

Программная реализация математической модели расчета технологических параметров электротермических реакторов

А.А. Быков ¹✉, В.И. Бобков ¹, В.А. Орехов ¹, С.В. Незамаев ²

¹ Национальный исследовательский университет «МЭИ» в г. Смоленске,
г. Смоленск, 214013, Россия

² Первая горнорудная компания, г. Москва, 109004, Россия

Ссылка для цитирования

Быков А.А., Бобков В.И., Орехов В.А., Незамаев С.В. Программная реализация математической модели расчета технологических параметров электротермических реакторов // Программные продукты и системы. 2024. Т. 37. № 4. С. 611–621. doi: 10.15827/0236-235X.148.611-621

Информация о статье

Группа специальностей ВАК: 1.2.2

Поступила в редакцию: 23.04.2024

После доработки: 20.05.2024

Принята к публикации: 27.05.2024

Аннотация. В работе представлена математическая модель, описывающая возможный метод расчета тепломассовых процессов. На основе модели разработан итерационный алгоритм и создана информационная система, которая осуществляет моделирование расчета технологических параметров электротермических реакторов, используемых для переработки рудного фосфатного сырья. Особенность разработанной модели в том, что она учитывает взаимосвязь зонального представления происходящих в руднотермических печах процессов. А на базе параметров теплогидравлического режима можно получить решение задачи идентификации поступления сырья в зону реакции. В дальнейшем это даст возможность разработки системы автоматизации управления процессами в данной зоне с целью удаления примесей. Созданная математическая модель позволяет учитывать конфигурацию внутренней структуры исследуемых установок для понимания природы происходящих в них процессов и явлений. При поиске решения была также использована модель алгоритма автоматического построения сетки конечных элементов, предложен алгоритм реализации конечно-элементных уравнений с оптимизацией ширины матрицы и использованием свойств симметрии. Созданный программный комплекс позволяет выполнять автоматизированные расчеты режимов функционирования электротермических рудовосстановительных реакторов любых конструкций, в том числе и применяемых при выплавке фосфатного сырья. База данных информационной системы дает возможность пользователю выбрать модель рудовосстановительного реактора и произвести расчет тепломассообменных процессов, а также задать систему эффективных коэффициентов для расчета разработанной экспериментальной модели восстановительного реактора. При этом в программном комплексе можно выполнить не только комплексный расчет руднотермического реактора, но и отдельных его характеристик. Многодокументный интерфейс наглядно представляет результаты расчетов в виде полей изолиний и векторов скоростей тепломассовых процессов.

Ключевые слова: математическая модель, информационная система, программный комплекс, дифференциальные уравнения, итерационный алгоритм, компьютерное моделирование, численные методы

Благодарности. Работа выполнена в рамках госзадания, проект № FSWF-2023-0012

Введение. Математическое моделирование процессов в рудовосстановительных электротермических реакторах для получения сплавов фосфатного сырья позволяет выявить условия оптимального функционирования и снижения затрат на единицу получаемой продукции [1, 2]. Работ, отвечающих всем требованиям физики процессов, протекающих в реакторах подобного типа, весьма немного, например [3, 4].

Российскими и зарубежными исследователями предпринимались различные попытки моделирования процессов, происходящих в реакторах такого типа, но представленные модели являлись либо однофакторными, либо настолько математическими сложными, что при их реализации в компьютерной программе возникали сложности. В работах российских ученых [5, 6] представлены одномерные модели и ПО для расчета процессов, происходя-

щих только в реакторной зоне руднотермических печей, используемых для получения желтого фосфора. Сами авторы отмечают, что их разработка может быть использована как составляющая часть программного комплекса расчета технологического процесса. Зарубежными учеными также в основном рассматриваются однофакторные модели, учитывающие только один параметр реактора, в частности, температуру рабочей поверхности электродов, электрический потенциал или тепловые коэффициенты восстановительного процесса [7, 8]. Между тем необходимы технологический расчет реактора в целом и реализация возможности анализа руднотермических печей, используемых в различных отраслях металлургической промышленности. Рассматриваемые технологические установки характеризуются протеканием сложных тепломассообменных явлений,

для анализа которых требуется применение многофакторных математических моделей [9]. Таким образом, создание адекватной математической модели даст возможность не только более основательно обследовать процессы, происходящие внутри данных реакторов, но и разработать системы автоматизации расчетов, способствующие модернизации данных установок с целью повышения их энергетической эффективности.

Разработанная модель тепломассопереноса в исследуемых реакторах содержит уравнения движения фаз, тепломассообмена и распределения электрического потенциала. Реализация данного метода расчета параметров функционирования восстановительных реакторов дает возможность решения системы уравнений тепломассопереноса свести к решению уравнений теплопроводности и диффузии, что существенно облегчает реализацию поставленной задачи.

Таким образом, в зоне реакции и образования шлака уравнения тепломассопереноса можно представить в следующем виде:

$$\begin{aligned} \operatorname{div}(\lambda_T \operatorname{grad} T_f) + q_{ve} - q_{cr} \omega_{cr} &= 0, \\ \operatorname{div}(D_T \operatorname{grad} C_f) - \omega_{cr} &= 0, \end{aligned}$$

а уравнение распределения электрического потенциала как

$$\operatorname{div}((1/\rho_e) \operatorname{grad} \varphi_e) = 0.$$

Процессы теплообмена в шихтовой зоне описываются в приближении Дарси уравнениями энергопереноса [10]:

$$\begin{aligned} (1 - \epsilon) c_m \rho_m v_m \operatorname{grad} T_m - \operatorname{div}(\lambda_m \operatorname{grad} T_m) &= \alpha_v (T_g - T_m), \\ \epsilon c_g \rho_g v_g \nabla T_g - \operatorname{div}(\lambda_g \operatorname{grad} T_g) &= \alpha_v (T_m - T_g), \\ \operatorname{div}(\operatorname{grad} j_m) &= 0, \quad v_m = -\operatorname{grad} j_m, \\ \operatorname{div}(k \operatorname{grad} j_g) &= \gamma \omega_{cr}, \quad v_g = -k \operatorname{grad} j_g, \end{aligned}$$

где λ_T – эффективная теплопроводность расплава; q_{cr} – тепловой эффект восстановительного процесса; T_f – температура расплава; C_f – концентрация реагента.

