

На правах рукописи



Орехов Владимир Александрович

**Моделирование сложного совмещённого
тепломассообменно-химического процесса
(на примере высокотемпературного обжига рудного
фосфатного сырья)**

Специальность: 1.2.2. Математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
кандидата технических наук

Смоленск – 2023

Работа выполнена в филиале федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский университет «МЭИ» в г. Смоленске

Научный руководитель: доктор технических наук, доцент
Бобков Владимир Иванович

Официальные
оппоненты:

Большаков Александр Афанасьевич
доктор технических наук, профессор, федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого», профессор Высшей школы искусственного интеллекта;

Мошев Евгений Рудольфович
доктор технических наук, доцент, федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Пермский национальный исследовательский политехнический университет», заведующий кафедрой оборудования и автоматизации химических производств.

Ведущая организация: федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Тверской государственный технический университет», г. Тверь.

Защита состоится 22 декабря 2023 года в 14.00 на заседании диссертационного совета 24.2.312.08, созданного на базе ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский технологический университет» (420015, г. Казань, ул. К. Маркса, д. 68, зал заседаний Ученого совета, А – 330).

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский технологический университет» и на сайте <https://www.kstu.ru/servlet/contentblob?id=473835>

Автореферат диссертации разослан «___» _____ 2023 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета 24.2.312.08,
доктор экономических наук, доцент



Кудрявцева
Светлана
Сергеевна

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы исследования. Базовой проблемой, решением которой определяется уровень и темпы научно-технического прогресса промышленного производства, является проблема рационального использования сырьевых, топливных и энергетических ресурсов, являющаяся чрезвычайно важной для наиболее энергоёмких отраслей промышленного производства, основанных на теплотехнологии, к числу которых относится термическая подготовка полидисперсного сырья, проводимая, например, для получения жёлтого фосфора электротермическим способом. Решение задач комплексного использования фосфоросодержащего рудного сырья и вовлечение в производство бедных руд сопровождается вариацией качества и свойств рудного сырья, поступающего на предприятия, что в свою очередь приводит к неустойчивой работе промышленных аппаратов. Технологические процессы при переработке полидисперсного сырья носят термически-активируемый характер, и их интенсивность определяется условиями тепло- и массообмена, как в аппаратах в целом, так и в отдельных зёрнах обрабатываемых материалов и зависит от условий реализации совмещенных тепломассообменно-химических процессов (СТМХП), теплофизических и реакционных свойств фосфатного рудного сырья. Вместе с тем прогнозирование пригодности сырья для нужд термической переработки, выбор рациональных схем и режимная адаптация аппаратов, таких как обжиговые конвейерные и агломерационные машины, к периодически изменяющимся свойствам рудного сырья в настоящее время сталкиваются со значительными трудностями. Это связано с устаревшими подходами к моделированию и методам расчёта процессов термической подготовки и переработки, достаточно полно учитывающих специфические особенности и свойства полифракционного дисперсного сырья. Недостаточно исследованы подходы к моделированию наиболее важных технологических свойств сырья, необходимые для создания компьютерных программ для проведения вычислительных экспериментов по тепло- и массопереносу в аппаратах термической обработки сырья, в том числе в горнообогатительной отрасли, при описании процессов термической подготовки фосфорсодержащего сырья. Не отвечают современным требованиям данные по теплофизическим свойствам (ТФС) фосфоритов, недостаточно достоверны и разноречивы данные по кинетике термической декарбонизации, без которых невозможно моделирование и количественный расчёт процессов и аппаратов обжига.

Фосфоросодержащие руды и породы имеют сложный и неоднородный полиминеральный состав. Породообразующие минералы при нагревании претерпевают физико-химические превращения, вступают во взаимозависимые реакции, что приводит к изменениям состава и структуры материалов проявлению тепловых эффектов и, в конечном итоге, сопровождается глубокими изменениями ТФС. Поскольку сложные термически активируемые СТМХП определяются кинетическими закономерностями и зависят от условий нагрева, то и ТФС фосфатного сырья приобретают сложный температурно-временной и температурно-концентрационный характер зависимостей. Это затрудняет моделирование и использование традиционных методов теплофизических исследований. Трудности методического характера возникают и при моделировании и постановке вычислительных экспериментов по изучению кинетики термической подготовки окомкованного и агломерируемого фосфатного рудного сырья, так как исследования отягощаются теплообменными процессами в образцах.

Такое состояние вопроса определило объём и содержание настоящего диссертационного исследования. Это расширение и совершенствование методов и средств моделирования ТФС и кинетических закономерностей гетерогенных процессов, протекающих при термической обработке полифракционного дисперсного сырья на примере фосфорсодержащих руд. Получение новых научно-обоснованных данных по ТФС и кинетике декарбонизации фосфатного рудного сырья по результатам проведенных вычислительных экспериментов. Математическое и компьютерное моделирование процессов термической обработки рудного сырья, разработка цифровизированных методов расчёта СТМХП высокотемпературного обжига с целью повышения его энергоресурсоэффективности.

Степень разработанности темы. Научными исследованиями по моделированию термической подготовки окомкованного и дисперсного полифракционного минерального сырья занимались такие известные российские учёные: академики РАН Мешалкин В.П., Леонтьев Л.И., профессора Абзалов В.М., Бабошин В.М., Базилевич Т.Н., Борисова Л.И., Буткарёв А.П., Гальперина С.Я., Ершов В.А., Карабасов Ю.С., Лифсон М.И., Майзель Г.М., Пашков Н.Ф., Сулименко Е.И., Талхаев М.П., Юсфин Ю.С.; и зарубежные учёные: Fukuyo H., Joseph T.L., Kast W., Krischer O., Miyashita T., Sakamoto N., Tigerschiold M.J. и другие. Существенный вклад в математическое моделирование теплофизических процессов агломерации и обжига окомкованного рудного сырья внесли профессора: Бабушкин Н.М., Боковников Б.А., Большаков А.А., Братчиков С.Г., Буткарев А.П., Валавин В.С., Карабасов Ю.С., Китаев Б.И., Лобанов В.И., Майзель Г.М., Панченко С.В., Шкляр Ф.Р., Юсфин Ю.С., Ярошенко Ю.Г. и другие. Моделированием сложных химико-технологических процессов и информационных систем занимались профессора Богатиков В.Н., Борисов В.В., Дли М.И., Курилин С.П., Матвеев Ю.Н., Мошев Е.Р., Палюх Б.В., Семенов Н.А. По моделированию высокотемпературного обжига рудного сырья выполнено немало научных исследований. Накоплен большой экспериментальный материал по исследованию физико-химических свойств, химико-энерготехнологических процессов, технологических особенностей обжигово-конвейерных аппаратов агломерации, обжига кускового и окомкованного фосфатного рудного сырья. Актуальность темы настоящей диссертационной работы подтверждается соответствием основных разделов исследования стратегии развития химического и нефтехимического комплекса до 2024 года и на период до 2035 года подготовленной с учетом национальных целей и стратегических задач, определенных указами Президента Российской Федерации от 7 мая 2018г. № 204 «О национальных целях и стратегических задачах развития Российской Федерации на период до 2024 года» и от 21 июля 2020г. № 474 «О национальных целях развития Российской Федерации на период до 2030 года».

Цель работы заключается в оценке степени завершенности сложного совмещенного тепломассообменно-химического процесса (СТМХП) на основе математического и компьютерного моделирования, учитывающего влияние взаимозависимых теплофизикохимических свойств полидисперсного сырья и анализе результатов, полученных в вычислительных экспериментах на компьютерной модели с использованием разработанного комплекса компьютерных программ.

Для достижения указанной цели поставлены и решены следующие взаимосвязанные научно-технические задачи:

1. Разработка математической модели СТМХП для количественного описания влияния скорости нагрева образцов полидисперсного сырья на кинетику термического

разложения реагирующих компонентов, для диапазонов температур аппаратов термической обработки на примере обжиговых и агломерационных машин с учетом макрокинетики реакции термической декарбонизации.

2. Разработка математической модели влияния внутреннего теплообмена в реагирующем образце на макрокинетику термически активируемых химических реакций и влияния неизотермичности образцов на точность термоаналитических исследований, проводимых с использованием методов неизотермической кинетики с различными скоростями нагрева на примере реакций декарбонизации образцов фосфоритных руд.

