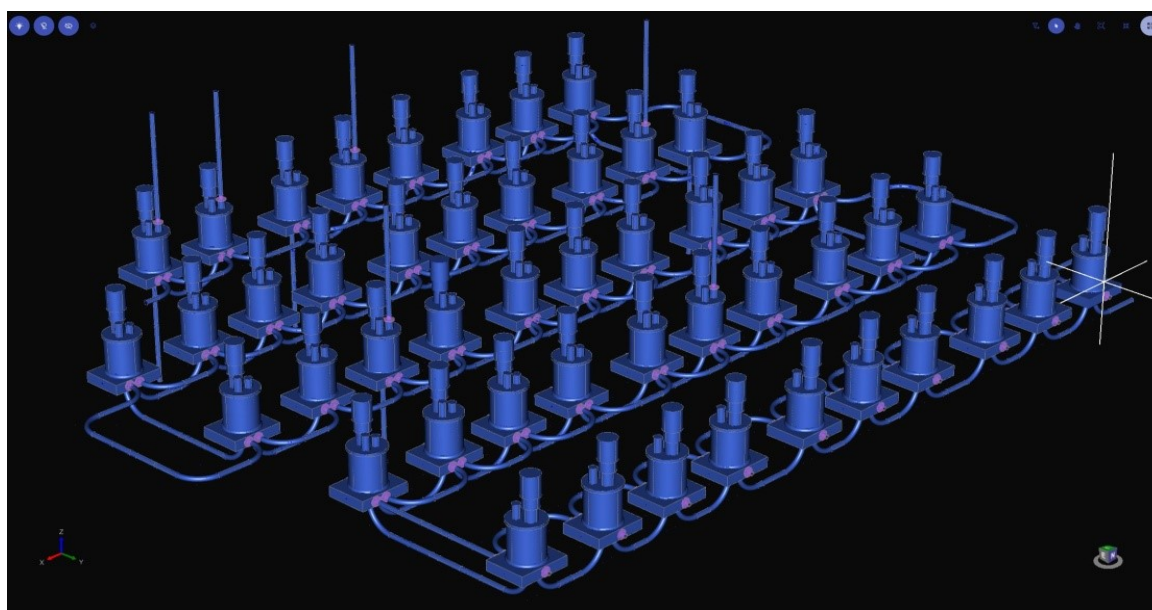


Рис. 6. 3D-модель экстракционного каскада из 48 экстракторов

Выводы

Разработанный программный комплекс для технологического проектирования экстракционных каскадов протестирован по данным процесса извлечения лантана с помощью ТБФ в каскадах из 3 и 4 экстракторов. Как показали результаты вычислительного эксперимента, с увеличением количества ступеней в каскаде растет степень извлечения РЗМ. Результаты тестирования подтвердили работоспособность программного обеспечения для данного класса объектов проектирования.

Список источников

1. Поляков Е. Г., Нечаев А. В., Смирнов А. В. *Металлургия редкоземельных металлов* /. 2-е изд., стер. М.: Юрайт, 2024. 501 с. ISBN 978-5-534-12813-0.
2. Чистякова Т. Б., Федоров В. А., Плonsкий В. Ю., Козлов А. В. Программный комплекс для автоматизации технологического проектирования экстракционных каскадов редкоземельных элементов // *Математические методы в технологиях и технике*. 2024, № 7. С. 45–50.
3. База данных и математическая модель экстракции РЗЭ цериевой подгруппы в системе $\text{NH}_4\text{NO}_3\text{--HNO}_3\text{--H}_2\text{O--ТБФ}$ с учетом ассоциации экстрагента и диссоциации азотной кислоты / М. А. Афонин, В. В. Шатов, А. С. Сибилев, А. В. Смирнов, Л. В. Красников, А. В. Нечаев // *Труды Кольского научного центра РАН. Химия и материаловедение. Спецвыпуск*. 2015. № 5 (31). С. 53–57.
4. Технологические схемы получения индивидуальных редкоземельных элементов цериевой подгруппы из хлоридных сред экстрагентом на основе P507 / М. А. Афонин, А. С. Сибилев, А. А. Блохин, А. В. Нечаев // *Труды Кольского научного центра РАН. Серия: Технические науки*. 2023. Т. 14, № 2. С. 18–21.
5. Афонин М. А. Описание экстракции азотной, плавиковой и фосфорной кислоты три-н-бутилфосфатом // *Известия СПбГТИ(ТУ)*. 2013. № 20 (46). С. 22–29.
6. Евсеев А. М., Николаева Л. С. *Математическое моделирование химических равновесий*. М.: Изд-во Московского университета, 1988. 192 с.