Для углеродистой зоны граничные условия можно задать следующим образом:

$$\Gamma \in \Gamma_{melt}, T_f = T_{melt},$$

на стенках реактора:

$$\Gamma \in \Gamma_w, \lambda_T \frac{\partial T_f}{\partial n} = -k_{he} (T_f - T_o),$$

для переноса массы:

$$\Gamma \in \Gamma_{melt}, C = C_m.$$

Условие для стенок (непроницаемость):

$$\Gamma \in \Gamma_w, \frac{\partial C_f}{\partial n} = 0.$$

При наличии многослойной зоны для электрического потенциала граничные условия определяются для каждого компонента

на поде:

$$\Gamma \in \Gamma_d, \varphi_e = 0,$$

на поверхности электрода:

$$\Gamma \in \Gamma_e, \varphi_e = \varphi_{e3},$$

на границе расплав–шихта:

$$\Gamma \in \Gamma_{melt}, \frac{\partial \varphi_e}{\partial n} = 0,$$

на границе раздела k -й и $k+1$ -й электропроводящих зон расплава:

$$\Gamma \in \Gamma_{k,k+1} \varphi_{ek} = \varphi_{ek+1} \text{ и } \frac{1}{\rho_{ek}} \frac{\partial \varphi_{ek}}{\partial n} = \frac{1}{\rho_{ek+1}} \frac{\partial \varphi_{ek+1}}{\partial n}.$$

На верхней границе температурные граничные условия шихты имеют вид

$$\Gamma \in \Gamma_m, T_m = T_{env},$$

в зоне плавления минеральных компонентов шихты:

$$\Gamma \in \Gamma_{melt}, T_m = T_{melt}.$$

На выходе в зоне реакции температуру газа можно задать как среднюю температуру расплава в надлежащем сечении:

$$T_g = T_f.$$

Таким образом, на фронте плавления сход шихты определяется следующим граничным условием:

$$\begin{aligned} \Gamma \in \Gamma_{melt}, \frac{\partial \varphi_m}{\partial n} &= \\ &= - \left(\lambda_T \frac{\partial T_f}{\partial n} - \lambda_m \frac{\partial T_m}{\partial n} \right) \frac{1}{(\rho_m Q_{melt})}, \end{aligned}$$

Учитывая непроницаемость стенок реактора, получаем следующее граничное условие:

$$\Gamma \in \Gamma_w, \frac{\partial \varphi_m}{\partial n} = 0,$$

где T_o – температура охладителя реактора; T_{melt} – температура плавления шихты; T_{env} – температура верхней границы шихтовой зоны; k_{he} – коэффициент теплопередачи, в случае идеальной изоляции градиент температуры равен нулю; Q_{melt} – количество теплоты, необходимое для плавления шихты; C_m – концентрация реагента в шихте; ρ_m – насыпная плотность шихты.

Построение математической модели итерационного алгоритма расчета руднотермической установки

В представленной модели используются элементы четырехугольной формы с базисными функциями с непрерывностью первого порядка, поскольку они наиболее предпочтительны для решения уравнений конвективного теплообмена [11].

Искомая непрерывная величина в области четырехугольного конечного элемента представляется в виде

$$\Phi = \sum_{i=1}^4 N_i \Phi_i = [N][\Phi],$$

где Φ_i – неизвестные значения искомой величины в узлах конечного элемента; N_i – базисные функции элемента. На конечном элементе вводится локальная система координат (ξ, η) , где $-1 \leq \xi \leq 1, -1 \leq \eta \leq 1$, которая позволяет использовать элементы нестандартной формы, а также упрощает интегрирование уравнений. Преобразование этой системы в декартовую систему координат (x, y) выглядит следующим образом:

$$x = \sum_{i=1}^4 N_i(\xi, \eta) x_i = [N][x],$$

$$y = \sum_{i=1}^4 N_i(\xi, \eta) y_i = [N][y],$$

где x_i и y_i – координаты узлов конечного элемента.

Базисные функции элемента с использованием локальной системы координат имеют вид

$$N_1 = \frac{1}{4}(1-\xi)(1-\eta), \quad N_2 = \frac{1}{4}(1+\xi)(1-\eta),$$

$$N_3 = \frac{1}{4}(1+\xi)(1+\eta), \quad N_4 = \frac{1}{4}(1-\xi)(1+\eta).$$

Для вычисления производных в координатах (ξ, η) используется соотношение

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} \\ \frac{\partial \Phi}{\partial \eta} \end{bmatrix} = [J] \begin{bmatrix} \frac{\partial \Phi}{\partial x} \\ \frac{\partial \Phi}{\partial y} \end{bmatrix},$$

где якобиан $[J]$ вычисляется по формуле

$$[J] \equiv \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \eta} \end{bmatrix}.$$

Для решения дифференциальных уравнений совместно с методом конечных элементов используется метод Галеркина, заключающийся в том, что искомое решение будет наилучшим, если интеграл взвешенной невязки равен нулю:

$$\int_S L(\Phi)[N] \, dx dy = 0,$$

где $L(x) = 0$ – интегрируемое дифференциальное уравнение.

