

DOI: [https://doi.org/10.25140/2411-5363-2026-2\(44\)-366-388](https://doi.org/10.25140/2411-5363-2026-2(44)-366-388)

УДК 66.047.57:66.011.4:661.872.953:519.863

**Вячеслав Леонідович Кірний<sup>1</sup>, Микола Петрович Юхименко<sup>2</sup>**<sup>1</sup>аспірант кафедри хімічної інженерії

Сумський державний університет (Суми, Україна)

E-mail: [v.kirnyi@pohnp.sumdu.edu.ua](mailto:v.kirnyi@pohnp.sumdu.edu.ua). ORCID: <http://orcid.org/0000-0003-1490-0600><sup>2</sup>кандидат технічних наук, доцент кафедри хімічної інженерії

Сумський державний університет (Суми, Україна)

E-mail: [m.yukhymenko@pohnp.sumdu.edu.ua](mailto:m.yukhymenko@pohnp.sumdu.edu.ua). ORCID: <http://orcid.org/0000-0002-1405-1269>

## БАГАТОКРИТЕРІАЛЬНА ОПТИМІЗАЦІЯ ПРОЦЕСУ ДЕГІДРАТАЦІЇ ЗАЛІЗА(II) СУЛЬФАТ ГЕПТАГІДРАТУ В БАГАТОСЕКЦІЙНОМУ АПАРАТІ КИПЛЯЧОГО ШАРУ

Розроблено математичну модель процесу термічної дегідратації кристалогідратів на прикладі заліза(II) сульфат гептагідрату в горизонтальному багатосекційному апараті киплячого шару. Запропонована модель враховує кінетику реакції, термічну усадку частинок та їх винесення газовим потоком. Досліджено вплив теплових і гідродинамічних параметрів на ефективність процесу. За допомогою розробленого алгоритму визначено оптимальні режими подачі теплоносія по секціях. Доведено, що керування швидкістю та температурою газу по довжині апарата дозволяє мінімізувати енерговитрати та запобігти термічній деструкції цільового продукту.

**Ключові слова:** дегідратація; залізний купорос; киплячий шар; секціонований апарат; математичне моделювання; багатокритеріальна оптимізація.

Рис.: 7. Табл.: 1. Бібл.: 31.

**Актуальність теми дослідження.** Білий пігментний діоксид титану є одним із найважливіших неорганічних матеріалів у сучасній промисловості, світовий попит на який демонструє стабільне щорічне зростання. Попри інтенсивний розвиток хлоридної технології, сульфатний спосіб виробництва діоксиду титану досі утримує близько 45 % світових потужностей. Одним із головних недоліків цієї технології є утворення значних обсягів побічних відходів, домінуючу частку яких становить залізо(II) сульфат гептагідрат ( $\text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ ), відомий як залізний купорос. Зважаючи на багаторічну експлуатацію заводів, у світі накопичені значні обсяги залізного купоросу, що створює серйозні екологічні ризики у вигляді забруднення ґрунтів та ґрунтових вод кислотними стоками. Існують різні технологічні напрямки перероблення та валоризації відходів купоросу [1]. Основними промисловими сегментами є виробництво коагулянтів для очищення стічних вод та питної води, виробництво червоних, жовтих, чорних залізоокисних пігментів, цементна промисловість, сільське господарство та кормовиробництво, але вологий купорос схильний до злежування та малоприсадабний для точного дозування. Тому найбільш масовим та енергоефективним шляхом вирішення проблеми для багатьох сфер промисловості є термічна дегідратація до стабільної форми моногідрату сульфату заліза ( $\text{FeSO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ).

**Постановка проблеми.** Термічна дегідратація залізного купоросу є складним фізико-хімічним процесом через яскраво виражену термолабільність кристалогідрата при досягненні температури 64–68 °С [2]. Матеріал починає плавитися у власній кристалізаційній воді, що призводить до інтенсивної агломерації, налипання на стінки обладнання та повної зупинки технологічного процесу. Схожі механізми притаманні для широкого спектра промислових неорганічних кристалогідратів, наприклад, натрій сульфат декагідрату [3] ( $\text{Na}_2\text{SO}_4 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$ , сіль Глаубера), який інконгруентно плавиться у власній воді вже при 32,4 °С, магній сульфат гептагідрату ( $\text{MgSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ ) та мідь сульфат пентагідрату ( $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ ) [4]. Це накладає жорсткі обмеження на вибір гідродинамічного режиму та температурного профілю сушіння, вимагаючи точного контролю за кінетикою масо- та теплообміну.

