

*В диссертационный совет
24.2.312.08,
созданный на базе ФГБОУ ВО
«Казанский национальный
исследовательский
технологический университет»*

ОТЗЫВ

официального оппонента, доктора технических наук, профессора, профессора
Высшей школы технологий искусственного интеллекта Института компьютерных
наук и кибербезопасности Федерального государственного автономного
образовательного учреждения высшего образования
«Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого»
Большакова Александра Афанасьевича
на диссертационную работу Орехова Владимира Александровича
«Моделирование сложного совмещённого тепломассообменно-химического
процесса (на примере высокотемпературного обжига рудного фосфатного сырья)»
по специальности 1.2.2. Математическое моделирование, численные методы
и комплексы программ

1. Актуальность диссертационного исследования

Технологические процессы при переработке полидисперсного сырья имеют термически-активируемый характер, их интенсивность определяется условиями тепло- и массообмена, зависит от условий реализации совмещённых тепломассообменно-химических процессов (СТМХП), теплофизических и реакционных свойств фосфатного рудного сырья. Требуется разработка новых подходов к моделированию наиболее важных технологических свойств сырья, программ для проведения вычислительных экспериментов по тепло- и массопереносу в аппаратах термической обработки сырья, в т.ч. в горнообогатительной отрасли, при описании процессов термической подготовки фосфорсодержащего сырья. Не отвечают современным требованиям данные по теплофизическим свойствам.

Фосфорсодержащие руды и породы имеют сложный и неоднородный полиминеральный состав. Пороодообразующие минералы при нагревании претерпевают физико-химические превращения, вступают во взаимозависимые реакции, что приводит к изменениям состава и структуры материалов проявлению тепловых эффектов, что сопровождается глубокими изменениями теплофизических свойств (ТФС). Сложные термически активируемые СТМХП определяются кинетическими закономерностями и зависят от условий нагрева, поэтому ТФС фосфатного сырья приобретают сложный температурно-временной и температурно-концентрационный характер зависимостей.

Диссертационная работа Орехова Владимира Александровича посвящена расширению и совершенствованию методов и средств моделирования теплофизических свойств и кинетических закономерностей гетерогенных процессов, протекающих при термической обработке полифракционного дисперсного сырья на примере фосфорсодержащих руд. Она также направлена на получение новых научно-обоснованных данных по теплофизическим свойствам и кинетике декар-

бонизации фосфатного рудного сырья по результатам проведенных термической обработки рудного сырья, разработка вычислительных методов расчёта совмещенных тепломассообменно-химических процессов высокотемпературного обжига с целью повышения его энергоресурсо-эффективности.

Объектом исследования автора являются тепломассообменно-химические процессы термической обработки полидисперсного сырья с учетом совокупности взаимозависимых термически активируемых химических гетерогенных реакций, изменения химического и структурного состава, температурно-концентрационной зависимости теплофизических свойств при нагревании. Примером объекта исследования является рудное фосфатное сырьё.

Предметом исследования являются математические модели, методы и алгоритмы, которые описывают 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 совмещенные тепломассообменно-химические процессы термической обработки полидисперсного сырья.

Диссертационное исследование по моделированию совмещенных тепломассообменно-химических процессов выполнялось 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. Моделирование комплекса ТФС фосфатного рудного сырья при высокотемпературном обжиге проводились при поддержке гранта РНФ научного проекта № 22-11-00335.

Исходя из вышеуказанного, следует, что диссертационная работа Орехова Владимира Александровича, посвященная повышению энергоресурсоэффективности сложных совмещенных тепломассообменно-химических процессов на основе математического и компьютерного моделирования, учитывающего влияние взаимозависимых теплофизико-химических свойств полидисперсного сырья и анализе результатов, полученных в вычислительных экспериментах на компьютерной модели с использованием разработанного комплекса компьютерных программ, является актуальной.