Для вычисления интегралов используется численное интегрирование с использованием квадратурных формул Ньютона–Котеса в локальных координатах элемента:

$$\int_S f(\xi, \eta) \, dx dy = \det[J] \sum_{k=1}^n H_k f(\xi_k, \eta_k),$$

где $n = 4$ – количество точек интегрирования; $H_k = 1$ – весовые коэффициенты, заданные для точек с локальными координатами $\xi_k = \pm 0,577350$; $\eta_k = \pm 0,577350$; f – интегрируемая функция. Полученные в результате интегрирования матрицы систем уравнений для каждого элемента объединяются в одну систему уравнений для всей области.

Для генерации сетки конечных элементов используется метод суперэлементов. При использовании этого метода в исходной области вводится нерегулярная сетка криволинейных восьмиузловых четырехугольников, которые называются суперэлементами S с узлами $P_i = P(x_i^s, y_i^s), I = 1, 2, \dots, 8$. При помощи отображения

$$x(\xi\eta) = x_i^s N_i, \quad y(\xi\eta) = y_i^s N_i(\xi\eta)$$

квадрат Q отображается в S , где $N_i(\xi, \eta)$ – квадратичные базисные функции на суперэлементе:

$$N_1 = -\frac{1}{4}(1-\xi)(1-\eta)(\xi+\eta+1), \quad N_2 = \frac{1}{2}(1-\xi^2)(1-\eta),$$

$$N_3 = \frac{1}{4}(1+\xi)(1-\eta)(\xi-\eta-1), \quad N_4 = \frac{1}{2}(1+\xi)(1-\eta^2),$$

$$N_5 = \frac{1}{4}(1+\xi)(1+\eta)(\xi+\eta-1), \quad N_6 = \frac{1}{2}(1-\xi^2)(1+\eta),$$

$$N_7 = -\frac{1}{4}(1-\xi)(1+\eta)(\xi-\eta+1), \quad N_8 = \frac{1}{2}(1-\xi)(1-\eta^2).$$

Построенная в Q равномерная сетка отображается в криволинейную сетку суперэлемента S . При этом расположение узловых точек P_i на сторонах позволяет осуществлять локальное сгущение сетки. Объединение сеток, построенных таким образом на каждом суперэлементе, дает сетку на всей исходной области, как показано на рисунке 1.

На рисунке 2 представлена сетка четырехугольных конечных элементов, сгенерированная для модели электротермического рудовостановительного реактора. При этом границы суперэлементов выбирались на границах расчетных зон. Границы электродов аппроксимировались параболой.

Уравнения математической модели реактора можно привести к двум следующим формам:

$$\text{div}(k \, \text{grad}\Phi) - q = 0,$$

$$V \, \text{grad}\Phi - \text{div}(k \, \text{grad}\Phi) + q = 0. \quad (1)$$

Аппроксимирующую систему уравнений можно представить в следующем виде:

$$[A][\Phi] = [F], \quad (2)$$

где $[F]$ – вектор свободных членов, $[A]$ – матрица системы уравнений.

На основе теоремы Грина и квадратурных формул численного интегрирования для уравнения (2) матрица системы уравнений задается как

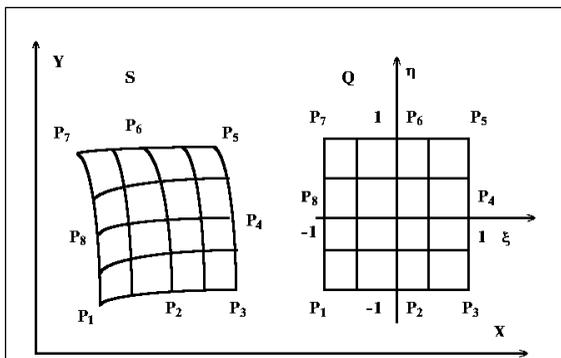


Рис.1. Криволинейный суперэлемент S исходной области и его образ Q

Fig. 1. Curvilinear superelement S of the source region and its image Q

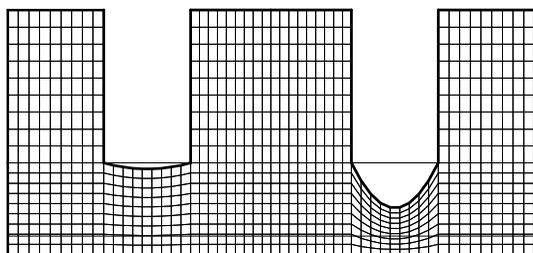


Рис. 2. Сетка конечных четырехугольных элементов

Fig. 2. Mesh of finite quadrilateral elements

$$[A] = \det [J] \sum_{k=0}^n [B]^T [K] [B],$$

где

$$[B] = \begin{bmatrix} \frac{\partial [N]}{\partial x} \\ \frac{\partial [N]}{\partial y} \end{bmatrix} \text{ – матрица производных функций формы;}$$

где

$$[K] = \begin{bmatrix} k & 0 \\ 0 & k \end{bmatrix} \text{ – матрица свойств.}$$

Вектор свободных членов определяется следующим образом:

$$[F] = q \cdot \det [J] \sum_{k=0}^n [N]^T.$$

При этом матрицы определяются в соответствующих точках (ξ_k, η_k) конечного элемента.

