

**В.Ф. Скороходов, Р.М. Никитин,
А.С. Степанникова, В.П. Якушкин**

ИНИЦИАЛИЗАЦИЯ УЗКИХ СЕПАРАЦИОННЫХ ФРАКЦИЙ ПРИ ПРОВЕДЕНИИ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА НАД МОДЕЛЬЮ ГЕТЕРОГЕННОЙ СИСТЕМЫ ПРОЦЕССА ФЛОТАЦИИ*

Предложен метод инициализации узких сепарационных фракций (УСФ – Narrow Separation Fractions (NSF)) при проведении вычислительного эксперимента над моделью гетерогенной системы процесса флотации (ГСПФ). Метод позволяет определять интегральные значения свойств компонентов твердой фазы питания флотации, которые интерпретируются как условия однозначности математической модели процесса флотации. В методе учтены распределение минеральных частиц по крупности, минеральный состав, степень раскрытия полезного минерала в сростках, содержание полезного компонента, оценка поверхностной энергии минеральных и полиминеральных частиц. Рассмотрены способы пошаговой проверки реализации алгоритма метода, основанные на возможности оценок плотности твердой фазы и содержания полезного компонента. Метод обеспечивает получение результатов математического моделирования процесса флотации в значениях содержания и извлечения полезного компонента и верификацию математической модели и технологической схемы реального производства или лабораторного эксперимента. Метод многократно апробирован при проведении вычислительных экспериментов, проводимых в Горном институте КНЦ РАН с использованием модуля CFD (Computational Fluid Dynamics) программного комплекса ANSYS Fluent [1–4].

Ключевые слова: флотация, узкая сепарационная фракция, математическая модель, вычислительный эксперимент, вычислительная гидродинамика, многоскоростной многофазный континуум, поверхностная энергия минеральных и полиминеральных частиц.

Современные подходы к аналитическому исследованию гидродинамики гетерогенных систем реализуются в построении адекватных и гибких математических моделей и основываются на двух различных областях знаний [5]. С одной стороны, это эмпирические данные, полученные в экспериментах с физическими моделями, с другой стороны, это современная вычислительная гидродинамика. Тенденция объединения этих областей формируется с развитием вычислительных ресурсов, становящихся все более мощными, производительными, дешевыми и доступными.

Созданию математической модели предшествует формализация объекта моделирования и выработка ряда аксиоматичных допущений о его свойствах в целом и о свойствах его отдельных компонентов [6].

Таковыми допущениями для гетерогенных систем являются [7]:

1. Размеры включений или неоднородностей в смеси во много раз больше молекулярно-кинетических (расстояний между молекулами, размеров кристаллической решетки, средних длин свободного пробега молекул).

* Работа выполнена в рамках Соглашения с Российским научным фондом № 14-17-00761.

2. Размеры указанных неоднородностей во много раз меньше расстояний, на которых осредненные или макроскопические параметры смеси или фаз меняются существенно.

В работе [8], посвященной многофазной гидродинамике, предложено описание гетерогенной среды как многофазного многоскоростного континуума (ММК), который представляет собой совокупность N континуумов, каждый из которых относится к своей фазе и заполняет один и тот же объем, занятый средой. Для каждой из фаз континуумов в каждой точке определяются плотность, скорость и другие параметры, относящиеся к своему континууму и своей фазе. Такой подход позволяет в каждой точке среды, в каждый момент времени определять значения величин концентраций и скоростей как магистральной (несущей, первичной) фазы, так и всех вторичных фаз.

Для многофазных систем понятие фазы более широко, чем отождествление ее с одним из агрегатных состояний вещества – газообразным, жидким или твердым. В общем случае, количество фаз неограниченно. Каждая из них должна отвечать определенным отличительным признакам. Очевидно, что этими признаками должны являться свойства различной природы, которые ответственны за характер взаимодействия данной фазы с другими фазами, с потоком в целом и с внешними воздействиями на поток [9].

Твердая фаза питания флотации представлена совокупностью минеральных и полиминеральных частиц, обладающих различными физическими и физико-химическими свойствами, значения величин которых имеют непрерывное распределение. Проведение вычислительного эксперимента над моделью ГСПФ требует определения конечного числа твердых дисперсных (вторичных) фаз с конечными значениями величин свойств частиц их составляющих. Кроме того, возможности постановки вычислительного эксперимента ограничены возможностями исполнительного устройства – компьютера, а точность расчета, определяющая успешную верификацию его результатов, зависит, в том числе, от количества вторичных фаз таким образом, что она повышается с увеличением их числа. Рост числа вторичных фаз приводит к резкому увеличению объема машинного кода задачи, объема баз данных вычислительного эксперимента и реального времени расчета.