2. Степень обоснованности научных положений, выводов и рекомендаций является достаточно высокой и подтверждается корректным применением методов математического моделирования процессов тепломассобмена в динамической плотной полидисперсной многослойной массе на примере рудного фосфатного материала с перекрестной подачей газа-теплоносителя, методов конечно-разностного моделирования задачи теплопроводности, осложненной эндотермическими реакциями декарбонизации. При этом используются компьютерный анализ данных, методы математического и компьютерного моделирования влияния на СТМХП комплекса ТФС фосфоритов, математические методы обработки экспериментальных данных, метод наименьших квадратов, натурный эксперимент. Также степень обоснованности 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.

Сформулированные научные положения подтверждаются также результатами практического использования:

- в проектно-конструкторской деятельности предприятий: ООО «РусЭнерго-Проект» и ООО «НИИМАШ»;
- в научно-исследовательских разработках и учебном процессе филиала ФГБОУ ВО «Национальный исследовательский университет «МЭИ» в г. Смоленске.

Научные положения и практические достижения диссертационной работы целесообразно использовать при разработке систем компьютерного моделирования, реализующих предложенные соискателем математические модели, методы и алгоритмы, для повышения энергоресурсоэффективности сложных совмещенных тепломассообменно-химических процессов, а также в образовательном процессе технических университетов.

3. Достоверность и новизна научных положений и рекомендаций

Достоверность научных положений и рекомендаций 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.

Новизна научных положений, значимость для науки и практики результатов диссертационного исследования заключается в предложенных для компьютерного моделирования математических моделей 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; описания ТФС фосфоросодержащих руд методом решения инверсной задачи теплопроводности (ИЗТ); 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.

4. Значимость для науки и практики выводов и рекомендаций диссертационного исследования

Значимость для науки выводов и рекомендаций диссертационного исследования представляют разработанные математические модели СТМХП термической подготовки полифракционного сырья на примере рудных фосфоритов. Построены математические модели определения ТФС рудных фосфатных материалов. Исследованы температурные зависимости теплоёмкости и теплопроводности фосфоритов решением инверсной задачи теплопроводности на основе выполненных вычислительных экспериментов. Предложен алгоритм обработки данных ТФС фосфоритов.

Значимость для практики выводов и рекомендаций диссертационного исследования заключается в том, что разработан оригинальный комплекс программ, для расчета и валидации с натурными экспериментами для сложного СТМХП термической подготовки полифракционного сырья на примере рудных фосфоритов, реализующий предложенные методы и алгоритмы и позволяющий обеспечить требуемую функциональность при формировании, проведении вычислительных экспериментов и решении практических задач. Разработана информационная система паспортизации теплофизических и химико-технологических свойств фосфоритов для повышения эффективности СТМХП при высокотемпературном обжиге.

5. Заключение

5.1. Оценка диссертационного исследования как квалификационной работы

Диссертация Орехова Владимира Александровича является завершённой самостоятельно выполненной научно-квалификационной работой, в которой впервые приведены результаты, позволяющие квалифицировать их как решение актуальной научной задачи, имеющей значение для повышения энергоресурсоэффективности сложных совмещённых теплообменно-химических процессов на основе математического и компьютерного моделирования, учитывающего влияние взаимозависимых теплофизико-химических свойств полидисперсного сырья и анализе результатов, полученных в вычислительных экспериментах на компьютерной модели с использованием разработанного комплекса компьютерных программ. На основании вышеуказанного можно утверждать, что работа удовлетворяет требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук и изложенным в Постановлении Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. №842 «О порядке присуждения ученых степеней» (пункты 9, 10, 11, 13, 14).

5.2. Оценка содержания и авторского вклада. Соответствие работы паспорту специальности

Диссертация соответствует следующим пунктам паспорта специальности 1.2.2. Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ:

П4: «Разработка новых математических методов и алгоритмов интерпретации натурального эксперимента на основе его математической модели». Разработана математическая модель совмещённого теплообменно-химического процесса, учитывающая влияние скорости нагрева образцов полидисперсного сырья, которая позволяет получить описание кинетики разложения термически активируемых компонентов при условиях, приближенных к условиям функционирования действующих аппаратов термической подготовки (п. 2.2).