3. Разработка метода численного расчёта теплофизических свойств непрореагировавшего и прореагировавшего образцов и теплофизических свойств газа-теплоносителя, с учётом влияния термических условий на примере обжига рудного фосфатного сырья, расхода и температуры греющего газа-теплоносителя.

4. Разработка математической модели распределения температур газа-теплоносителя и частиц полидисперсного сырья по высоте слоя засыпки в произвольный момент времени, на примере плотного слоя рудного материала, степени превращения в элементарных зёрнах и плотной многослойной массе засыпки.

5. Разработка программного комплекса на основе предложенных математических моделей и численного расчёта.

6. Проведение серии вычислительных экспериментов с использованием разработанной компьютерной модели, направленных на выявление зависимости между скоростью нагрева образцов и эволюцией полей концентрации реагирующих компонентов, скоростей превращения и градиентов температуры для определения временной и температурно-концентрационной области интенсивного протекания СТМХП, характеризующей степень его завершенности.

Объект исследования – СТМХП термической обработки полидисперсного сырья, учитывающий совокупность взаимозависимых термически активируемых химических гетерогенных реакций, изменение химического и структурного состава, температурно-концентрационную зависимость ТФС при нагревании. Примером объекта исследования выступает рудное фосфатное сырьё.

Предмет исследования – влияние теплофизических и химических свойств полидисперсного сырья и их зависимость от температуры, степени превращения эндотермической реакции, концентрации непрореагировавшей и прореагировавшей компоненты, скорости нагрева, концентрации на СТМХП термической обработки полидисперсного сырья.

Соответствие паспорту специальности. В диссертационной работе решены научные задачи, соответствующие следующим пунктам области исследований специальности 1.2.2. Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ: п.4. Разработка новых математических методов и алгоритмов интерпретации натурального эксперимента на основе его математической модели; п.5. Разработка новых математических методов и алгоритмов валидации математических моделей объектов на основе данных натурального эксперимента или на основе анализа математических моделей; п.6. Разработка систем компьютерного и имитационного моделирования, алгоритмов и методов имитационного моделирования на основе анализа математических моделей.

Научная новизна диссертационной работы.

1. Разработана математическая модель СТМХП, отличающаяся учетом влияния скорости нагрева образцов полидисперсного сырья, позволяющая получить

количественное описание кинетики термического разложения реагирующих компонентов в диапазонах температур функционирования аппаратов термической обработки.

2. Разработана математическая модель влияния внутреннего теплообмена в реагирующем образце, *отличающаяся* учетом макрокинетики термически активируемых химических реакций и влияния неизотермичности образцов на точность термоаналитических исследований, проводимых с использованием методов неизотермической кинетики с различными скоростями нагрева полифракционного сырья, *позволяющая* оценить термодинамическую составляющую завершенности СТМХП.

3. Предложен численный метод расчёта теплофизических свойств непрореагировавшего и прореагировавшего образцов и теплофизических свойств газа-теплоносителя, с учётом влияния термических условий на примере обжига рудного фосфатного сырья, расхода и температуры греющего газа-теплоносителя.

4. Разработана математическая модель, *отличающаяся* учётом температур газа теплоносителя и частиц полидисперсного сырья по высоте слоя засыпки в произвольный момент времени и степени превращения в элементарных зёрнах и плотной многослойной массе засыпки, *позволяющая* выявить зависимости между скоростью нагрева образцов и эволюцией полей концентрации реагирующих компонентов, скоростей превращения и градиентов температуры для определения временной и температурно-концентрационной области интенсивного протекания СТМХП, характеризующей степень его завершенности.

5. Предложена архитектура оригинального программного комплекса, *отличающаяся* включением модулей и требуемых функциональных связей, что *позволяет* реализовать предложенные модели, методы и алгоритмы, осуществлять вычислительные эксперименты.

Теоретическая и практическая значимость работы. Разработаны математические модели и комплекс компьютерных программ для расчета и валидации с натурными экспериментами для сложного СТМХП термической подготовки полифракционного сырья на примере рудных фосфоритов. Построены математические модели определения ТФС рудных фосфатных материалов. Проведены вычислительные эксперименты по исследованию температурных зависимостей теплоёмкости и теплопроводности фосфоритов решением инверсной задачи теплопроводности, а также предложен алгоритм обработки данных ТФС фосфоритов. Разработана информационная система паспортизации теплофизических и химико-технологических свойств фосфоритов для повышения эффективности СТМХП при высокотемпературном обжиге.

Методология и методы исследования. При решении поставленных задач использованы методы математического моделирования процессов теплообмена в динамической плотной полидисперсной многослойной массе на примере рудного фосфатного материала с перекрестной подачей газа-теплоносителя, методы конечно-разностного моделирования задачи теплопроводности, осложненной эндотермическими реакциями декарбонизации. Компьютерный анализ данных, математические методы обработки экспериментальных данных, натуральный эксперимент.

Положения, выносимые на защиту.

1. Результаты математического моделирования протекания СТМХП термической подготовки полидисперсного сырья с учетом влияния скорости нагрева образцов на примере композиционного фосфатного материала с реагирующими карбонатными включениями, учитывающего термические деформации фосфатного сырья, позволяющего получить количественное описание кинетики термического разложения реагирующих

компонентов в диапазонах температур функционирования аппаратов термической обработки.

2. Модель температурно-концентрационной и температурно-временной зависимости теплоёмкости рудных фосфоритов от тепловых условий протекания реакции декарбонизации в образцах, при структурных модификациях, в результате изменения химического состава образцов и их валидация.

3. Математическая модель описания ТФС фосфоросодержащих руд методом решения инверсной задачи теплопроводности (ИЗТ). Решение ИЗТ осуществлялось с использованием системы уравнений теплопроводности и кинетического уравнения гетерогенной реакции температурной декарбонизации.

4. Математическая модель, учитывающая температуру газа теплоносителя и частиц полидисперсного сырья по высоте засыпки в произвольный момент времени и степень превращения в элементарных зёрнах и плотной многослойной массе засыпки, позволяющая выявить зависимости между скоростью нагрева образцов и эволюцией полей концентрации реагирующих компонентов, скоростей превращения и градиентов температуры для определения временной и температурно-концентрационной области интенсивного протекания СТМХП, характеризующей степень его завершенности.

5. Алгоритм расчета ТФС по химическому составу фосфоритов, базирующийся на комбинированной модели теплопроводности, учитывающей эндотермическую реакцию термической декарбонизации и коэффициент теплопроводности материала, где удельная теплоемкость рассчитывается по аддитивной модели.

6. Паспорт свойств, позволяющий хранить в электронном виде экспериментальные температурные зависимости коэффициента теплопроводности материала при первом его нагреве и в отожженном состоянии, удельной истинной теплоемкости при первом и втором нагреве, эффективной теплоемкости при первом нагреве, относительного линейного расширения, плотности материала при нагреве. Информационная система, позволяющая осуществлять ввод и хранение данных о химическом составе и теплофизических и технологических свойствах образцов в цифровом виде, производить их поиск и обработку.

Степень достоверности результатов подтверждается многочисленными вычислительными и натурными экспериментами. Представлен анализ предложенной математической модели СТМХП термической подготовки полидисперсного сырья, на примере фосфатных рудных материалов. С использованием разработанной компьютерной модели СТМХП проведена серия вычислительных экспериментов, направленных на выявление зависимости эффективности СТМХП от условий нагрева исходного сырья и степени превращения реагирующих компонентов.

Связь работы с государственными программами научных исследований. В части моделирования СТМХП исследования выполнялись в соответствии с государственным заданием: «Математические модели, методы и информационные технологии обработки мультимодальной информации, её анализа и интеллектуального управления электроэнергетическими, электромеханическими и теплофизическими процессами», проект № FSWF-2023-0012. В части моделирования комплекса ТФС фосфатного рудного сырья при высокотемпературном обжиге исследования проводились при поддержке гранта РНФ научного проекта № 22–11-00335.