В потоке флотационной пульпы можно выделить фазы, состоящие из твердых частиц принадлежащих разным классам крупности; отличающиеся степенью раскрытия полезного минерала; проявляющие избирательную интенсивность адсорбции к используемым реагентам и т.д. Таким образом, в его состав входят фазы, состоящие из частиц, принадлежащих к различным УСФ [10].

Вне зависимости от того является ли моделируемый процесс процессом, где вещество переходит из одной фазы в другую или нет, вычислительный эксперимент основывается на однозначном определении начальных и граничных условий. И, если граничные условия любого сепарационного процесса – это геометрия и механика сепарационной машины, внешние энергетические воздействия (например – электромагнитное поле, теплопередача и т.д.), массовый баланс, то начальные условия это, в первую очередь, физические и физико-химические свойства УСФ, участвующих в процессе.

Предлагаемый метод инициализации УСФ основывается на результатах гранулометрического и минералогического анализов, а также анализа степени раскрытия полезного минерала пробы твердой фазы питания моделируемого процесса флотации (проба) и позволяет определить интегральные значения величин

физических и физико-химических свойств, присущих каждой из них. К таким свойствам относятся: крупность частиц, удельный вес вещества, содержание полезного и иных (в зависимости от целей вычислительного эксперимента) компонентов, оценка поверхностной энергии частиц, представленных как чистым минералом, так и его сростковыми формами.

Гранулометрический состав пробы представлен набором классов крупности частиц:

$$g_1[-d_1 + d_2], g_2[-d_2 + d_3], \dots, g_{n-1}[-d_{n-1} + d_n], g_n[-d_n].$$

Каждый класс крупности в пробе характеризуется своим выходом:

$$\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_{n-1}, \gamma_n \cdot \sum_{i=1}^n \gamma_i = 1.$$

Минеральный состав пробы представлен набором минералов, распределенных в классах крупности. Этот набор упорядочен таким образом, что на первом месте в списке минералов находится минерал, представляющий наибольший исследовательский и (или) промышленный интерес:

$$m_1, m_2, \dots, m_{m-1}, m_m.$$

Распределение минералов в классах крупности учитывается весовым содержанием:

$$\beta_{m_1}^{g_1} \dots \beta_{m_1}^{g_n} \quad (*)$$

$$\beta_{m_m}^{g_1} \dots \beta_{m_m}^{g_n}$$

$$\sum_{j=1}^m \beta_{m_j}^{g_i} = 1. \quad \sum_{j=1}^m \sum_{i=1}^n (\beta_{m_j}^{g_i} \cdot \gamma_i) = 1.$$

Фазовый состав пробы (в данном контексте – состав сростковых форм) предполагает, что все частицы, входящие в пробу, в той или иной мере содержат включения минерала m_1 . В общем случае, удобно рассматривать все частицы пробы, как частицы, состоящие из минерала m_1 , но с различными по величине весового содержания (x) включениями сростков:

$x_1 [0; \delta_1]$ – частицы чистого минерала m_1

$x_2 [\delta_1; \delta_2],$

$x_{k-1} [\delta_{k-2}; \delta_{k-1}],$

$x_k [\delta_{k-1}; 1]$ – частицы со следами минерала m_1 .

Тогда строку (*) можно представить как

$$\beta_{m_1}^{g_1} \dots \beta_{m_1}^{g_n} \Leftrightarrow \begin{array}{c} \beta_{m_1 x_1}^{g_1} \dots \beta_{m_1 x_1}^{g_n} \\ \text{-----} \\ \beta_{m_1 x_k}^{g_1} \dots \beta_{m_1 x_k}^{g_n} \end{array}$$

$$\sum_{f=1}^k \beta_{m_1 x_f}^{g_1} = \beta_{m_1}^{g_1}, \dots, \sum_{f=1}^k \beta_{m_1 x_f}^{g_n} = \beta_{m_1}^{g_n}.$$

Общую форму результатов гранулометрического, минералогического и фазового анализов пробы можно представить в виде табл. 1.

Общая форма результатов гранулометрического, минералогического и фазового анализов пробы позволяет определить значение ее плотностью. Данная величина не используется при постановке вычислительного эксперимента, но позволяет осуществлять в рамках выполнения метода контроль над всеми его этапами. Очевидно, что переход от совокупности минеральных и полиминеральных частиц, обладающих различными свойствами, значения величин которых имеют непрерывное распределение, к УСФ с набором интегральных значений параметров, присущих каждой из них, не должен повлиять на изменение величины плотности пробы.

Для определения значения плотности пробы необходимо знать значения величин плотностей минералов ρ_{mj} , входящих в ее минеральный состав.