Для аппроксимации уравнений типа (1) при больших значениях отношения v/k используется модифицированный метод Галеркина, известный под названием метода Петрова–Галеркина, являющийся конечноэлементным аналогом метода конечных разностей с разностями вверх по потоку [12, 13]. При этом в качестве

весовых функций используются функции, отличные от базисной (так называемые асимметричные весовые функции). При этом условие наилучшего решения выглядит как

$$\int_S L(\Phi)[W] \, dx dy = 0,$$

здесь $[W]$ – вектор асимметричных весовых функций, принимаемых в виде

$$W_1 = \frac{1}{4}(1-\xi)(1+1,5\alpha_{12}(1+\xi))(1-\eta)(1+1,5\alpha_{14}(1+\eta)),$$

$$W_2 = \frac{1}{4}(1+\xi)(1-1,5\alpha_{12}(1-\xi))(1-\eta)(1+1,5\alpha_{23}(1+\eta)),$$

$$W_3 = \frac{1}{4}(1+\xi)(1-1,5\alpha_{34}(1-\xi))(1+\eta)(1-1,5\alpha_{23}(1-\eta)),$$

$$W_4 = \frac{1}{4}(1-\xi)(1+1,5\alpha_{34}(1+\xi))(1+\eta)(1-1,5\alpha_{14}(1-\eta)),$$

где α_{ij} – коэффициенты степени асимметричности (индексы определяют номера узлов конечного элемента, соединяемых соответствующими сторонами), оптимальное значение которых определяется из выражения

$$\alpha_{ij} = \frac{\exp\left(\frac{Pe}{2}\right) + \exp\left(-\frac{Pe}{2}\right)}{\exp\left(\frac{Pe}{2}\right) - \exp\left(-\frac{Pe}{2}\right)} - \frac{2}{Pe}.$$

Сеточное число Пекле Pe определяется по формуле

$$Pe = \frac{h_{ij} V_{cp}}{2k},$$

где h_{ij} – длина стороны конечного элемента, соединяющей узлы i, j ; V_{cp} – средняя скорость вдоль этой стороны, определяемая как

$$V_{cp} = \frac{(V_i + V_j) I_{ij}}{2},$$

где V_i и V_j – значения вектора скорости в узлах i и j ; I_{ij} – вектор направления стороны ij .

При использовании асимметричных базисных функций матрица системы линейных уравнений, аппроксимирующей дифференциальное уравнение, будет определяться следующим образом:

$$[A] = \det [J] \sum_{k=0}^n [W]^T [V] [B] + [D]^T [K] [B],$$

$$\text{где } [D] = \begin{bmatrix} \frac{\partial [W]}{\partial x} \\ \frac{\partial [W]}{\partial y} \end{bmatrix} \text{ – матрица производных функций формы; } [V] \text{ – вектор скоростей.}$$

Вектор свободных членов:

$$[F] = q \cdot \det [J] \sum_{k=0}^n [W]^T.$$

Результирующая матрица системы уравнений в методе конечных элементов является разреженной. Для решения таких систем уравнений в течение продолжительного времени использовались прямые методы типа метода исключения Гаусса с выбором исключаемого элемента и с учетом разреженности и ленточной структуры матрицы [14]. При этом большое внимание уделялось использованию алгоритмов перенумерации узлов сетки, минимизирующих ширину ленты, позволяющих сократить объем памяти ЭВМ, необходимой для хранения матрицы, и время расчета [15].

Матрицы системы линейных уравнений, аппроксимирующие дифференциальные уравнения диффузии, уравнения типа (1), являются симметричными, положительно определенными и хорошо решаются прямыми методами. В отличие от них матрицы систем, аппроксимирующие дифференциальные уравнения с конвективными членами, уравнения типа (1), не имеют регулярной структуры, несимметричны, неположительно определены и являются плохо обусловленными, что ограничивает применение прямых методов для решения таких систем. Кроме того, для увеличения точности необходимо увеличивать количество узлов расчетной сетки конечных элементов и, следовательно, увеличивать размерность систем уравнений, для которых нельзя применять прямые методы решения из-за нарастающих ошибок округления, связанных с выполнением большого числа арифметических операций. Для устранения этих трудностей необходимо использовать итерационные методы.

Данный метод формирования математической модели позволяет на основе применения управляющих параметров определить закономерности изменения температуры газов, возникающих в подсводной области реактора.

Итерационный алгоритм реализации математической модели расчета электротермических установок

В основе построения алгоритма лежит метод сопряженных градиентов. Данный метод адаптирован для решения симметричных положительно определенных систем алгебраических уравнений [16], его обобщение – метод уменьшения размерности (*Induced Dimension Reduction* – IDR) пригоден как для несимметричных, так и для неположительно определенных систем уравнений. Приведем алгоритм метода сопряженных градиентов (IDR) для решения системы уравнений вида $[A][X] = [B]$.