Апробация работы. Основные результаты диссертационной работы докладывались на следующих научно-технических конференциях: «Восьмая Российская национальная

конференция по теплообмену» (Москва, 2022); «Тенденции развития логистики и управления цепями поставок. III Международная научно-практическая конференция» (Курск, 2022); «Приоритетные направления развития науки и технологий, XXXI Международная научно-практическая конференция», (Тула, 2022); «Энергетика, информатика, инновации – 2022, XII Международная научно-техническая конференция» (Смоленск, 2022), «Международная научная конференция Математические Методы в Технике и Технологиях ММТТ» (Ярославль, 2022; Нижний Новгород, 2023), «Международная молодежная научная конференция Тинчуринские чтения – 2023 «Энергетика и цифровая трансформация» (Казань, 2023), IV Международная научно-практическая конференция «Тенденции развития логистики и управления цепями поставок» (Казань, 2023), II Всероссийская научно-практическая конференция «Актуальные тренды цифровой трансформации промышленных предприятий» (Казань, 2023).

Результаты исследования используются в проектно-конструкторской деятельности предприятий: ООО «РусЭнергоПроект» и ООО «НИИМАШ», а также в научно-исследовательских разработках и учебном процессе филиала ФГБОУ ВО «Национальный исследовательский университет «МЭИ» в г. Смоленске.

Личный вклад автора. Автор принимал непосредственное участие в построении математических моделей теплового воздействия на полифракционное дисперсное рудное сырье, математическом описании термически активируемых СТМХП, анализе экспериментальных исследований процессов термической обработки дисперсного сырья, автор проводил систематизацию, интерпретацию и оценку полученных результатов, формировал выводы, готовил материалы для публикаций и представления результатов исследований на российских и международных научных мероприятиях.

Публикации. По теме диссертационного исследования опубликовано 35 научных трудов, из них 6 публикаций в журналах из перечня рецензируемых научных изданий, рекомендованных ВАК Минобрнауки России; 15 публикаций в журналах, входящих в международные реферативные базы данных и системы цитирования, 1 патент на изобретение, 2 свидетельства о государственной регистрации программы для ЭВМ.

Объем и структура работы. Диссертационная работа состоит из введения, четырёх глав, заключения, списка литературы из 129 наименований. Общий объем составляет 205 страниц печатного текста, основной текст диссертации – 184 страницы, включая 9 таблиц и 50 рисунков.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обобщается состояние проблемы и обосновывается актуальность темы диссертационной работы. Приведены цель и задачи исследования, научная новизна и практическая значимость работы.

В первой главе представлен анализ современной научно-технической литературы по тематике диссертационной работы. В современных исследованиях актуальными являются сопоставление и валидация результатов компьютерного и математического моделирования процессов, протекающих в различных средах, с данными натуральных экспериментов, позволяющих определить степень достоверности полученных в результате проведенного моделирования результатов.

Предложены методы проведения натуральных экспериментов для исследования теплофизических свойств твердых композиционных материалов, на основе которых возможно проводить валидацию построенных математических моделей, а также описаны теоретические разработки по моделированию теплофизических свойств композиционных материалов.

Во второй главе представлены результаты моделирования кинетики эндотермической гетерогенной реакции на примере диссоциации карбонатов. Структура модели СТМХП представлена на рисунке 1.



При выборе математической модели, описывающей термическое разложение реагирующих компонентов на примере деструкции карбонатов в полифракционном фосфорсодержащем

Рис. 1 – Структурная схема сложного СТМХП термической обработки на примере рудного сырья (построено автором)

рудном сырье предполагались существенными следующие факторы:

- нестационарные температурные условия, сопутствующие сложному СТМХП;
- зависимость теплофизических характеристик материала как от температуры, так и от степени превращения реагирующих компонентов.

При этом делались следующие допущения и предположения:

- диффузия газообразного продукта происходит беспрепятственно и не оказывает влияния на скорость реакции;
- температурная зависимость скорости реакции носит аррениусовский характер.

С учетом основных требований и допущений математическая формулировка задачи в одномерной постановке для образца сферической формы имеет вид:

$$\begin{cases} \rho C_p(T, \alpha_1, \alpha_2) \frac{\partial T}{\partial \tau} = \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda(T, \alpha_1, \alpha_2) x^2 \frac{\partial T}{\partial x} \right) - C_1^0 Q_1 \frac{\partial \alpha_1}{\partial \tau} - C_2^0 Q_2 \frac{\partial \alpha_2}{\partial \tau}; \\ \frac{\partial \alpha_1}{\partial \tau} = k_{01} \exp\left(-\frac{E_1}{R_0 T}\right) (1-\alpha_1)^{2/3}; \\ \frac{\partial \alpha_2}{\partial \tau} = k_{02} \exp\left(-\frac{E_2}{R_0 T}\right) (1-\alpha_2)^{2/3}. \end{cases} \quad (1)$$

где $C_{1,2}^0$ – начальные концентрации реагирующих карбонатов магния и кальция соответственно, $E_{1,2}$ – энергии активации реакций декарбонизации, $k_{01,2}$ – предэкспоненциальные множители, α_1 – степень превращения $MgCO_3$, α_2 – степень превращения $CaCO_3$, $\rho C_p(T, \alpha_1, \alpha_2)$, $\lambda(T, \alpha_1, \alpha_2)$ – удельные теплоёмкость и теплопроводность, зависящие от температуры и степеней превращения реакций декарбонизации.

Система дифференциальных уравнений в частных производных (ДУЧП), решалась при следующих краевых условиях. Начальные условия: $T(x, 0) = T_0$; $\alpha_1(x, 0) = 0$; $\alpha_2(x, 0) = 0$ и граничные условия второго и первого рода:

$$\frac{\partial T(0, \tau)}{\partial x} = 0; \quad T(R, \tau) = T_n(\tau), \quad \text{где: } T(x, \tau) - \text{температура окатыша, зависящая от}$$

координаты по радиусу окатыша – $x \in [0; R]$ и времени – τ , R – радиус окатыша. Решение системы ДУЧП (1) осуществлялось численным методом по неявной конечно-разностной схеме. Исследование взаимоопределяющего характера теплообмена и кинетики гетерогенного превращения в полифракционных дисперсных материалах на примере фосфорсодержащего рудного сырья при высокотемпературном обжиге проводилось с использованием математической модели, учитывающей наиболее существенные явления, а также анализа решений, полученных численными методами с использованием разработанного комплекса компьютерных программ.

Третья глава содержит описание технологии построения моделей температурно-концентрационной зависимости термических деформаций реагирующих материалов на примере фосфоритов при нагреве. Приведенные результаты являются значимыми для развития методов анализа и моделирования процессов обжига фосфоритового сырья в обжиговых машинах конвейерного типа в виде окатышей или в спекаемом слое агломерационной машины. Их применение возможно в алгоритмическом обеспечении систем принятия решений при оптимизации энергопотребления всей энерготехнологической системы производства фосфора.

Для исследований ТФС предложено использовать в условиях, близких по характеру нагрева к натурным, методов моделирования, основанных на ИЗТ.

Экспериментальные данные, необходимые для решения ИЗТ, представляют замеры температур в нескольких точках образца, которые могут быть получены в исследованиях на термовесовой установке, что позволяет одновременно на одном образце исследовать ТФС и получить информацию для определения вида и параметров кинетических уравнений гетерогенной реакции декарбонизации. Такое совместное исследование целесообразно как с точки зрения сокращения объёмов работ, так и получения более достоверной информации.

Для решения ИЗТ использовалась математическая формулировка задачи в одномерной постановке для плоского образца, которая имеет вид:

$$\begin{cases} \rho C_p(T, \alpha) \frac{\partial T}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda(T) \frac{\partial T}{\partial x} \right) - CQ \frac{\partial \alpha}{\partial \tau}; \\ V = \frac{\partial \alpha}{\partial \tau} = k_0 \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) f(\alpha). \end{cases} \quad (2)$$

Влияние на макрокинетику термического разложения реагирующих компонентов, учитывалось распространённой зависимостью: $f(\alpha) = (1 - \alpha)^n$, где n – число, определяемое экспериментально для конкретного фосфатного сырья.