Формула для расчета плотности пробы имеет вид:

$$\rho_{solid} = \left(\sum_{f=1}^k \sum_{i=1}^n \frac{\beta_{m_i x_i}^{g_i} \cdot \gamma_i}{\rho_{m_i}} + \sum_{j=2}^m \sum_{i=1}^n \frac{\beta_{m_j}^{g_i} \cdot \gamma_i}{\rho_{m_j}} \right)^{-1} \quad (1)$$

Поскольку на последующих этапах выполнения метода, промежуточные результаты сводятся к виду, представленному в табл. 1, расчет плотности пробы по приведенной формуле (1) на каждом из этапов должен давать одинаковый результат.

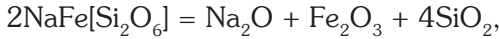
Процесс флотации направлен на повышение содержания того или иного минерала, содержащего полезный компонент, в концентрате. Полезным компонентом, таким образом, является не сам минерал, извлекаемый в концентрат, а один из составляющих его компонентов, как правило, – оксид. В случае апатитового концентрата, например, таковым является пятиокись фосфора, в случае нефелинового концентрата оксид алюминия – Al_2O_3 и т.д.

Таблица 1.

Содержание минералов и сростковых форм в пробе

	g_1	----	g_n	Итого:
	γ_1	----	γ_n	
$m_1 x_1$	$\beta_{m_1 x_1}^{g_1}$	----	$\beta_{m_1 x_1}^{g_n}$	$\sum_{j=1}^n (\beta_{m_1 x_1}^{g_j} \cdot \gamma_j)$
----	----	----	----	----
$m_1 x_k$	$\beta_{m_1 x_k}^{g_1}$	----	$\beta_{m_1 x_k}^{g_n}$	$\sum_{j=1}^n (\beta_{m_1 x_k}^{g_j} \cdot \gamma_j)$
m_2	$\beta_{m_2}^{g_1}$	----	$\beta_{m_2}^{g_n}$	$\sum_{i=1}^n (\beta_{m_2}^{g_i} \cdot \gamma_i)$
----	----	----	----	----
m_m	$\beta_{m_m}^{g_1}$	----	$\beta_{m_m}^{g_n}$	$\sum_{i=1}^n (\beta_{m_m}^{g_i} \cdot \gamma_i)$
Итого:	$\sum_{f=1}^k \beta_{m_f x_f}^{g_1} + \sum_{j=2}^m \beta_{m_j}^{g_1} = 1$	----	$\sum_{f=1}^k \beta_{m_f x_f}^{g_n} + \sum_{j=2}^m \beta_{m_j}^{g_n} = 1$	$\sum_{f=1}^k \sum_{i=1}^n (\beta_{m_f x_f}^{g_i} \cdot \gamma_i) + \sum_{j=2}^m \sum_{i=1}^n (\beta_{m_j}^{g_i} \cdot \gamma_i) = 1$

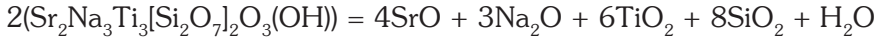
Расчет весового содержания полезного компонента в отдельных минералах и в питании флотации в целом основан на том, что каждый минерал можно представить как набор оксидов. Например, для эгирина такой набор имеет вид:



для сфена:



для лампрофиллита:

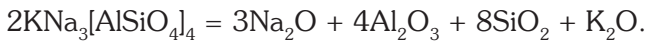


и т.д.

Для реализации метода введем следующие обозначения:

- a_j – первый коэффициент, используемый в разложении химической формулы j -го минерала на оксиды. Например, для эгирина $a = 2$, для сфена $a = 1$, для лампрофиллита $a = 2$, и т.д.

- $b_\xi (1 \leq \xi \leq \Xi)$ – вторые коэффициенты, показывающие сколько «молекул» того или иного оксида участвует в разложении химической формулы минерала. Рассмотрим для примера химическую формулу нефелина и соответствующий ей набор оксидов:



В примере $a = 2$; $b_1 = 3$; $b_2 = 4$; $b_3 = 8$; $b_4 = 1$.

- Ξ – полное количество различных оксидов, входящих в различных минералах в пробу.

- μ_ξ – молекулярная масса ξ -го оксида.
- M_j – молекулярная масса j -го минерала.