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 совмещенного тепломассообменно-химического процесса, характеризующей степень его завершенности (п. 4.2, 4.3, 4.4).

П5: «Разработка новых математических методов и алгоритмов валидации математических моделей объектов на основе данных натурного эксперимента или на основе анализа математических моделей». Разработан 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 (п. 3.2, 3.4).

П6: «Разработка систем компьютерного и имитационного моделирования, алгоритмов и методов имитационного моделирования на основе анализа математических моделей (технические науки)». Предложена архитектура оригинального программного комплекса, отличающаяся включением модулей и требуемых функциональных связей, что позволяет реализовать предложенные модели, методы и алгоритмы, осуществлять вычислительные эксперименты (п. 3.6).

Предложена 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. реализовать предложенные модели, методы и алгоритмы, осуществлять вычислительные эксперименты (п. 3.5).

5.3. Общая характеристика работы

Диссертация включает: введение, 4 раздела, заключение, список литературы из 129 наименований, 50 рисунков, 9 таблиц, 1 приложение. Полный объем диссертации составляет 207 страниц.

Во *введении* обоснована актуальность выполненного автором научного исследования. Сформулированы цель и задачи диссертационной работы. Приведены научная новизна, теоретическая и практическая значимость, методы исследования, обоснованность и достоверность полученных в работе результатов. Приведены результаты практической реализации работы. Представленное соискателем обоснование актуальности темы и цели диссертационного исследования выполнено корректно и замечаний не вызывает.

В *первом разделе* выполнен краткий обзор современных научных исследований по моделированию сложных тепломассообменных химикоэнерготехнологических процессов. Приведено описание технологических особенностей термической подготовки дисперсного рудного сырья при температурном воздействии. Описана разработанная авторским коллективом методика проведения теплофизических исследований на стадиях формирования состава шихты и режимов обжига, а также контроля качества полупродукта – аглоспёка фосфоритового рудного сырья, полученного в промышленных условиях. Приводятся температурные зависимости коэффициентов теплопроводности агломерата фосфоритового рудного сырья, объёмной теплоёмкости агломерата фосфоритового рудного сы-

рья, коэффициента теплопроводности агломерата фосфоритового рудного сырья, определенные соискателем. На основе их сформулированы соответствующие выводы о характере этих зависимостей.

Представлены методы экспериментального исследования теплофизических свойств твердых композиционных материалов. Обосновано использование метода скоростных измерений. Отмечается, что при этом необходимо решение обратной задачи теплопроводности (ОЗТ), что также применяется для определения ТФС рудных материалов. Используются аналитические и численные решения ОЗТ и консервативные разностные уравнения, полученные интегро-интерполяционным методом.

Отмечается необходимо унифицировать представление данных для формирования электронных справочников. Так в последнее время все больше работ посвящается этому, разработана база данных о материалах, применяемых в химической промышленности с возможностью оценки риска при использовании нескольких материалов в технологических процессах.

Дана характеристика состояния теоретических разработок моделирования теплофизических свойств композиционных материалов.

Во *втором разделе* описываются результаты моделирования кинетики эндотермической гетерогенной реакции на примере диссоциации карбонатов. Приводится описание особенностей моделирования термической деструкции карбонатов в окомкованных фосфоритах при высокотемпературном обжиге. По результатам экспериментов сделаны выводы и предположения об обжиге фосфоритовых окатышей с размерами и при скоростях нагрева; о деструкции карбонатов в фосфорсодержащем сырье, протекающем в основном в два этапа; о нагреве фосфоритового материала и происходящим в нём физико-химические превращениях, которые сопровождаются существенными изменениями ТФС.