Система уравнений решалась численно при наличии следующих краевых условий: начальные условия:

$$T(x, 0) = T_0; \quad \alpha(x, 0) = 0, \quad (3)$$

граничными условиями первого рода:

$$T(0, \tau) = T_{n1}; \quad T(X, \tau) = T_{n2}, \quad (4)$$

где: T_{n1} , T_{n2} – температуры на поверхностях неограниченной пластины, T_0 – начальная температура пластины. Решение приведенной системы уравнений (2), замыкаемыми граничными условиями (4) осуществлялось по неявной конечно-разностной схеме, на основе разработанной компьютерной модели.

Целью решения ИЗТ являлось определение вида зависимости $\rho C_p(T, \alpha)$ и $\lambda(T)$ при заданных граничных условиях.

В настоящей работе при решении ИЗТ предполагалось, что зависимость объёмной теплоёмкости в системе уравнений (3) от температуры и степени превращения известна. Выбор вида функции $\rho C_p(T, \alpha)$ основывается на свойстве аддитивности теплоёмкости смеси.

Исходными данными для определения ТФС методом ИЗТ являлись результаты температурных измерений в натуральных экспериментах, полученные на термовесовой установке для образцов различных проб, и при исследовании кинетики термической декарбонизации.

Расчет теплоемкости фосфоритов в зоне температур реакций декарбонизации можно проводить полагая, что доля прореагировавшего компонента пропорциональна степени превращения (декарбонизации) η :

$$\rho C_p(T, \eta_i) = \rho C_{p0}(T) + [\rho C_{p0}(T) - \rho C_{pR}(T)] \cdot [1 - \eta_i], \quad (5)$$

где ρC_{pR} , ρC_{p0} – теплоемкости обожженного и исходного фосфорита.

Теплоемкость исходного фосфорита в зоне реагирования определялась экстраполяцией экспериментальных значений.

Объемная доля непрореагировавшего карбоната v_{c0} может быть выражена через степень декарбонизации η :

$$v_{c0} = [1 + (\eta/(1 - \eta))(\rho_0/\rho_R)]^{-1}, \quad (6)$$

где ρ_0 , ρ_R – плотности исходного и обожженного материала. При этом масса реагирующего материала будет представлять собой матричную структуру изолированных включений непрореагировавшего материала в цементе, состоящем из продуктов реакции.

Используя температурно-временную зависимость истинной теплоемкости, можно определить также эффективную теплоемкость реагирующего материала, если известна скорость нагрева образца. Удельный тепловой поток, подводимый к реагирующему образцу, идет на нагрев материала и эндотермическую химическую реакцию декарбонизации.

Аппроксимация по МНК экспериментов по определению удельной теплоёмкости фосфатной компоненты, позволила получить температурную зависимость вида: $C_p = 0.788 + 0.61 \cdot 10^{-3} T - 0.25 \cdot 10^{-6} T^2$. Удельная теплоёмкость карбонатной составляющей, состоящей в основном из доломита определена до температур начала реакции декарбонизации и отличается при $T=900$ К на 9%, и может быть аппроксимирована МНК выражением $C_p = 0.41 + 1.55 \cdot 10^{-2} T - 0.4 \cdot 10^{-6} T^2$.

Модель реагирующего зерна может быть представлена исходным непрореагировавшим материалом (доломитом), заключенным в оболочку продуктов реакции - порошкообразную смесь окислов CaO и MgO или ортосиликатов кальция и

магния в кремнисто-карбонатных рудах. Объемное соотношение этих двух фаз будет изменяться в процессе декарбонизации и определяться степенью превращения фосфорита:

$m_c = \left(1 + \alpha(1 - \alpha)^{-1} \rho_c \rho_{об}^{-1}\right)^{-1}$. При этом масса реагирующего материала будет представлять собой матричную структуру изолированных включений непрореагировавшего материала в цементе, состоящем из продуктов реакции. Теплопроводность такой системы можно определить по известному соотношению:

$$\lambda/\lambda_{об} = 1 - m_c / \left(1/(1 - v) - (1 - m_c)/3\right), \quad v = \lambda_c/\lambda_{об}, \quad (7)$$

где λ – коэффициент теплопроводности системы; $\lambda_{об}$ – коэффициент теплопроводности обожженного материала (цемента); λ_c – коэффициент теплопроводности сырого материала (включений).

Используя метод расчета многокомпонентной системы путем последовательного сведения к двухкомпонентной, можно рассчитать коэффициент теплопроводности композиционного материала с реагирующими включениями.

Для подтверждения предложенных методик расчета теплопроводности карбонатно-фосфатных руд было проведено сопоставление расчетов с экспериментом. На рисунке 2 приведены экспериментальные значения коэффициента теплопроводности высококачественного фосфорита и расчет по структурной модели (8) для трехкомпонентной смеси с замкнутыми включениями:

$$\lambda = \lambda_1 \left(\frac{m_2}{1 - m_1} \left[1 - \frac{1 - m_1}{(1 - v_{12})^{-1} - m_1/3} \right] + \frac{m_3}{1 - m_1} \left[1 - \frac{1 - m_1}{(1 - v_{13})^{-1} - m_1/3} \right] \right) \quad (8)$$

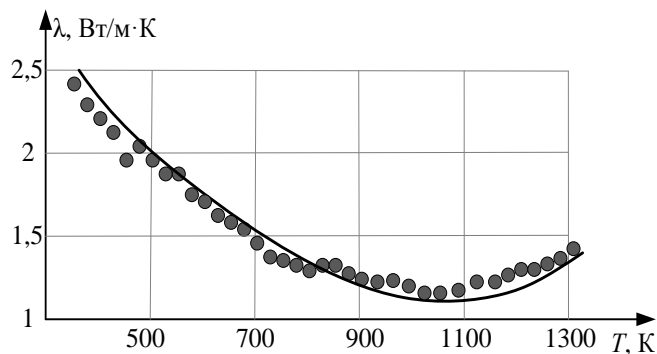


Рис. 2 – Сопоставление расчета с натурным экспериментом для теплопроводности высококачественного фосфорита (построено автором)

Для высококачественных фосфоритов погрешность описания теплопроводности не более 6–8%. Предложенные в работе методы исследования теплопроводности могут быть распространены на изучение закономерностей широкого класса композиционных реагирующих материалов. Разработанные методы расчета теплопроводности фосфоритов могут быть использованы для оперативной адаптации промышленных установок обжига и руднотермических печей к свойствам обрабатываемых материалов существующих и новых месторождений.

Описание теплофизических свойств фосфоритов при высокотемпературном нагреве требует дальнейшего развития, как математических моделей, так и информационных структур, вследствие изменения структуры реагирующего материала и иерархии компонент в результате реакции декарбонизации доломита при нагреве.

Для удобства проведения расчетов разработан алгоритм программы расчета теплофизических свойств по химическому составу фосфоритов, включающий: ввод химического состава, расчет минерального состава, расчет массовых и объемных долей,

цикл по i , для расчета теплоемкостей при заданной температуре T , обращение к подпрограмме «Интерполяция», расчет теплоемкости фосфорита, расчет теплопроводности составляющих при заданной температуре T , выбор модели по анализу структуры, расчет теплопроводности материала, представлен на рисунке 3.

Предлагаемая методика, использующая комбинированную модель теплопроводности, учитывающая реакции декарбонизации и разработанный алгоритм встраиваются в разработанную информационную систему. С использованием разработанной методики проведено комплексное исследование температурных зависимостей теплопроводности и теплоемкости всех основных типов литологических разновидностей фосфатных руд.

Для реализации паспорта свойств разработана информационная система, позволяющая осуществлять ввод и хранение данных о химическом составе и теплофизических и технологических свойствах образцов в цифровом виде, производить их поиск и обработку.

В рамках предлагаемой информационной системы, разработаны базы данных и составлены паспорта теплофизических и технологических свойств ряда фосфоритов, необходимых для теплотехнических расчетов термически активируемых СТМХП и аппаратов обогащения фосфоритовой руды. Применение информационной системы для обобщения и анализа экспериментальных данных показывает, что можно выделить основные типы мономинерального сырья с определенным набором технологических свойств, которые могут быть приняты в качестве основных компонент в структурной модели технологических свойств.