Тогда весовое содержание ξ -го оксида в j -ом минерале можно рассчитать по формуле:

$$\beta_\xi^j = \frac{b_\xi^j \cdot \mu_\xi}{a_j \cdot M_j} \cdot \sum_{\xi=1}^{\Xi} \beta_\xi^j = 1. \quad (2)$$

Используя формулу (2), расчет весового содержания оксида в питании флотации в целом можно осуществить по формуле:

$$\beta_\xi^{\text{solid}} = \sum_{j=1}^m \left(\beta_\xi^j \cdot \sum_{i=1}^n (\beta_{m_j}^{g_i} \cdot \gamma_i) \right) \cdot \sum_{\xi=1}^{\Xi} \beta_\xi^{\text{solid}} = 1. \quad (3)$$

Очевидно, что УСФ можно сформировать, группируя ближайшие столбцы и строки табл. 1. Тогда соответственно УСФ будут размешены в более широкие классы крупности и обобщенные сrostковые формы. Алгоритм такого преобразования для сведения табл. 1 к размеру, например, 3×3 можно представить следующим образом:

- Объединим набор классов крупности в три группы. Тогда

$$g_1^* \left[-d_1 + d_{n-\Delta_1} \right], \quad g_2^* \left[-d_{n-\Delta_1} + d_{n-\Delta_2} \right], \quad g_3^* \left[-d_{n-\Delta_2} \right],$$

и

$$\gamma_1^* = \sum_{i=1}^{n-\Delta_1-1} \gamma_i; \quad \gamma_2^* = \sum_{i=n-\Delta_1}^{n-\Delta_2-1} \gamma_i; \quad \gamma_3^* = \sum_{i=n-\Delta_2}^n \gamma_i \cdot \sum_{i=1}^3 \gamma_i^* = 1.$$

• Сгруппируем все частицы, составляющие твердое пробы, как частицы, состоящие из минерала m_1 , но с различными по величине весового содержания (x^*) включениями сростков таким образом, что:

$x_1^* [0; \delta_1^*]$ – частицы чистого минерала m_1 ,

$x_2^* [\delta_1^*; \delta_2^*]$ – частицы сростковых форм минерала m_1 ,

$x_3^* [\delta_2^*; 1]$ – частицы со следами минерала m_1 .

Очевидно, что

$$\delta_1^* = \delta_1, \quad \delta_2^* = \delta_{k-1}.$$

На данном этапе можно выделить первые три УСФ, состоящие из частиц чистого минерала m_1 :

NSF₁: Группа крупности g_1^* , выход группы крупности γ_1^* , содержание в группе крупности $\beta_{m_1 x_1}^{g_1^*}$, плотность ρ_{m_1} , весовое содержание ξ -го оксида

$$\beta_{\xi}^1 = \frac{b_{\xi}^1 \cdot \mu_{\xi}}{a_1 \cdot M_1}.$$

Размер частиц, входящих во фракцию осуществим следующим способом:

$$d_1^* = \sum_{i=1}^{n-\Delta_1-1} \left(\frac{d_i + d_{i+1}}{2} \cdot \frac{\gamma_i}{\gamma_1^*} \right).$$

NSF₂: Группа крупности g_2^* , выход группы крупности γ_2^* , содержание в группе крупности $\beta_{m_1 x_1}^{g_2^*}$, плотность ρ_{m_1} , весовое содержание ξ -го оксида β_{ξ}^1 , размер частиц:

$$d_2^* = \sum_{i=n-\Delta_1}^{n-\Delta_2-1} \left(\frac{d_i + d_{i+1}}{2} \cdot \frac{\gamma_i}{\gamma_1^*} \right).$$

NSF₃: Группа крупности g_3^* , выход группы крупности γ_3^* , содержание в группе крупности $\beta_{m_1 x_1}^{g_3^*}$, плотность ρ_{m_1} , весовое содержание ξ -го оксида β_{ξ}^1 , размер частиц:

$$d_3^* = \sum_{i=n-\Delta_2}^n \left(\frac{d_i + d_{i+1}}{2} \cdot \frac{\gamma_i}{\gamma_1^*} \right).$$

Для d_{n+1}^* отметим, что $d_{n+1}^* = 0$. Далее:

• Определим среднее значение диапазона $[\delta_1^*; \delta_2^*]$:

$$\overline{\delta_{1/2}^*} = \frac{\delta_1^* + \delta_2^*}{2}.$$

• Для каждой группы крупности рассчитаем усредненную величину вхождения сростковой фазы в m_1 :

$$\beta_{m_1 x_2}^{g_1^* f} = \frac{\beta_{m_1 x_2}^{g_1^*} \cdot \overline{\delta_{1/2}^*}}{1 - \overline{\delta_{1/2}^*}}; \quad \beta_{m_1 x_2}^{g_2^* f} = \frac{\beta_{m_1 x_2}^{g_2^*} \cdot \overline{\delta_{1/2}^*}}{1 - \overline{\delta_{1/2}^*}}; \quad \beta_{m_1 x_2}^{g_3^* f} = \frac{\beta_{m_1 x_2}^{g_3^*} \cdot \overline{\delta_{1/2}^*}}{1 - \overline{\delta_{1/2}^*}}.$$