Задаются начальное приближение $[X]_0$ и точность расчета ε :

$$1) [F]_0 = [A][X]_0 - [B]; [dG]_0 = [dY]_0 = 0;$$

$$2) n = n + 1;$$

$$3) [S]_n = [F]_{n-1} + w_{n-1}[dG]_{n-1}; [T]_n = [A][S]_n;$$

$$4) \text{ если } n = 1 \text{ или } n \text{ четное } \alpha_n = \frac{([T]_n[S]_n)}{([T]_n[T]_n)},$$

переход к п. 7;

$$5) \alpha_n = \alpha_{n-1};$$

$$6) [dX]_n = w_{n-1}[dY]_{n-1} - \alpha_n [S]_n;$$

$$7) [dF]_n = w_{n-1}[dG]_{n-1} - \alpha_n [T]_n;$$

$$8) [X]_n = [X]_{n-1} + [dX]_n; [F]_n = [F]_{n-1} + [dF]_n;$$

9) если n четное, $[dG]_n = [dG]_{n-1}$; $[dY]_n = [dY]_{n-1}$, переход к п.12;

$$10) [dG]_n = [dF]_n; [dY]_n = [dX]_n;$$

$$11) w_n = -\frac{([F]_n[F]_n)}{([F]_n[dG]_n)};$$

12) если $\frac{|[dX]_n|}{|[X]_n|} > \varepsilon$, переход к п. 3;

13) окончание расчета с результатом $[X]_n$.

Системы алгебраических уравнений метода конечных элементов, как уже отмечалось, имеют ленточную структуру. При этом время их решения $T \sim \beta^2 N$, а объем памяти ЭВМ, необходимый для хранения матрицы, $V \sim \beta N$, где N – число неизвестных; β – ширина ленты. Величина β зависит от нумерации узлов сетки и может принимать значения в широком диапазоне: $\sqrt{N} \leq \beta < N$.

В настоящей работе при хранении матрицы системы уравнений исключаются почти все нулевые (незначимые) коэффициенты. Это достигается использованием двух одномерных массивов, один из которых хранит вещественные значения коэффициентов уравнений, а другой целые номера переменных, соответствующие этим коэффициентам. Для четырехугольных билинейных конечных элементов количество узлов, соседних заданному узлу, не превышает восьми. Таким образом, подобный способ хранения матрицы системы уравнений эквивалентен традиционному с шириной ленты, равной девяти. Этот способ позволяет сократить объем памяти ЭВМ, необходимой для хранения матрицы системы уравнений при $N = 1\,000$ и использовании вещественных чисел с двойной точностью, почти в три раза по сравнению с традиционным и почти в девять раз уменьшить время расчета.

Массивы для хранения коэффициентов системы уравнения и номеров соответствующих переменных имеют размерность $N \times M$, где M – максимальное количество переменных, входя-

щих в уравнение. Приведем алгоритм расчета вектора $[F] = [A][X]$ с использованием предложенного способа хранения матрицы $[A]$. При этом полагается, что коэффициенты матрицы хранятся в массиве *Matr*, а номера соответствующих переменных в массиве *Index*:

```
for (i=0; i<N; i++) {
    F[i]=0;
    for (j=0; j<M; j++) {
        F[i]+=Matr[i*M+j]*X[Index[i*M+j]];
    }
}
```

Для моделирования процессов в электро-термическом рудовосстановительном реакторе используется двумерная математическая модель. При этом рассматриваются сечения, проходящие через центры двух электродов. Расчет тепломассопереноса сводится к решению системы дифференциальных уравнений. Использование метода конечных элементов позволяет аппроксимировать эти уравнения системой алгебраических уравнений.

Увеличение количества узлов сетки в силу необходимости повысить точность расчетов и наличие большого количества уравнений, описывающих математическую модель, делает размерность общей системы алгебраических уравнений очень большой, что уменьшает вероятность ее сходимости. Кроме того, система получается нелинейной вследствие вхождения в уравнения величин, определяемых из других уравнений, и плохо обусловленной из-за наличия в исходной системе уравнений конвективного теплообмена. Декомпозиция общей системы на подсистемы, аппроксимирующие отдельные дифференциальные уравнения, и последовательное решение этих систем итерационным методом практически устраняют трудности в реализации задачи. При этом значения величин, входящие в уравнения, берутся из предыдущей итерации. Для получения распределения какой-либо величины сначала формируется система алгебраических уравнений, аппроксимирующее соответствующее дифференциальное уравнение, которая затем решается с использованием метода, описанного выше. Критерием окончания расчета является равенство единице количества итераций метода сопряженных градиентов при решении каждой системы уравнений.

Уравнение теплообмена в реакционной зоне печи, определяющее распределение температуры, имеет ярко выраженную нелинейность, обусловленную экспоненциальной зависимо-

стью скорости реакции восстановления от температуры. Сходимость системы, включающей такое уравнение, ограничена правильным выбором начального приближения. В настоящей работе в качестве начального приближения для определения распределения температуры в реакционной зоне печи используется постоянная температура, равная температуре плавления. Для повышения сходимости системы уравнений используется метод нижней релаксации. При этом распределение температуры на каждой итерации ищется по схеме

$$[T]_n = [T]_{n-1}(1 - \alpha_p) + [T]_n^p \alpha_p,$$

где $[T]_{n-1}$ – распределение температуры, полученное на предыдущей итерации; $[T]_n^p$ – расчетное распределение температуры на текущей итерации, полученное решением соответствующей системы уравнений; $0 < \alpha_p < 1$ – коэффициент релаксации. На первых итерациях значение коэффициента релаксации выбирается малым $\alpha_p \approx 0,01$ и в дальнейшем по мере сходимости системы увеличивается либо вручную, либо автоматически с использованием зависимости

$$\alpha_p = \frac{k}{n_i},$$

где n_i – количество итераций метода сопряженных градиентов при решении системы уравнений, аппроксимирующей уравнение теплообмена в реакционной зоне печи; k – коэффициент пропорциональности. Использование в качестве начального приближения результатов предыдущих расчетов позволяет значительно сократить время решения совместной системы уравнений.