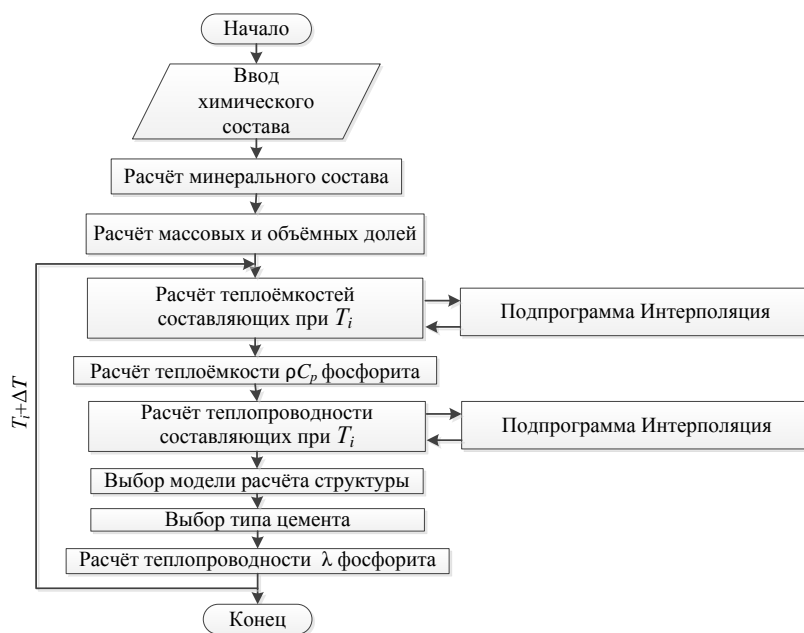


Рис. 3 – Блок схема алгоритма расчета теплофизических свойств по структурной модели (предложено автором)

В информационной системе реализован многодокументальный интерфейс, позволяющий оперативно переключаться между различными режимами работы с данными с использованием меню «Окно» и панели кнопок управления окнами. Для реализации этих режимов используются формы, выполняемые на сервере баз данных.

Для ввода и редактирования информации об исследованных образцах используется форма, показанная на рис. 4.

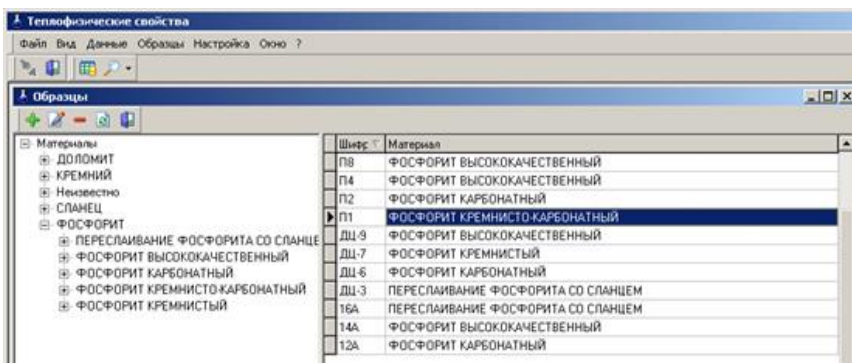


Рис. 4 – Общая форма структуры для ввода и редактирования информации об исследованных образцах (предложено автором)

Для поиска вводятся концентрации учитываемых компонентов в процентах. Режим просмотра с использованием формы ввода и редактирования информации об образце представлен на рис.5.

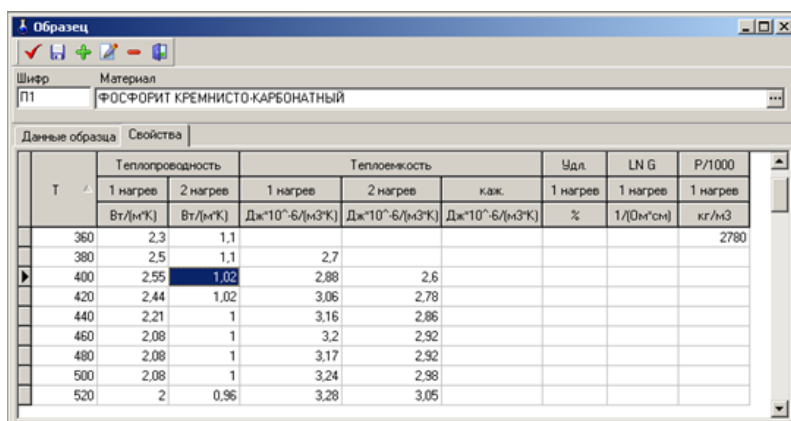


Рис.5 – Форма для ввода и редактирования информации о свойствах образца (предложено автором)

Установлено, что теплопроводности сырьевых фосфоритовых материалов существенно различны, и определяются структурой и минералогическим составом пород.

В четвертой главе предложены математические и компьютерные модели СТМХП термической подготовки реагирующих материалов на примере рудных фосфатных материалов в плотном слое, а также теоретические особенности их построения на основе технологии проведения натуральных экспериментов.

Объектом исследования выступал движущийся на конвейере обжиговой или агломерационной машины плотный слой кускового или окомкованного фосфоросодержащего рудного сырья, с перекрёстной подачей газа теплоносителя. Основными геометрическими характеристиками неподвижного плотного слоя кускового и окомкованного фосфоросодержащего рудного сырья являются его порозность и удельная поверхность. Эти усреднённые параметры зависят от способа укладки слоя, гранулометрического состава, габаритов слоя. В качестве характерного геометрического размера принимают средний размер элементов слоя. Движение газа-теплоносителя в слое подчиняется уравнению Навье-Стокса. Динамическая вязкость газа-теплоносителя, как

Рабочее место информационной системы предусматривает возможность поиска образцов и их теплофизических и технологических свойств. Для поиска рабочее место использует хранимые процедуры, выполняемые на сервере баз данных.

С использованием разработанной информационной системы проведено комплексное исследование температурных зависимостей теплопроводности и теплоемкости всех основных типов литологических разностей фосфатных руд.

смеси газообразных продуктов сгорания топлива с воздухом, рассчитывается по формуле Хеннинга Целперера: $\mu_{см} = \sum x_i \mu_i \sqrt{M_i T_{кри}} / \sum x_i \sqrt{M_i T_{кри}}$, где: x_i - молярная доля, μ_i - вязкость, M_i - молекулярная масса, $T_{кри}$ - критическая температура i - компонента. Изменение динамической вязкости от температуры рассчитывается по формуле Улыбина: $\mu_{см, t} = \mu_{см}^0 (T/T_0)^{\sum x_i m_i}$, где $\sum x_i m_i = \sum x_i A_i + \left(\sum x_i B_i \right) \cdot t \cdot 10^{-4} + \left(\sum x_i C_i \right) \cdot t^2 \cdot 10^{-7}$.

Для проведения вычислительных экспериментов исследования СТМХП обжига была предложена следующая физическая модель. Реальный плотный слой рудного сырья толщиной H заменён системой плоских горизонтальных ячеек в количестве k , имеющих толщину ΔY . В состав ячейки входят пластины толщиной $2X$ в количестве m , представляющие собой модель зёрен реагирующего слоя. Количество пластин в ячейке определяется порозностью ε , моделируемого слоя: $m = \frac{\Delta Y}{2X} (1 - \varepsilon)$, а толщина пластин $2X$ задаётся как размер зёрен реального слоя рудного сырья на конвейере обжиговой машины.

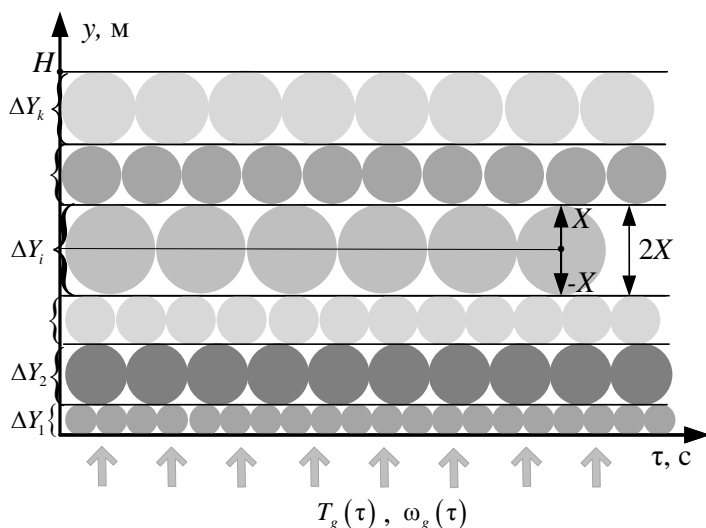


Рис. 6 – Структура математической модели плотной полидисперсной многослойной массы сырья в аппарате термической подготовки (разработана автором)

Предполагается, что размеры элементарных ячеек и пластин могут задаваться различными по высоте слоя. Теплообмен между пластинами ячейки и перекрёстно подаваемым газом-теплоносителем осуществляется с использованием граничных условий третьего рода. Предполагается также, что в пределах элементарной ячейки температура газа-теплоносителя остаётся постоянной и изменяется только по высоте плотного слоя, то есть при переходе от предыдущей ячейки к последующей. Перенос тепла в результате теплопроводности слоя считается пренебрежимо малым.