• Для каждой группы крупности рассчитаем полную величину содержания минералов сростковой фазы:

$$\sum_{j=2}^m \beta_{m_j}^{g_1^*}; \sum_{j=2}^m \beta_{m_j}^{g_2^*}; \sum_{j=2}^m \beta_{m_j}^{g_3^*}.$$

• Для каждой группы крупности и каждого минерала сростковой фазы рассчитаем величину его содержания в ней:

$$\beta_{m_j x_2}^{g_i^* f} = \beta_{m_j x_2}^{g_i^*} \cdot \beta_{m_1 x_2}^{g_i^* f} / \sum_{j=2}^m \beta_{m_j}^{g_i^*}.$$

• Для каждой группы крупности рассчитаем величину плотности сростковой фазы:

$$\rho_{2i} = \frac{\beta_{m_1 x_2}^{g_i^*} + \sum_{j=2}^m \beta_{m_j x_2}^{g_i^* f}}{\frac{\beta_{m_1 x_2}^{g_i^*}}{\rho_{m_1}} + \sum_{j=2}^m \frac{\beta_{m_j x_2}^{g_i^* f}}{\rho_{m_j}}}$$

• Для каждой группы крупности рассчитаем величину содержания ξ -го оксида в сростковой фазе:

$$\beta_{\xi}^{2i} = \frac{\beta_{m_1 x_2}^{g_i^*} \cdot \beta_{\xi}^1 + \sum_{j=2}^m \beta_{m_j x_2}^{g_i^* f} \cdot \beta_{\xi}^j}{\beta_{m_1 x_2}^{g_i^*} + \sum_{j=2}^m \beta_{m_j x_2}^{g_i^* f}}$$

На данном этапе можно выделить вторые три УСФ, состоящие из частиц сростковых форм минерала m_1^* :

NSF₄: Группа крупности g_1^* , выход группы крупности γ_1^* , содержание в группе крупности

$$\beta_{21} = \beta_{m_1 x_2}^{g_1^*} + \sum_{j=2}^m \beta_{m_j x_2}^{g_1^* f},$$

плотность ρ_{21} , весовое содержание ξ -го оксида β_{ξ}^{21} , размер частиц, входящих во фракцию d_1^* .

NSF₅: Группа крупности g_2^* , выход группы крупности γ_2^* , содержание в группе крупности

$$\beta_{22} = \beta_{m_1 x_2}^{g_2^*} + \sum_{j=2}^m \beta_{m_j x_2}^{g_2^* f},$$

плотность ρ_{22} , весовое содержание ξ -го оксида β_{ξ}^{22} , размер частиц, входящих во фракцию d_2^* .

NSF₆: Группа крупности g_3^* , выход группы крупности γ_3^* , содержание в группе крупности

$$\beta_{23} = \beta_{m_1 x_2}^{g_3^*} + \sum_{j=2}^m \beta_{m_j x_2}^{g_3^* f},$$

плотность ρ_{23} , весовое содержание ξ -го оксида β_{ξ}^{23} , размер частиц, входящих во фракцию d_3^* .

• Для каждой группы крупности и каждого минерала фазы, состоящей из частиц со следами минерала m_1^* , рассчитаем величину его содержания в ней:

$$\beta_{m_j x_3}^{g_i f} = \beta_{m_j}^{g_i} - \beta_{m_j x_2}^{g_i f}.$$

• Для каждой группы крупности рассчитаем величину плотности фазы, состоящей из частиц со следами минерала m_1 :

$$\rho_{3i} = \frac{\beta_{m_1 x_3}^{g_i} + \sum_{j=2}^m \beta_{m_j x_3}^{g_i f}}{\beta_{m_1 x_3}^{g_i} + \sum_{j=2}^m \frac{\beta_{m_j x_3}^{g_i f}}{\rho_{m_j}}}$$

• Для каждой группы крупности рассчитаем величину содержания ξ -го оксида в фазе, состоящей из частиц со следами минерала m_1 :

$$\beta_{\xi}^{3i} = \frac{\beta_{m_1 x_3}^{g_i} \cdot \beta_{\xi}^1 + \sum_{j=2}^m \beta_{m_j x_3}^{g_i f} \cdot \beta_{\xi}^j}{\beta_{m_1 x_3}^{g_i} + \sum_{j=2}^m \beta_{m_j x_3}^{g_i f}}$$

На данном этапе можно выделить оставшиеся три УСФ, состоящие из частиц со следами минерала m_1 :

NSF₇: Группа крупности g_1 , выход группы крупности γ_1 , содержание в группе крупности

$$\beta_{31} = \beta_{m_1 x_3}^{g_1} + \sum_{j=2}^m \beta_{m_j x_3}^{g_1 f},$$

плотность ρ_{31} , весовое содержание ξ -го оксида β_{ξ}^{31} , размер частиц, входящих во фракцию d_1 .