References

1. Polyakov E. G., Nechaev A. V., Smirnov A. V. *Metallurgiya redkozemel'nykh metallov* [Metallurgy of rare earth metals]. Moscow, Yurait, 2024, 501 p. (In Russ.).
2. Chistyakova T. B., Fedorov V. A., Plonsky V. Yu., Kozlov A. V. Programmnyi kompleks dlya avtomatizatsii tekhnologicheskogo proektirovaniya ekstraktsionnykh kaskadov redkozemel'nykh elementov [Software package for automation of technological design of extraction cascades for rare earth elements]. *Matematicheskie metody v tekhnologiyakh i tekhnike* [Mathematical Methods in Technologies and Engineering], 2024, no. 7, pp. 45–50. (In Russ.).

3. Afonin M. A., Shatov V. V., Sibilev A. S., Smirnov A. V., Krasnikov L. V., Nechaev A. V. Baza dannykh i matematicheskaya model' ekstraktsii RZE tserievoi podgruppy v sisteme $\text{NH}_4\text{NO}_3\text{-HNO}_3\text{-H}_2\text{O-TBP}$ s uchetoм assotsiatsii ekstragenta i dissotsiatsii azotnoi kisloty [Database and mathematical model of extraction of rare earth elements of the cerium subgroup in the $\text{NH}_4\text{NO}_3\text{-HNO}_3\text{-H}_2\text{O-TBP}$ system, taking into account the association of the extractant and the dissociation of nitric acid]. *Trudy Kol'skogo nauchnogo tsentra RAN. Khimiya i materialovedenie. Spetsvypusk* [Proceedings of the Kola Science Centre of the RAS. Chemistry and Materials Science. Special issue], 2015, no. 5 (31), pp. 53–57. (In Russ.).
4. Afonin M. A., Sibilev A. S., Blokhin A. A., Nechaev A. V. Tekhnologicheskie skhemy polucheniya individual'nykh redkozemel'nykh elementov tserievoi podgruppy iz khlordnykh sred ekstragentom na osnove P507 [Technological schemes for obtaining individual rare earth elements of the cerium subgroup from chloride media using an extractant based on P507]. *Trudy Kol'skogo nauchnogo tsentra RAN. Seriya: Tekhnicheskie nauki* [Proceedings of the Kola Science Centre of the RAS. Series: Engineering Sciences], 2023, vol. 14, no. 2, pp. 18–21. (In Russ.).
5. Afonin M. A. Opisanie ekstraktsii azotnoi, plavikovoі i fosfornoі kisloty tri-n-butilfosfatom [Description of the extraction of nitric, hydrofluoric and phosphoric acids with tri-n-butyl phosphate]. *Izvestiya SPbGTI(TU)* [Izvestiya of the Saint Petersburg State Technological Institute (Technical University)], 2013, no. 20 (46), pp. 22–29. (In Russ.).
6. Evseev A. M., Nikolaeva L. S. *Matematicheskoe modelirovaniye khimicheskikh ravnovesiy* [Mathematical modeling of chemical equilibria]. Moscow, Izdatel'stvo Moskovskogo universiteta, 1988, 192 p. (In Russ.).

Информация об авторах

В. А. Федоров — аспирант;

М. А. Афонин — доцент, кандидат химических наук.

Information about the authors

V. A. Fedorov — Postgraduate Student;

M. A. Afonin — Associate Professor, PhD (Chemistry).

Статья поступила в редакцию 24.06.2025; одобрена после рецензирования 15.07.2025; принята к публикации 29.07.2025.
The article was submitted 24.06.2025; approved after reviewing 15.07.2025; accepted for publication 29.07.2025.