Принятая физическая модель слоя, с учётом допущений, позволяет использовать для решения внутренних задач теплообмена и кинетики СТМХП декарбонирующего обжига элементарного рудного зерна математическую модель вида (9).

При построении математической модели, описывающей процесс превращения реагирующих компонентов, учитывались существенные факторы, аналогичные модели (1).

$$\begin{cases} \rho C_p(T, \alpha_1, \alpha_2) \frac{\partial T}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda(T, \alpha_1, \alpha_2) \frac{\partial T}{\partial x} \right) - C_1^0 Q_1^0 \frac{\partial \alpha_1}{\partial \tau} - C_2^0 Q_2^0 \frac{\partial \alpha_2}{\partial \tau}; \\ \frac{\partial \alpha_1}{\partial \tau} = k_{01} \exp\left(-\frac{E_1}{RT}\right) f_1(\alpha_1); \\ \frac{\partial \alpha_2}{\partial \tau} = k_{02} \exp\left(-\frac{E_2}{RT}\right) f_2(\alpha_2). \end{cases} \quad (9)$$

где $\rho C_p(T, \alpha_1, \alpha_2)$, $\lambda(T, \alpha_1, \alpha_2)$ – теплофизические свойства, удельные теплоёмкость и теплопроводность.

Система уравнений решалась численно при наличии следующих краевых условий: начальные условия:

$$T(x, 0) = T_0; \quad \alpha_1(x, 0) = 0; \quad \alpha_2(x, 0) = 0 \quad (10)$$

граничные условия первого рода:

$$T(X, \tau) = T_1(\tau); \quad T(-X, \tau) = T_2(\tau), \quad (11)$$

где T_1 , T_2 – температуры на поверхностях неограниченной пластины. Решение приведенной системы уравнений осуществлялось численными методами с использованием неявной конечно-разностной схемы.

$$\lambda(T) \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)_{x=X} = K_F (T_\Gamma - T)_{x=X}, \quad \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)_{x=0} = 0 \quad (12)$$

В настоящей работе предполагается известной зависимость объёмной теплоёмкости от температуры и степеней превращения, она имеет вид:

$$\rho C_p(T, \alpha_1, \alpha_2) = \rho C_p(T)^o + \left[\rho C_p(T)^c - \rho C_p(T)^o \right] (1 - \alpha_\Sigma) \quad (13)$$

Выбор линейного вида функции (13) основывается на свойстве аддитивности теплоёмкости смеси. Условия нагрева плотного слоя рудного фосфатного сырья в обжиговой машине могут быть воспроизведены заданием переменных во времени температур газа-теплоносителя на входе в слой $(T_g)_{y=0} = T_\Gamma(\tau)$ и скорости газа-теплоносителя на полное сечение аппарата $\omega_g = \omega_g(\tau)$. Для расчёта распределения температуры газа-теплоносителя по высоте слоя использовалась зависимость:

$$\omega_g(\tau) \rho_g(T) C_{pg}(T) \frac{dT_g}{dy} = Q, \quad (14)$$

где Q – количество теплоты, определяется из решения внутренней задачи теплообмена пластины, толщиной $2X$: $Q = \int_0^{2X} \left(\rho C_p(T) \frac{dT}{dt} + Q_1^0 C_1^0 \frac{\partial \alpha_1}{\partial \tau} + Q_2^0 C_2^0 \frac{\partial \alpha_2}{\partial \tau} \right) dx$. В конечных разностях уравнение (14) имеет вид:

$$\omega_g(\tau) \rho_g(T) C_{pg}(T) \frac{(T_{g_i} - T_{g_{i-1}})}{\Delta Y_i} = Q_i, \quad (15)$$

где Q_i определяется с учётом принятой физической модели

$$Q_i = \frac{\Delta Y_i}{2X} (1 - \varepsilon) \int_0^{2X} \left(\rho C_p(T) \frac{dT}{d\tau} + Q_1^0 C_1^0 \frac{\partial \alpha_1}{\partial \tau} + Q_2^0 C_2^0 \frac{\partial \alpha_2}{\partial \tau} \right) dx.$$

Выражение (15) используется для определения температур газа-теплоносителя в слое: $T_{g_i} = T_{g_{i-1}} + [Q_i \Delta Y_i] / [\omega_g(\tau) \rho_g(T) C_{pg}(T)]$. Для проведения вычислительных экспериментов по полученной математической модели, была разработана компьютерная модель, исходными данными для которой являются:

- параметры физической модели: $\Delta Y_i = f_1(y)$, $2X_i = f_2(y)$, высота слоя H , порозность слоя, поправочный множитель, учитывающий эффективную поверхность реального плотного слоя рудного сырья;
- температурные зависимости теплофизических свойств сырого и обожжённого рудного материала, ТФС газа-теплоносителя;
- параметры кинетических уравнений – энергии активации, предэкспоненты, показатели степеней реакций диссоциации карбонатов и процесса сушки, концентрации реагирующих компонентов и влаги;
- условия обжига рудных материалов – зависимости расхода и температуры греющих газов от времени.

Для анализа использовался условный режим обжига, где параметром являлась температурная зависимость коэффициента теплопроводности.

В первом варианте (*a*) задавалась линейная температурная зависимость следующего вида: $\lambda_a = 5 - 3.2 \cdot 10^{-3} T$, Вт/(м·К).

Во втором варианте (*b*) задавалась температурная зависимость, в которой значение λ_b составляло 0.7 от первого, во всём диапазоне температур: $\lambda_b = 0.7 \cdot (5 - 3.2 \cdot 10^{-3} T)$, Вт/(м·К).

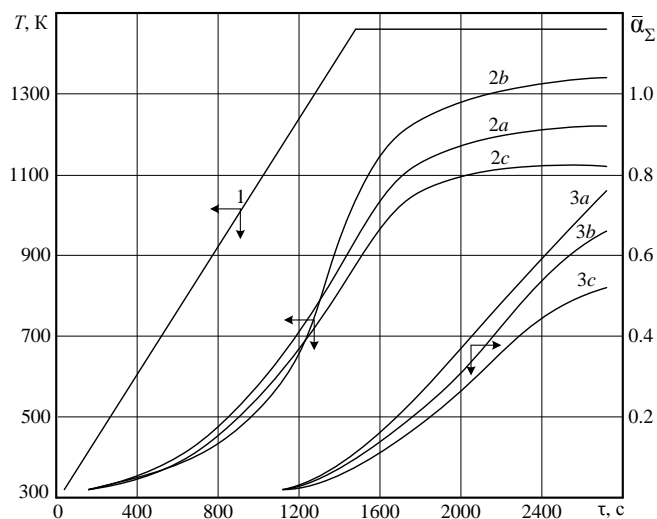


Рис. 7 – Влияние коэффициента теплопроводности на термическую подготовку рудного сырья: 1 – температура газа-теплоносителя на входе в слой, 2 – температура отходящих газов, 3 – средняя по слою степень декарбонизации (рассчитано автором)

На рисунке 7 приведены: температура газа-теплоносителя на входе в плотный слой заданная в вычислительном эксперименте, результаты расчётов температур газа-теплоносителя на выходе из слоя – кривые 2a, 2b, 2c и средних по слою степеней декарбонизации – 3a, 3b, 3c, соответствующие вариантам расчётов.