Описаны результаты моделирования влияния условий внутреннего теплообмена на процесс термического разложения карбонатов в фосфорсодержащем сырье. Приводится структурная схема сложного СТМХП высокотемпературного обжига рудного фосфатного сырья и ее описание, предложенные соискателем. На основе анализа результатов вычислительных экспериментов выявлена зависимость между скоростью нагрева фосфоритового сырья и кинетикой термического разложения карбонатов.

В завершении раздела рассмотрены особенности проведения вычислительных неизотермических экспериментов по определению параметров структурно-кинетического уравнения. Приводится зависимость температуры отнесения от степени превращения, выявленная соискателем. исследованы параметры структурно-кинетического уравнения по результатам неизотермического эксперимента, сопровождаемого градиентами температур в исследуемом образце в диапазоне температур химико-технологической системы обжига фосфатного сырья. При этом учитываются кинетические особенности эндотермической реакции декарбонизации. Используется методика термоаналитических экспериментов и решается обратнo-кинетическая задача.

В *третьем разделе* описаны результаты экспериментальных исследований термических деформаций фосфатного сырья, оказывающие существенное влияние на протекание сложного СТМХП термической обработки в обжиговых конвейерных и агломерационных машинах. Проведено математическое моделирование ТФС: теплоёмкости и теплопроводности фосфоросодержащих рудных материалов в диапазо-

нах температур и скоростях нагрева действующих тепло-технологических аппаратах термической обработки рудного сырья с обнаружением соответствующих эффектов.

Экспериментально исследованы температурно-концентрационная и температурно-временная зависимость теплоёмкости рудных образцов фосфатов от тепловых условий протекания реакции декарбонизации в образцах при структурных модификациях в результате изменения химического состава образцов.

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. Эта система для доступа к данным и их обработки использует технологию клиент-сервер.

Разработан алгоритм для программы расчета теплофизических свойств по химическому составу фосфоритов

В четвертом разделе описываются результаты проведенных вычислительных экспериментов по выявлению различий в теплофизических свойствах термически обрабатываемых рудных материалов. Показано, что в равных условиях обжиг рассеянного по фракциям рудного сырья более эффективен, т.к. способствует снижению температур газа-теплоносителя на колосниковой решётке и повышению степени декарбонизации фосфатного сырья.

В заключении обобщены полученные в работе научные и практические результаты, сформулированы направления перспективных исследований.

Содержание автореферата соответствует содержанию диссертации.

Оформление диссертации и автореферата соответствует Национальному стандарту РФ ГОСТ Р 7.0.11-2011 «Диссертация и автореферат диссертации. Структура и правила оформления». М.: Стандартинформ, 2018, а также приказу Министерства науки и высшего образования РФ от 7 июня 2021 г. № 458 «О внесении изменений в Положение о совете по защите диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук, утвержденное приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 10 ноября 2017 г. № 1093». В целом представленные материалы диссертационной работы позволяют достаточно полно оценить объем, сложность и актуальность проведенного исследования.

5.4. Общие замечания по диссертационной работе

1. К предмету исследования (стр. 8) обычно относятся методы, модели, алгоритмы, которые используются при описании объекта исследования для решения сформулированных задач, а не, собственно, изучаемый процесс.

2. Обычно цель диссертационного исследования связана с повышением результативности или эффективности, а не со степенью завершенности исследуемого процесса (стр. 7).

3. Не приводится дисперсионная таблица для оценки качества полученной регрессионной зависимости от температуры удельной теплоемкости кремнистой составляющей фосфорита и кварца (стр. 106) и других аналогичных зависимостей, полученных соискателем.