Класичне апаратне оформлення процесу сушіння великотоннажних сипучих матеріалів часто базується на використанні конвективних барабанних сушарок. Однак для перероблення термолабільних кристалогідратів такі апарати виявляються малоефективними. Низький коефіцієнт заповнення барабана та тривалий час контакту матеріалу з

високотемпературними теплоносіями й нагрітими стінками неминуче призводять до локальних перегрівів, часткового плавлення матеріалу та утворення масивних налипань [5]. Ефективною альтернативою конвективному сушінню в перемішуваних шарах є метод фільтраційного сушіння у стаціонарному шарі [6]. Експериментальні дослідження гідродинаміки та кінетики процесу дегідратації залізного купоросу фільтраційним методом [7] довели ефективність цього підходу завдяки рівномірному пронизуванню нерухомого шару матеріалу тепловим агентом при жорстко контрольованих швидкостях та температурах. Метод гарантує збереження первинної кристалічної структури продукту без його агломерації. Важливою перевагою стаціонарного шару є також мінімізація механічної руйнації частинок та відсутність вторинного пилоутворення.

Водночас при проектуванні хіміко-технологічних систем для безперервного перероблення промислових обсягів матеріалу виникає потреба в інтенсифікації міжфазного обміну. У таких випадках широкого застосування набувають апарати з псевдозрідженим (киплячим) шаром [8]. Вони забезпечують максимально розвинену площу міжфазної поверхні та інтенсивне перемішування, що сприяє миттєвому вирівнюванню температурних градієнтів та запобігає локальним перегрівам частинок. Проте традиційні вертикальні циліндричні сушарки кипячого шару безперервної дії працюють у гідродинамічному режимі, наближеному до ідеального змішування для твердої фази [8]. Це зумовлює надзвичайно широкий розподіл часу перебування частинок (Residence time distribution, RTD) в апараті. Як наслідок, частина матеріалу залишає апарат передчасно у недосушеному стані, тоді як інша частина перебуває в зоні високих температур надто довго, зазнаючи термічної деструкції або небажаних фазових перетворень. Для забезпечення стабільної якості цільового продукту критично важливим є контроль часу перебування частинок та оптимізація профілю підведення теплоти. Оптимальним інженерним рішенням для таких систем є використання багатосекційних горизонтальних апаратів кипячого шару [9]. Завдяки секціонуванню поздовжній рух дисперсного матеріалу наближається до гідродинамічного режиму ідеального витіснення, що радикально звужує RTD дисперсної фази та гарантує рівномірність обробки всієї маси продукту. Крім того, наявність автономних газорозподільних камер дозволяє реалізувати зонний градієнтний підхід до термообробки: подавати теплоносії з різною температурою та швидкістю в кожну секцію. Це створює умови для «м'якої» дегідратації на початкових стадіях у зоні максимальної вологості, де ризик плавлення найвищий та інтенсивного досушування на фінальних етапах, що дозволяє максимізувати ексергетичну ефективність процесу та уникнути недоліків як перегріву, так і недосушування матеріалу.

**Аналіз останніх досліджень і публікацій.** Моделювання та оптимізація процесів сушіння у псевдозрідженому шарі є предметом інтенсивних досліджень. Незважаючи на значний прогрес у розумінні гідродинаміки та тепломасообміну дисперсних систем [8; 10], термообробка кристалогідратів, зокрема залізного купоросу, залишається складною інженерною задачею. Більшість існуючих математичних моделей сушіння зосереджена на процесах видалення вільної поверхневої або капілярно-зв'язаної вологи. Однак дегідратація кристалогідратів має принципово іншу фізико-хімічну природу – це ендотермічна хімічна реакція розкладання твердого тіла, кінетика якого супроводжується перебудовою кристалічної ґратки [4]. Сучасні кінетичні дослідження доводять, що використання спрощених емпіричних моделей швидкості сушіння для таких матеріалів призводить до критичних похибок у визначенні локальних температурних профілів та не дозволяє коректно передбачити момент фазового переходу плавлення [11]. Для адекватного опису таких систем необхідно застосування моделі стиснення ядра (Shrinking core model, SCM), яка враховує дифузійний термічний опір шару нижніх гідратів (скоринки), що формується на поверхні частинки [12].