В третьем варианте (с) коэффициент теплопроводности задавался постоянным, не зависящим от температуры, численно равным среднему значению λ_a в рабочем диапазоне температур 300÷1475 К: $\lambda_c = 2.2$, Вт/(м·К).

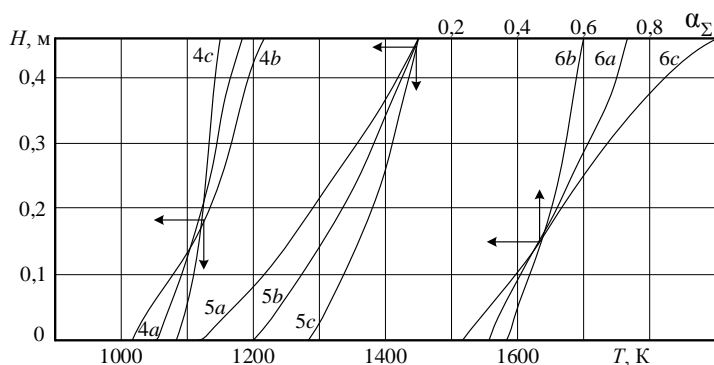


Рис. 8 – Распределение температур подготавливаемого материала, газа-теплоносителя и степень декарбонизации по высоте слоя в течение времени $\tau=2200$ секунд от начала процесса обжига: 4 – средняя по объёму зерна температура материала, 5 – температура газа теплоносителя, 6 – степень превращения. (рассчитано автором)

Методика численного поиска и разработанная компьютерная модель могут использоваться для оперативной режимной адаптации промышленных установок обжига к теплофизическим, реакционным и прочностным свойствам рудного фосфатного сырья.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Разработана математическая модель СТМХП для количественного описания влияния скорости нагрева образцов полидисперсного сырья на кинетику термического разложения реагирующих компонентов, для диапазонов температур аппаратов термической обработки на примере обжиговых и агломерационных машин с учетом макрокинетики реакции термической декарбонизации.

2. Разработана математическая модель влияния внутреннего теплообмена в реагирующем образце на макрокинетику термически активируемых химических реакций и влияния неизотермичности образцов на точность термоаналитических исследований, проводимых с использованием методов неизотермической кинетики с различными скоростями нагрева на примере реакций декарбонизации образцов фосфоритных руд.

3. Разработан метод для численного расчёта теплофизических свойств непрореагировавшего и прореагировавшего образцов и теплофизических свойств газа-теплоносителя, с учётом влияния термических условий на примере обжига рудного фосфатного сырья, расхода и температуры греющего газа-теплоносителя.

4. Разработана математическая модель распределения температур газа-теплоносителя и частиц полидисперсного сырья по высоте плотной многослойной массы в произвольный момент времени, с учётом степени превращения в эндотермической реакции на примере декарбонизации рудного фосфатного сырья при высокотемпературном обжиге.

5. Разработан программный комплекс на основе предложенных математических моделей и численного метода расчёта теплофизических свойств непрореагировавшего и прореагировавшего образцов и теплофизических свойств газа-

теплоносителя, с учётом влияния термических условий обжига рудного фосфатного сырья.

6. Проведена серия вычислительных экспериментов с использованием разработанной компьютерной модели, направленных на выявление зависимости между скоростью нагрева образцов и эволюцией полей концентрации реагирующих компонентов, скоростей превращения и градиентов температуры для определения временной и температурно-концентрационной области интенсивного протекания СТМХП, характеризующей степень его завершенности.

7. Качественное и количественное совпадение опытных и расчётных значений ТФС полифракционных дисперсных материалов можно считать вполне удовлетворительным во всем диапазоне изменения температурных параметров, что свидетельствует о корректности построенных математических моделей.

8. Предложенные в работе методы исследования и описания процессов нагрева полифракционных дисперсных материалов могут быть распространены на изучение закономерностей широкого класса композиционных реагирующих материалов. Разработанные методы расчета теплопроводности могут быть использованы для оперативной адаптации промышленных установок сушки в различных отраслях народного хозяйства, аппаратов обжига рудного сырья, рудотермических печей.

9. Модульность представленных в работе математических моделей позволяет применять их для описания процессов термической обработки широкого класса полифракционных дисперсных материалов в химической, металлургической и горнообогатительной индустрии, машиностроении и пищевой промышленности.

Рекомендуется совершенствовать и расширить методы и средства моделирования теплофизических свойств и кинетических закономерностей термически-активируемых гетерогенных процессов, протекающих при термической обработке рудного фосфорсодержащего сырья.

Перспективы развития темы заключаются в разработке гибридной нечеткой дифференциально-продукционной модели СТМХП термической обработки полидисперсного рудного сырья, отличающейся использованием системы дифференциальных уравнений теплопроводности и скорости реакции декарбонизации с нечеткими параметрами, представляющими собой интервальные значения теплофизических свойств рудного сырья и вычислительных операций уменьшения накопления ошибок применяемых конечно-разностных методов, а также заменой аппроксимирующей многомерной конечно-разностной системы уравнений совокупностью специальных нечетких продукционных правил, описывающих сложную зависимость скорости гетерогенной реакции от нечётких теплофизических и тепломассообменных параметров СТМХП, что позволит осуществлять быстродействующий расчёт энергоресурсоэффективного режима термической обработки широкого класса полифракционных дисперсных материалов.

СПИСОК РАБОТ, ОПУБЛИКОВАННЫХ АВТОРОМ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

Публикации в журналах, входящих в перечень ведущих рецензируемых научных журналов и изданий, рекомендованных ВАК Министерства науки и высшего образования Российской Федерации:

1. Орехов В. А., Бобков В. И., Длин М. И. Исследование конструктивных и технологических параметров барабанной сушилки для сушки фосфогипса газовой и

дисперсной фазой // Известия Санкт-Петербургского государственного технологического института (технического университета). 2023. № 65(91). С. 105-111.

2. Орехов В. А. Математическое моделирование процессов образования шлама в рудно-термических печах при переработке фосфатного рудного сырья // Современные наукоемкие технологии. 2023. № 7. С. 78–86.

3. Орехов В. А., Бобков В. И., Дли М. И. Исследование теплофизических характеристик фосфоросодержащих руд и пород решением инверсной задачи теплопроводности // Вестник Технологического университета. 2022. Т. 25. № 10. С. 95–100.

4. Панченко С. В., Орехов В. А., Бобков В.И. Разработка информационной системы расчета, накопления информации и паспортизации теплофизических свойств фосфоритов // Программные продукты и системы. 2022. № 3. С. 502–508.

5. Бобков В. И., Орехов В. А. Особенности методики определения теплофизических свойств фосфоритового агломерата // Современные наукоемкие технологии. 2022. № 10–1. С. 59–63.

6. Орехов В. А., Бобков В. И., Дли М. И. Анализ температурно-концентрационной зависимости термических деформаций фосфоритов при нагреве // Известия Санкт-Петербургского государственного технологического института (технического университета). 2022. № 62 (88). С. 95–99.

Публикации в журналах, входящих в международные реферативные базы данных и системы цитирования:

7. Мешалкин В. П., Орехов В. А., Дли М. И., Бобков В. И. Исследование влияния коэффициента теплопроводности фосфатного рудного сырья на эффективность химико-энерготехнологического процесса обжига в динамической плотной многослойной массе // Теоретические основы химической технологии. 2023. Т. 57. № 3. С. 266–272 [Meshalkin V. P., Orekhov V. A., Bobkov V. I., Dli M. I. A Study of the Influence of the Thermal Conductivity Coefficient of Phosphate Ore Raw Materials on the Efficiency of the Chemical–Power Technological Process of Roasting in a Dynamic Dense Multilayered Mass // Theoretical Foundations of Chemical Engineering. 2023. Vol. 57. No. 3. Pp. 248–254].

8. Мешалкин В. П., Орехов В. А., Дли М. И., Бобков В. И., Чистякова Т. Б. Методика расчёта предельных и оптимальных режимов химико-энерготехнологического процесса прокаливания кускового и окомкованного рудного фосфатного сырья на колосниковой решётке обжиговой конвейерной машины // Теоретические основы химической технологии. 2023. Т. 57. №4. С. 379-388 [Meshalkin V. P., Orekhov V. A., Dli M. I., Bobkov V. I., Chistyakova T. B. Method to Calculate the Limiting and Optimal Conditions of the Chemical and Energy Engineering Process of Calcination of Lump and Pelletized Phosphate Ore Raw Materials on the Grate of a Traveling-Grate Roasting Machine // Theoretical Foundations of Chemical Engineering. 2023. Vol. 57. No. 4. Pp. 450–458].