NSF₈: Группа крупности g_2 , выход группы крупности γ_2 , содержание в группе крупности

$$\beta_{32} = \beta_{m_1 x_3}^{g_2} + \sum_{j=2}^m \beta_{m_j x_3}^{g_2 f},$$

плотность ρ_{32} , весовое содержание ξ -го оксида β_{ξ}^{32} , размер частиц, входящих во фракцию d_2 .

NSF₉: Группа крупности g_3 , выход группы крупности γ_3 , содержание в группе крупности

$$\beta_{33} = \beta_{m_1 x_3}^{g_3} + \sum_{j=2}^m \beta_{m_j x_3}^{g_3 f},$$

плотность ρ_{33} , весовое содержание ξ -го оксида β_{ξ}^{33} , размер частиц, входящих во фракцию d_3 .

Введем обозначения для содержания фракций в группах крупности:

$$\beta_{m_1 x_1}^{g_1} = \beta_{11}, \quad \beta_{m_1 x_1}^{g_2} = \beta_{12}, \quad \beta_{m_1 x_1}^{g_3} = \beta_{13}.$$

Также: $\rho_{m1} = \rho_{11} = \rho_{12} = \rho_{13}$.

Результат преобразования целесообразно привести к виду табл. 1 (табл. 2) и выполнить проверку по параметру плотности пробы, используя формулу (6):

$$\rho_{solid} = \left(\sum_{j=1}^3 \sum_{i=1}^3 \frac{\beta_{ji} \cdot \gamma_i}{\rho_{ji}} \right)^{-1}. \quad (6)$$

Таблица 2

Содержание УСФ в пробе

	g_1^*	g_2^*	g_3^*	Итого
	γ_1^*	γ_2^*	γ_3^*	
$x_1^* [0; \delta_1^*]$	β_{11}	β_{12}	β_{13}	$\sum_{i=1}^3 (\beta_{1i} \cdot \gamma_i^*)$
$x_2^* [\delta_1^*; \delta_2^*]$	β_{21}	β_{22}	β_{23}	$\sum_{i=1}^3 (\beta_{2i} \cdot \gamma_i^*)$
$x_3^* [\delta_2^*; 1]$	β_{31}	β_{32}	β_{33}	$\sum_{i=1}^3 (\beta_{3i} \cdot \gamma_i^*)$
Итого:	$\sum_{j=1}^m \beta_{j1} = 1$	$\sum_{j=1}^m \beta_{j2} = 1$	$\sum_{j=1}^m \beta_{j3} = 1$	$\sum_{j=1}^3 \sum_{i=1}^3 (\beta_{ji} \cdot \gamma_i^*) = 1$

Поверхностная энергия частиц УСФ определяется из количественной оценки поверхностной энергии минеральных зерен по установленной связи между ее величиной и значениями энергии ионного взаимодействия в кристаллической решетке минерала. Такой подход основывается на геоэнергетической теории А.Е. Ферсмана [11] и работе В.В. Зуева и др. [12], посвященной кристаллоэнергетике и оценке свойств твердых материалов.

Геоэнергетическая теория А.Е. Ферсмана рассматривает энергию ионного взаимодействия в кристаллической решетке минерала, исходя из представлений о полном потенциале ионизации (энергетической константе, эк), присущем каждому входящему в решетку аниону или катиону.

Энергетические константы ионов, входящих в структуры кристаллических решеток минералов, содержащихся в частицах УСФ, могут быть определены с использованием данных о значениях энергетических констант ионов, приведенных в [13], и получены на основе методики расчета, приведенной в [14].

Формула, предложенная А.Е. Ферсманом, имеет вид:

$$U_v = 1071,5 \cdot \frac{\rho}{\mu} \sum_{i=1}^n \varepsilon_k j_i, \text{ кДж/см}^3, \quad (7)$$

где: U_v – объемная энергия ионного взаимодействия в кристаллической решетке минерала; 1071,5 – поправка на вклад ионов в энергию решетки минерала; ρ – плотность минерала, г/см³; μ – молярная масса минерала, г/моль; n – количество сортов ионов, входящих в решетку; ε_k – энергетическая константа иона i -го сорта; j_i – количество ионов i -го сорта.