Для определения интегральных характеристик режима работы объема реактора, таких как полная активная мощность, выход газа и расход шихты, используется положение о том, что основное энерговыделение происходит в приэлектродных областях реакционной зоны. Там же происходит основная часть физико-химических процессов (образование газа и плавление шихты). При этом осуществляется интегрирование для каждого электрода по секторам величиной π с предположением, что тепловыделение на равноудаленной от электрода цилиндрической поверхности равно расчетному значению на том же расстоянии от электрода. Значение полной активной мощности в расчетном сечении ванны печи определяется выражением

$$P = \iint q \pi r_c dx dy,$$

где q – удельное объемное энерговыделение; r_e – расстояние до ближайшего электрода. Интегрирование для трех различных сечений печи позволяет получить полную мощность с учетом взаимодействия электродов между собой при их различных заглублениях и, следовательно, их положений относительно подины. Ее значение выводится из результатов, полученных для каждого сечения, и делением на два, так как влияние каждого электрода учитывается два раза. Аналогично определяются и другие интегральные характеристики режима работы.

Перед началом вычисления расчетная область печи разбивается на суперэлементы, а затем генерируется сетка конечных элементов на каждом из них. Путем объединения этих сеток получается сетка конечных элементов для всей расчетной области. После этого формируется массив для хранения систем уравнений.

Таким образом, разработанный алгоритм можно представить в следующем виде.

1. Создание системы суперэлементов для расчетной области.
2. Формирование сетки конечных элементов.
3. Формирование массивов для хранения систем уравнений.
4. Формирование системы уравнений для расчета распределения электрического потенциала.
5. Расчет распределения электрического потенциала.
6. Расчет распределения удельного энерговыделения.
7. Формирование системы уравнений для расчета распределения температуры в зоне расплава.
8. Расчет распределения температуры в зоне расплава.
9. Релаксация температуры в зоне расплава.
10. Формирование системы уравнений для расчета распределения концентрации реагента в зоне расплава.
11. Расчет распределения концентрации реагента в зоне расплава.
12. Формирование системы уравнений для расчета распределения потенциала газа.
13. Расчет распределения потенциала газа.
14. Расчет распределения скорости газа.
15. Формирование системы уравнений для расчета распределения потенциала шихты.
16. Расчет распределения потенциала шихты.
17. Расчет распределения скорости схода шихты.

18. Формирование системы уравнений для расчета распределения температуры газа в шихтовой зоне печи.

19. Расчет распределения температуры газа в шихтовой зоне печи.

20. Формирование системы уравнений для расчета распределения температуры шихты.

21. Расчет распределения температуры шихты.

Если при выполнении всех расчетов сходимость достигалась более чем за одну итерацию, переход к п. 3.

22. Расчет интегральных характеристик режима работы печи.

Информационная система расчета электротермических реакторов

Представленная математическая модель и соответствующий ей алгоритм позволили создать на языке программирования C++ информационную систему моделирования и технологического расчета электротермических установок, применяемых в различных отраслях металлургии. Программный комплекс может функционировать под различными семействами операционных систем, кроме Mac OS, так как создавался с применением кроссплатформенного комплекса Visual Code, позволяющего компилировать программу под большой спектр операционных систем.

Информационная система обладает многозадачным интерфейсом, позволяющим моделировать различные компоненты исследуемых реакторов. Пользователь может либо выбрать расчет только одного конкретного параметра, либо осуществить комплексный анализ электротермической установки. Для ввода исходных данных используется специальная форма (<http://www.swsys.ru/uploaded/image/2024-4/3.jpg>).

В меню начальные данные включают основные характеристики рудновосстановительных реакторов. При этом от пользователя не требуется введения всех необходимых параметров. Можно ввести только те, которые знает исследователь, или только те, которые ему нужны. В результате система выполнит расчеты на основе введенных данных и выдаст сообщение о невозможности проведения всех запрограммированных вычислений. При выборе расчета отдельного параметра можно отыскать необходимый параметр, в случае соответствия введенных данных система произведет расчет, в противном случае она укажет на недостаточность введенных данных. Система содержит