4. Приводятся результаты (стр. 174, рис. 4.4.3) расчётов оптимальных условий сушки и обжига окомкованного сырья – фосфоритовых окатышей (высота засыпки 0.4м) и постели кускового фосфорита (высота засыпки 0.1 м) при технологических ограничениях, соответствующих действующим обжиговым конвей-

ерным машинам. Однако отсутствует описание постановки задачи оптимизации (как и последующих других), ее анализ, выбор или построение метода и алгоритма ее решения. Имеется лишь ссылка на разработанную методику и компьютерную модель вычислительного поиска предельных и оптимальных режимов сложного СТМХП термической декарбонизации [39, 84].

5. Не приведено обоснование выбора языка программирования и платформы для разработки комплекса программных средств, реализующих предложенные алгоритмы. Также не описана архитектура предложенной информационной системы паспортизации свойств фосфоритов.

6. Замечания по оформлению диссертации и автореферата:

- Необходимо завершить фразу в пункте 4 научной новизны (стр. 9): «Разработана математическая модель, *отличающаяся...*»: математическая модель распределения температур газа-теплоносителя и частиц полидисперсного сырья по высоте слоя засыпки в произвольный момент времени. Сформулировать для этого п. 4, например, следующим образом.

п. 4. Разработана математическая модель распределения температур газа-теплоносителя и частиц полидисперсного сырья по высоте слоя засыпки в произвольный момент времени, *отличающаяся* учетом степени превращения в элементарных зёрнах и плотной многослойной массе засыпки, *что позволило* 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.

- Требуется конкретно сформулировать, какие именно результаты математического моделирования протекания СТМХП термической подготовки полидисперсного сырья с учетом влияния скорости нагрева образцов на примере композиционного фосфатного материала с реагирующими карбонатными включениями, выносятся на защиту согласно п. 1 (стр. 10).

- Раздел 1 не содержит выводов, как последующие. Кроме этого, раздел 1 обычно завершается пунктом «Постановка задачи».

- Отсутствует список сокращений.

- На рис. 3.51 вместо Подпрограмма ИНТЕРПОЛИЦИИ должна быть указана Подпрограмма ИНТЕРПОЛЯЦИИ.

Указанные замечания не влияют на главные теоретические и практические результаты диссертации.

5.5. Опубликование основных результатов

По теме диссертации опубликованы 35 научных работ, в т.ч. 6 статей в российских рецензируемых научных журналах, рекомендованных ВАК, 15 статей, индексируемых в SCOPUS и WoS, 11 публикаций в других журналах и материалах научных конференций. Получено 2 свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ в Роспатенте РФ, 1 патент на изобретение.

5.6. Характеристика источников результатов работы

В диссертационной работе содержатся необходимые обязательные ссылки на источники заимствования, а также отметки об авторстве новых научных результатов с указанием личного вклада.

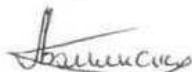
Таким образом, работа соответствует пункту 14 Положения о порядке присуждения ученых степеней.

ОБЩИЙ ВЫВОД

Считаю, что диссертационная работа Орехова Владимира Александровича «Моделирование сложного совмещённого тепломассообменно-химического процесса (на примере высокотемпературного обжига рудного фосфатного сырья)», представленная на соискание ученой степени кандидата технических наук по специальности 1.2.2. Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ, отвечает формуле и пунктам паспорта специальности 1.2.2. Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ и удовлетворяет требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, изложенным в Постановлении Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. №842 «О порядке присуждения ученых степеней» (пункты 9, 10, 11, 13, 14), а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата технических наук по заявленной специальности.

Оппонент согласен на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и дальнейшую их обработку.

Официальный оппонент,
доктор технических наук, профессор,
профессор Высшей школы технологий искусственного интеллекта
Института компьютерных наук и кибербезопасности
ФГАОУ ВО СПбПУ



Большаков Александр Афанасьевич
04.12.2023

Адрес: Россия, 195251, г. Санкт-Петербург, ул. Политехническая, дом 29
Тел.: +7 (812) 5526521, факс: +7 (812) 5524662; E-mail: telematics@spbstu.ru



АХИД. № 05-4802
05 » 12 2023 г.
подпись 