В свою очередь исследования, проведенные в работе [12], показывают, что большинство физико-химических свойств минералов может быть количественно описано с позиций удельных значений энергии ионного взаимодействия в кристаллической решетке, и позволяют проводить расчеты поверхностной энергии минералов по линейной эмпирической зависимости

$$E_s = 0,0025 \cdot U_v + 0,3052, \text{ Дж/м}^2 \quad (8)$$

с достоверностью аппроксимации $R^2 = 0,8919$.

Таким образом, использование предложенного метода инициализации УСФ при проведении вычислительного эксперимента над моделью ГСПФ позволяет формулировать условия однозначности с учетом физических и физико-химических свойств компонентов твердой фазы питания флотации. Важным преимуществом метода является возможность учета процессов, происходящих на границах раздела фаз, для всех УСФ, обладающих различными инертными и поверхностными свойствами. Верификация результатов вычислительных экспериментов, проведенных с использованием данного метода, показала высокую степень корреляции с технологическими параметрами реализации флотационных процессов в лабораторных и промышленных условиях.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Скороходов В.Ф., Хохуля М.С., Опалев А.С., Бирюков В.В., Никитин Р.М. Применение методов вычислительной гидродинамики к исследованию и анализу процессов разделения минералов // Физико-технические проблемы разработки полезных ископаемых (ФТПРПИ). – 2013. – № 3. – С. 179–188.
2. Skorokhodov V.F., Khokhulya M.S., B.Ф., Opalev A.S., Biryukov V.V., Nikitin R.M. Computational Fluid Dynamics as the Research Tool for Minerals Separation Processes // Proceedings of 5-th Balkan Mining congress. 18–21 September 2013, Ohrid, Republic of Macedonia. – 2013. – p. 299–304.
3. Мельников Н.Н., Скороходов В.Ф., Месяц С.П. и др. Экологическая стратегия развития горнодобывающей отрасли // Горный журнал. – 2013. – № 12. – С. 109–116.
4. Скороходов В.Ф., Никитин Р.М., Якушкин В.П., Степанникова А.С. Исследование распределения минералов в продуктах флотации на основе математического аппарата вычислительной гидродинамики (на примере получения нефелинового концентрата) // Горный информационно-аналитический бюллетень. – 2014. – № 12. – С. 123–137.
5. Bauer M., Eigenberger G. Multiscale Modeling of Hydrodynamics, Mass Transfer and Reaction in Bubble Column Reactors // Chemical Engineering Science 56 (2001), p. 1067–1074.
6. Самарский А.А., Михайлов А.П. Математическое моделирование: Идеи. Методы. Примеры. – 2-е изд., испр. – М.: Физматлит, 2001. – 320 с.
7. Нигматулин Р.И. Динамика многофазных сред. Ч. 1. – М.: Наука, Гл. ред. физ. мат. лит, 1987. – 464 с.
8. Рахматулин Х.А. Основы газодинамики взаимопроникающих движений сжимаемых сред // Прикладная математика и механика. – 1956. – т. 20. – № 2. – С. 184–195.
9. ANSYS Fluent «Theory Guide», Release 12.1 // ANSYS, Inc. 2009, 816 p.
10. Тихонов О.Н. Теория сепарационных процессов. Учебное пособие. Ч. 1. – СПб.: Технический университет, 2003. – 102 с.
11. Ферсман А.Е. Геохимия. – М.-Л., ОНТИ, Химтеорет, 1936. – 355 с.
12. Зуев В.В., Поцелуева Л.Н., Гончаров Ю.Д. Кристаллоэнергетика как основа оценки свойств твердотельных материалов. – СПб, 2006. – 136 с.
13. Боккий Г.Б. Кристаллохимия. – М.: Недра. 1971. – 400 с.
14. Рабинович В.А., Хавин З.Я. Краткий химический справочник. – Л.: Химия, 1971. – 432 с. **ГИАБ**

КОРОТКО ОБ АВТОРАХ

Скороходов Владимир Федорович¹ – доктор технических наук, зав. лабораторией, e-mail: skorokhodov@goi.kolasc.net.ru

Никитин Роман Михайлович¹ – научный сотрудник, e-mail: remnik@yandex.ru,

Степанникова Анна Сергеевна¹ – аспирант, инженер, e-mail: 1990nuta2008@rambler.ru,

Якушкин Валерий Петрович – доцент, e-mail: robotron-04@mail.ru,

Московский государственный машиностроительный университет (МАМИ),

¹ Горный институт КНЦ РАН.