Список литературы

1. Tesser R., Santacesaria E. Revisiting the role of mass and heat transfer in gas–solid catalytic reactions. *Processes*, 2020, vol. 8, no. 12, art. 1599. doi: 10.3390/pr8121599.
2. Hu H.-P. Theoretical study of convection heat transfer and fluid dynamics in microchannels with arrayed micro-grooves. *Math. Problems in Engineering*, 2021, vol. 2021, art. 601509. doi: 10.1155/2021/3601509.
3. Антипина Е.В., Мустафина С.А., Антипин А.Ф. Программная реализация алгоритма поиска оптимального температурного режима каталитического процесса // Программные продукты и системы. 2022. Т. 35. № 1. С. 106–112. doi: 10.15827/0236-235X.137.106-112.
4. Пучков А.Ю., Лобанева Е.И., Кулыгин О.П. Алгоритм прогнозирования параметров системы переработки отходов апатит-нефелиновых руд // Прикладная информатика. 2022. Т. 17. № 1. С. 55–68. doi: 10.37791/2687-0649-2022-17-1-55-68.
5. Пучков А.Ю., Панченко С.В., Черновалова М.В. Программа моделирования теплофизических процессов в руднотермических печах при изменении управляющих воздействий // Программные продукты и системы. 2020. Т. 33. № 3. С. 523–529. doi: 10.15827/0236-235X.131.523-529.
6. Пучков А.Ю., Соколов А.М., Федотов В.В. Нейросетевой метод анализа процессов термической обработки окомкованного фосфатного рудного сырья // Прикладная информатика. 2022. Т. 17. № 5. С. 62–76. doi: 10.37791/2687-0649-2022-17-5-62-76.
7. Pedro A.A. Thermal monitoring of the electrode and bath in an ore-roasting furnace during downtime. *Steel in Translation*, 2013, vol. 43, pp. 110–112. doi: 10.3103/S0967091213020149.
8. Tian H., Pan J., Zhu D., Wang D., Xue Y. Utilization of ground sinter feed for oxidized pellet production and its effect on pellet consolidation and metallurgical properties. In: *Minerals, Metals and Materials Series. Proc. Int. Symposium on High-Temperature Metallurgical Processing*, 2020, pp. 857–866. doi: 10.1007/978-3-030-36540-0_76.
9. Орехов В.А., Бобков В.И., Панченко С.В. Разработка информационной системы расчета, накопления информации и паспортизации теплофизических свойств фосфоритов // Программные продукты и системы. 2022. Т. 35. № 3. С. 502–508. doi: 10.15827/0236-235X.139.502-508.
10. 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. doi: 10.17513/snt.39698.
11. Борисов В.В., Курилин С.П., Луферов В.С. Нечёткие реляционные когнитивные темпоральные модели для анализа и прогнозирования состояния сложных технических систем // Прикладная информатика. 2022. Т. 17. № 1. С. 27–38. doi: 10.37791/2687-0649-2022-17-1-27-38.
12. Курилин С.П., Соколов А.М., Прокимов Н.Н. Компьютерная программа для эксплуатационной диагностики электромеханических систем на основе топологического подхода // Прикладная информатика. 2021. Т. 16. № 4. С. 62–73. doi: 10.37791/2687-0649-2021-16-4-62-73.
13. Кувшинова А.Н., Цыганов А.В. Программный комплекс для компьютерного моделирования процессов параметрической идентификации математических моделей конвективно-диффузионного переноса // Программные продукты и системы. 2021. Т. 34. № 4. С. 639–648. doi: 10.15827/0236-235X.136.639-648.
14. Свириденко А.Б. Прямые мультипликативные методы для разреженных матриц. Несимметричные линейные системы // Компьютерные исследования и моделирование. 2016. Т. 8. № 6. С. 833–860. doi: 10.20537/2076-7633-2016-8-6-833-860.
15. Пирова А.Ю., Кудрявцев Н.Ю., Мееров И.Б. Экспериментальное сравнение алгоритмов в параллельном многоуровневом методе вложенных сечений // Вестн. ЮУрГУ. Сер.: Вычислительная математика и информатика. 2017. Т. 6. № 1. С. 38–55. doi: 10.14529/cmse170103.
16. Лебедева А.В., Рябов В.М. О численном решении систем линейных алгебраических уравнений с плохо обусловленными матрицами // Вестн. СПбГУ. Математика. Механика. Астрономия. 2019. Т. 6. № 4. С. 619–626. doi: 10.21638/11701/spbu01.2019.407.

**Mathematical model for calculating electrothermal reactor technological parameters:
Software implementation****Alexander A. Bykov ¹✉, Vladimir I. Bobkov ¹, Vladimir A. Orekhov ¹, Sergey V. Nezamaev ¹**¹ National Research University “MEI” in Smolensk, Smolensk, 214013, Russian Federation² First Mining Company, Moscow, 109004, Russian Federation**For citation**Bykov, A.A., Bobkov, V.I., Orekhov, V.A., Nezamaev, S.V. (2024) ‘Mathematical model for calculating electrothermal reactor technological parameters: Software implementation’, *Software & Systems*, 37(4), pp. 611–621 (in Russ.). doi: 10.15827/0236-235X.148.611-621

Article info

Received: 23.04.2024

After revision: 20.05.2024

Accepted: 27.05.2024

Abstract. The paper presents a mathematical model describing a possible method for calculating thermal mass processes. The model has become a basis for developing an iterative algorithm and creating an information system. The system simulates calculating technological parameters of electrothermal reactors used for ore phosphate raw material processing. The peculiarity of the developed model is that it takes into account the interrelation of zonal representation of the processes occurring in ore thermal furnaces. On the basis of thermal-hydraulic mode parameters it is possible to solve the problem of identifying raw materials entering the reaction zone. In the future, it will be possible to develop a system of process control automation in this zone in order to remove impurities. The created mathematical model allows taking into account the configuration of the internal structure of the investigated installations to understand the processes and phenomena occurring in them. When searching for a solution, the authors also used the model algorithm for the automatic construction of the finite element grid. They also proposed an algorithm for the finite element equation implementation with the matrix width optimization and the use of symmetry properties. The created software package allows automated calculations of operation modes of electrothermal ore-reduction reactors of any design, including those used in smelting phosphate raw materials. The information system database allows selecting an ore-reduction reactor model. It also allows calculating heat and mass exchange processes, as well as setting the system of effective coefficients for calculating the developed experimental reactor model. In this case, the program complex can calculate not only a complex of the ore thermal reactor, but also its individual characteristics. The multi-document interface visualizes calculation results in the field of isolines and velocity vectors of thermal mass processes.