9. Мешалкин В. П., Орехов В. А., Быков А. А., Бобков В. И., Шинкевич А. И. Теория гетерогенной реакции твердое–жидкость с появлением газовой фазы // Теоретические основы химической технологии. 2023 Т. 57. № 5. С. 545–552.

10. Орехов В. А., Бобков В. И. Анализ теплофизических свойств мультикомпонентных печных газов в энерготехнологических системах термической подготовки и переработки фосфатного рудного сырья // Энергобезопасность и энергосбережение. 2023. № 2. С. 50 – 54.

11. Орехов В. А., Бобков В. И. Влияние условий внутреннего теплообмена на процесс термического разложения карбонатов в фосфорсодержащем сырье // Тепловые процессы в технике. 2023. Т. 15. № 4. С. 167–173.

12. Орехов В. А. Цифровизированное многомасштабное моделирование тепло-технологических рудовосстановительных процессов в электротермической фосфорной печи // Энергобезопасность и энергосбережение. 2023. № 4. С. 31-35

13. Мешалкин В. П., Бобков В. И., Дли М. И., Орехов В. А., Чистякова Т. Б. Алгоритм обработки данных по теплофизическим свойствам фосфоритов методом решения обратной коэффициентной задачи теплопроводности // Теоретические основы химической технологии. 2023. Т. 57. № 1. С. 16–21. [Meshalkin V. P., Bobkov V. I., Dli M. I., Orekhov V. A., Chistyakova

T. B. Algorithm for Processing Data on the Thermophysical Properties of Phosphorites by Solving the Inverse-Coefficient Heat-Conduction Problem // Theoretical Foundations of Chemical Engineering. 2023. Vol. 57. No. 1. Pp. 14–19].

14. Meshalkin V. P., Bobkov V. I., Dli M. I., Garabadzhiu A. V., Panchenko S. V., Orekhov V. A. Experimental Studies of the Physicochemical Process of Heating Ore Phosphorites // Russian Journal of General Chemistry. 2023. Vol.93. No.3. Pp. 2–9.

15. Orekhov V., Bobkov V., Volkova I. Analysis of thermal impact factors on a pelletized ore raw material in a conveyor roasting machine // AIP Conference Proceedings. 2023. Vol. 2999 (1). #020038.

16. Orekhov V., Bobkov V., Morgunova E. Features of the method for solving the inverse problem for determining the heat capacity and thermal conductivity of phosphate ore raw materials // AIP Conference Proceedings. 2023. Vol. 2999 (1). #020055.

17. Vereykina E. K., Orekhov V. A. Study of thermal deformations in iron ore raw materials at high temperature roasting // AIP Conference Proceedings. 2023. Vol. 2999 (1). #020050.

18. Мешалкин В. П., Бобков В. И., Дли М. И., Гарабаджиу А. В., Панченко С. В., Орехов В. А. Экспериментальные исследования физико-химического процесса нагревания рудных фосфоритов // Российский химический журнал. 2022. Т. 66. № 3. С. 13–22.

19. Бобков В. И., Орехов В. А. Экспериментальная методика исследования кинетики термической декарбонизации при наличии градиентов температур в исследуемых образцах // Тепловые процессы в технике. 2022. Т. 14. № 6. С. 261–267.

20. Орехов В. А., Бобков В. И. Особенности исследования термической деструкции карбонатов в окомкованных фосфоритах при высокотемпературном обжиге // Тепловые процессы в технике. 2022. Т. 14. № 12. С. 555–562.

21. Мешалкин В. П., Бобков В. И., Дли М. И., Орехов В. А., Гарабаджиу А.В. Исследование теплопроводности композиционного рудного фосфатного материала с реагирующими включениями карбонатов // Теоретические основы химической технологии. 2022. Т. 56. № 6. С. 678–685. [Meshalkin V. P., Bobkov V. I., Dli M. I., Orekhov V. A., Garabadzhiu A. V. Heat Conductivity of a Composite Phosphate Ore Material with Reacting Carbonate Inclusions // Theoretical Foundations of Chemical Engineering. 2022. Vol. 56. No. 6. Pp. 971–977].

Патент на изобретение:

22. Орехов В. А., Астахов С. П., Бобков В. И. Автоматическая термовесовая установка для исследования кинетики сушки железорудных окатышей // Патент на изобретение, рег. № 2797195 от 31.05.2023. – М.: Роспатент, 2023.

Свидетельства о государственной регистрации программы ЭВМ:

23. Орехов В. А., Шорохов А. А., Бобков В. И., Кириллова Е. В. Программа идентификации целевых веществ для переносных обнаружителей хроматографического типа. №2023680936 от 6 октября 2023г.

24. Орехов В. А., Черновалова М. В., Соколов А. М., Дли М. И. Программа поддержки принятия решений по управлению теплофизическими процессами с использованием процедур нечёткого логического вывода. №2023680937 от 6 октября 2023г.

Публикации в других научных изданиях и сборниках конференций:

25. Орехов В. А. Моделирование экспериментальной установки по измерению коэффициентов тепло- и массоотдачи при сушке пастообразного фосфогипса горячим агломерационным возвратом // Сборник материалов международной молодежной научной конференции «Тинчуринские чтения – 2023: Энергетика и цифровая трансформация». – Казань, 2023. Т.2. С. 325–329.

26. Орехов В. А., Бобков В. И., Дли М. И. Технологические и конструктивные особенности химико-энерготехнологического процесса сушки фосфогипса газовой и дисперсной средой // Математические методы в технологиях и технике. 2023. № 1. С. 17–20.

27. Орехов В. А., Бобков В. И. Анализ геометрических характеристик полифракционного плотного слоя рудных материалов // В сборнике материалов XII международной научно-технической конференции «Энергетика, информатика, инновации – 2022 (электроэнергетика,

электротехника и теплоэнергетика, математическое моделирование и информационные технологии в производстве)». – филиал ФГБОУ ВО «НИУ «МЭИ» в г. Смоленске. Смоленск, 2022. С. 204–207.

28. Орехов В. А., Бобков В. И. Особенности энергетической эффективности отражательной плавки окомкованного фосфатного сырья // В сборнике XXXI Международной научно-практической конференции «Приоритетные направления развития науки и технологий». – Москва, 2022. С. 211–213.

29. Орехов В. А., Бобков В. И. Особенности кинетики термической декарбонизации фосфоритов при обжиге // В сборнике материалов Восьмой Российской национальной конференции по теплообмену. В 2-х томах. – Москва, 2022. С. 234–235.

30. Орехов В. А., Бобков В. И. Исследование электропроводности фосфоросодержащего рудного сырья при термической обработке // В сборнике V Всероссийской научно-практической конференции «Научный потенциал молодежи и технический прогресс». – Санкт-Петербург, 2022. С. 45–46.

31. Орехов В. А., Бобков В. И. Информационная система паспортизации теплофизических и химико-технологических свойств фосфоритов в цепях поставок рудного сырья // В сборнике материалов III Международной научно-практической конференции «Тенденции развития логистики и управления цепями поставок». – Курск, 2022. С. 109–114.

32. Орехов В. А., Бобков В. И., Дли М. И. Обобщение исследований термических деформаций фосфоритов при обжиге // Математические методы в технологиях и технике. 2022. № 3. С. 21–24.

33. Орехов В. А., Бобков В. И., Дли М. И. Определение температурной зависимости теплоёмкости и теплопроводности фосфоритов решением инверсной задачи теплопроводности // Математические методы в технологиях и технике. 2022. № 10. С. 7–10.

34. Бобков В. И., Орехов В. А. Особенности проведения экспериментального обследования температурного режима функционирования обжиговой конвейерной машины // Успехи современного естествознания. 2022. № 10. С. 100–105.

35. Бобков В. И., Орехов В. А. Исследование аэродинамики полифракционного плотного слоя рудного сырья // Успехи современного естествознания. 2022. № 9. С. 67–72.