INITIALIZATION OF CLOSE-CUT SEPARATION FRACTIONS IN MODELING EXERCISE ON HETEROGENEOUS FLOTATION SYSTEM

Skorokhodov V.F.¹, Doctor of Technical Sciences, Head of Laboratory,
e-mail: skorokhodov@goi.kolasc.net.ru,

Nikitin R.M.¹, Researcher, e-mail: remnik@yandex.ru,

Stepannikova A.S.¹, Graduate Student, Engineer, e-mail: 1990nuta2008@rambler.ru,

Yakushkin V.P., Assistant Professor, e-mail: robotron-04@mail.ru,

Moscow State University of Mechanical Engineering (MAMI),

¹ Mining Institute of Kola Scientific Centre of Russian Academy of Sciences,
184209, Apatity, Russia.

The method has been proposed of initialization of narrow separation fractions while a computing experiment with a heterogenic flotation system model. The method allows determining integral values of components properties in a solid phase of flotation feeding. The values are interpreted as single-valued conditions for the mathematical flotation model. The method takes into account distribution of mineral particles by grading, mineral composition, degree of useful mineral liberation in intergrowth pieces, content of useful component, and assessment of surface energy of mineral and polymineral particles.

The approaches of step-by-step checking of the method's algorithm implementation have been considered based on possible estimations of solid phase density and content of useful component. The method provides obtaining results on mathematical modeling of flotation process in the terms of content and recovery of useful component and verification of the mathematical model and technological flowsheet of actual production or laboratory testing. The method has been approved multiply at different experiments performed in the Mining Institute KSC RAS with using the ANSYS Fluent software.

Key words: flotation, narrow separation fraction, mathematical model, computing test, computing hydrodynamics, multi-velocity multi-phased continuum, surface energy of mineral and polymineral particles.

ACKNOWLEDGEMENTS

The study was supported by the Russian Science Foundation, Agreement No. 14-17-00761.

REFERENCES

1. Skorokhodov V.F., Khokhulya M.S., Opalev A.S., Biryukov V.V., Nikitin R.M. *Fiziko-tehnicheskie problemy razrabotki poleznykh iskopaemykh*. 2013, no 3, pp. 179–188.
2. Skorokhodov V.F., Khokhulya M.S., B.Ф., Opalev A.S., Biryukov V.V., Nikitin R.M. Computational Fluid Dynamics as the Research Tool for Minerals Separation Processes. *Proceedings of 5-th Balkan Mining congress*. 18–21 September 2013, Ohrid, Republic of Macedonia. 2013. p. 299–304.
3. Mel'nikov N.N., Skorokhodov V.F., Mesyats S.P. *Gornyy zhurnal*. 2013, no 12, pp. 109–116.
4. Skorokhodov V.F., Nikitin R.M., Yakushkin V.P., Stepannikova A.S. *Gornyy informatsionno-analiticheskii byulleten'*. 2014, no 12, pp. 123–137.
5. Bauer M., Eigenberger G. Multiscale Modeling of Hydrodynamics, Mass Transfer and Reaction in Bubble Column Reactors. *Chemical Engineering Science*. 56 (2001), p. 1067–1074.
6. Samarskiy A.A., Mikhaylov A.P. *Matematicheskoe modelirovanie: Idei. Metody. Primery*. 2-e izd (Mathematical modeling: Ideas. Methods. Examples. 2nd edition), Moscow, Fizmatlit, 2001, 320 p.
7. Nigmatulin R.I. *Dinamika mnogofaznykh sred*. Ch. 1 (Dynamics of multiphase media, part 1), Moscow, Nauka, 1987, 464 p.
8. Rakhmatulin Kh.A. *Prikladnaya matematika i mekhanika*. 1956, vol. 20, no 2, pp. 184–195.
9. ANSYS Fluent «Theory Guide», Release 12.1. ANSYS, Inc. 2009, 816 p.
10. Tikhonov O.N. *Teoriya separatsionnykh protsessov*. Uchebnoe posobie. Ch. 1 (Theory of separation processes. Educational aid, part 1), Saint-Petersburg, Tekhnicheskii universitet, 2003, 102 p.
11. Fersman A.E. *Geokhimiya* (Geochemistry), Moscow-Leningrad, ONTI, Khimteoret, 1936, 355 p.
12. Zuev V.V., Potselueva L.N., Goncharov Yu.D. *Kristalloenergetika kak osnova otsenki svoystv tverdotel'nykh materialov* (Crystal energetics as the basis for assessment of properties of solid-state materials), Saint-Petersburg, 2006, 136 p.
13. Bokiy G.B. *Kristallokhimiya* (Crystal chemistry), Moscow, Nedra, 1971, 400 p.
14. Rabinovich V.A., Khavin Z.Ya. *Kratkiy khimicheskii spravochnik* (Quick-reference book on chemistry), Leningrad, Khimiya, 1971, 432 p.