Keywords: mathematical model, information system, software package, differential equations, iterative algorithm, computer modeling, numerical methods

Acknowledgements. The paper was carried out under the government assignment, project no. FSWF-2023-0012

References

1. Tesser, R., Santacesaria, E. (2020) 'Revisiting the role of mass and heat transfer in gas–solid catalytic reactions', *Processes*, 8(12), art. 1599. doi: 10.3390/pr8121599.
2. Hu, H.-P. (2021) 'Theoretical study of convection heat transfer and fluid dynamics in microchannels with arrayed microgrooves', *Math. Problems in Engineering*, 2021, art. 601509. doi: 10.1155/2021/3601509.
3. Antipina, E.V., Antipin, A.F., Mustafina, S.A. (2022) 'Software implementation of the algorithm for finding the optimal temperature condition of the catalytic process', *Software & Systems*, 35(1), pp. 106–112 (in Russ.). doi: 10.15827/0236-235X.137.106-112.
4. Puchkov, A.Yu., Lobaneva, E.I., Kultygin, O.P. (2022) 'Algorithm for predicting the parameters of a system for processing waste apatite-nepheline ores', *J. of Applied Inform.*, 17(1), pp. 55–68 (in Russ.). doi: 10.37791/2687-0649-2022-17-1-55-68.
5. Puchkov, A.Yu., Panchenko, S.V., Chernovalova, M.V. (2020) 'The simulation program for thermophysical processes in ore-thermal furnaces when changing the control actions', *Software & Systems*, 33(3), pp. 523–529 (in Russ.). doi: 10.15827/0236-235X.131.523-529.
6. Puchkov, A.Yu., Sokolov, A.M., Fedotov, V.V. (2022) 'Neural network analysis method of heat treatment processes of pelletized phosphate ore raw materials', *J. of Applied Inform.*, 17(5), pp. 62–76 (in Russ.). doi: 10.37791/2687-0649-2022-17-5-62-76.
7. Pedro, A.A. (2013) 'Thermal monitoring of the electrode and bath in an ore-roasting furnace during downtime', *Steel in Translation*, 43, pp. 110–112. doi: 10.3103/S0967091213020149.
8. Tian, H., Pan, J., Zhu, D., Wang, D., Xue, Y. (2020) 'Utilization of ground sinter feed for oxidized pellet production and its effect on pellet consolidation and metallurgical properties', in *Minerals, Metals and Materials Series. Proc. Int. Symposium on High-Temperature Metallurgical Processing*, pp. 857–866. doi: 10.1007/978-3-030-36540-0_76.
9. Orekhov, V.A., Bobkov, V.I., Panchenko, S.V. (2022) 'Information system for calculation, information accumulation and certification of phosphorite thermophysical properties', *Software & Systems*, 35(3), pp. 502–508 (in Russ.). doi: 10.15827/0236-235X.139.502-508.
10. Orekhov, V.A. (2023) 'Mathematical modeling of the processes of sludge formation in ore thermal furnaces during processing of phosphate ore raw', *Modern High Technolog.*, (7), pp. 78–86 (in Russ.). doi: 10.17513/snt.39698.
11. Borisov, V.V., Kurilin, S.P., Lufarov, V.S. (2022) 'Fuzzy relational cognitive temporal models for analyzing and state prediction of complex technical systems', *J. of Applied Informatics*, 17(1), pp. 27–38 (in Russ.). doi: 10.37791/2687-0649-2022-17-1-27-38.
12. Kurilin, S.P., Sokolov, A.M., Prokimnov, N.N. (2021) 'A computer program for electromechanical system operational diagnostics based on the topological approach', *J. of Applied Inform.*, 16(4), pp. 62–73 (in Russ.). doi: 10.37791/2687-0649-2021-16-4-62-73.
13. Kuvshinova, A.N., Tsyganov, A.V. (2021) 'A software package for computer modeling of parametric identification processes for mathematical models of convection-diffusion transfer', *Software & Systems*, 34(4), pp. 639–648 (in Russ.). doi: 10.15827/0236-235X.136.639-648.
14. Sviridenko, A.B. (2016) 'Direct multiplicative methods for sparse matrices. Unbalanced linear systems', *Computer Research and Modeling*, 8(6), pp. 833–860 (in Russ.).

15. Pirova, A.Yu., Kudryavstev, N.Yu., Meerov, I.B. (2017) 'Experimental evaluation of algorithms in the parallel multilevel nested dissection method', *Bull. of YuUrGU. Ser. Computational Math. and Software Eng.*, 6(1), pp. 38–55 (in Russ.). doi: 10.14529/cmse170103.

16. Lebedeva, A.V., Ryabov, V.M. (2019) 'On the numerical solution of system of linear algebraic equations with ill-conditioned matrices', *Bull. of SPbU. Math. Mechanics. Astronomy*, 6(4), pp. 619–626 (in Russ.). doi: 10.21638/11701/spbu01.2019.407.

Авторы

Быков Александр Александрович¹,

к.п.н, доцент, alex1by@mail.ru

Бобков Владимир Иванович¹, д.т.н.,

доцент, профессор, vovabobkoff@mail.ru

Орехов Владимир Александрович¹,

старший преподаватель, fundukoff@mail.ru

Незамаев Сергей Владимирович²,

генеральный директор, pgrk@armz.ru

Authors

Alexander A. Bykov¹, Cand. of Sci. (Education),

Associate Professor, alex1by@mail.ru

Vladimir I. Bobkov¹, Dr.Sci. (Engineering), Associate

Professor, Professor, vovabobkoff@mail.ru

Vladimir A. Orekhov¹, Senior Lecturer,

fundukoff@mail.ru

Sergey V. Nezamaev², Director General,

pgrk@armz.ru

¹ Национальный исследовательский университет «МЭИ» в г. Смоленске, г. Смоленск, 214013, Россия

² Первая горнорудная компания, г. Москва, 109004, Россия

¹ National Research University "MEI" in Smolensk, Smolensk, 214013, Russian Federation

² First Mining Company, Moscow, 109004, Russian Federation