Іншою проблемою є математичний опис безперервних апаратів киплячого шару. Основа 1D-моделювання таких систем представлена в роботі [13]. У ній показана можливість використання систем звичайних диференціальних рівнянь для розрахунку локальних параметрів. Для горизонтальних сушарок, де повздовжнє переміщення твердої фази мінімізується за рахунок геометрії або секціонування, виправданим є застосування моделі ідеального витіснення для матеріалу [9; 14]. У роботі [15] представлено 1D-модель витіснення для безперервного сушіння зерна та підтверджено її високу точність та низькі обчислювальні витрати порівняно з повноцінними 3D CFD-симуляціями. Проте слабким місцем існуючих 1D-моделей є статичний підхід до врахування полідисперсності та еволюції гранулометричного складу. У більшості інженерних розрахунків еквівалентний діаметр частинок приймається як статична константа [8]. Сучасні експериментальні дослідження, зокрема із застосуванням інфрачервоної термографії, доводять інтенсивну сегрегацію в полідисперсних шарах [16]. Внаслідок термічної усадки та винесення пилу газовим потоком дисперсний склад безперервно змінюється вздовж апарату. Для врахування цієї динаміки застосовуються [17] рівняння популяційного балансу (Population balance modeling, PBM), але їх інтеграція з жорсткою хімічною кінетикою вимагає значних обчислювальних ресурсів, що унеможливує використання таких моделей для ітераційної багатокритеріальної оптимізації режимів.

З іншого боку, сучасне проектування вимагає пошуку ефективних режимів на основі ексергетичного аналізу [5; 18], а у випадку багатосекційних апаратів, де профілі теплоносія можуть незалежно формуватись вздовж решітки, – розв'язання задачі багатокритеріальної оптимізації.

**Виділення недосліджених частин загальної проблеми.** Аналіз сучасних досліджень виявляє відсутність комплексних математичних інструментів, які б поєднували строгий фізико-хімічний опис процесу термообробки кристалогідратів з алгоритмами багатокритеріальної оптимізації в горизонтальному секціонованому апараті киплячого шару. Існує нагальна потреба в розробці дворівневих обчислювальних алгоритмів для секціонованих сушарок, першим рівнем (математичною основою) має слугувати 1D-модель з аналітичним розрахунком динамічної зміни гранулометричного складу, гідродинаміки киплячого шару, кінетики сушіння, що дозволить уникнути ресурсомістких PBM-розрахунків без втрати фізичної адекватності. Другим рівнем надбудови має стати еволюційний алгоритм оптимізації просторових теплових і гідродинамічних профілів.

**Мета дослідження** полягає в підвищенні масової та енергетичної ефективності процесу дегідратації заліза(II) сульфат гептагідрату в багатосекційному апараті киплячого шару шляхом розробки комплексної детермінованої 1D-математичної моделі та проведення багатокритеріальної оптимізації керуючих профілів тепломасообміну.

**Матеріали та методи досліджень.**

**Структура 1D-моделі та розрахункова схема апарата.** Розробка математичного забезпечення для розрахунку процесу термічної дегідратації полідисперсного залізного купоросу базується на одномірному 1D-підході. Фізичним об'єктом моделювання є горизонтальний апарат киплячого шару безперервної дії без внутрішніх фізичних перегородок. Згідно з результатами експериментальних досліджень (RTD-аналізу) розподілу часу перебування у горизонтальних псевдозріджених шарах [9; 17], рух дисперсного матеріалу в таких системах не може розглядатись як ідеальне витіснення. Тому гідродинамічна структура потоків у розробленій моделі прийнята наступною: для твердої фази в межах локального елементарного об'єму секції діє модель ідеального перемішування, що враховує інтенсивну циркуляцію частинок, рух сушильного агента крізь шар (по вертикальній осі «у») розглядається за моделлю ідеального витіснення. Важливою

конструктивною особливістю розрахункової схеми (рис. 1) є використання принципу аеродинамічного секціонування. Вздовж повздовжньої осі апарата (вісь «x») під газорозподільною решіткою передбачено наявність автономних камер. Це дозволяє формувати незалежні профілі швидкості  $U_{g,in}(x)$  та температури  $T_{g,in}(x)$  сушильного агента для різних зон апарата без встановлення фізичних перегородок у самому шарі матеріалу, які є джерелом небажаних застійних зон.

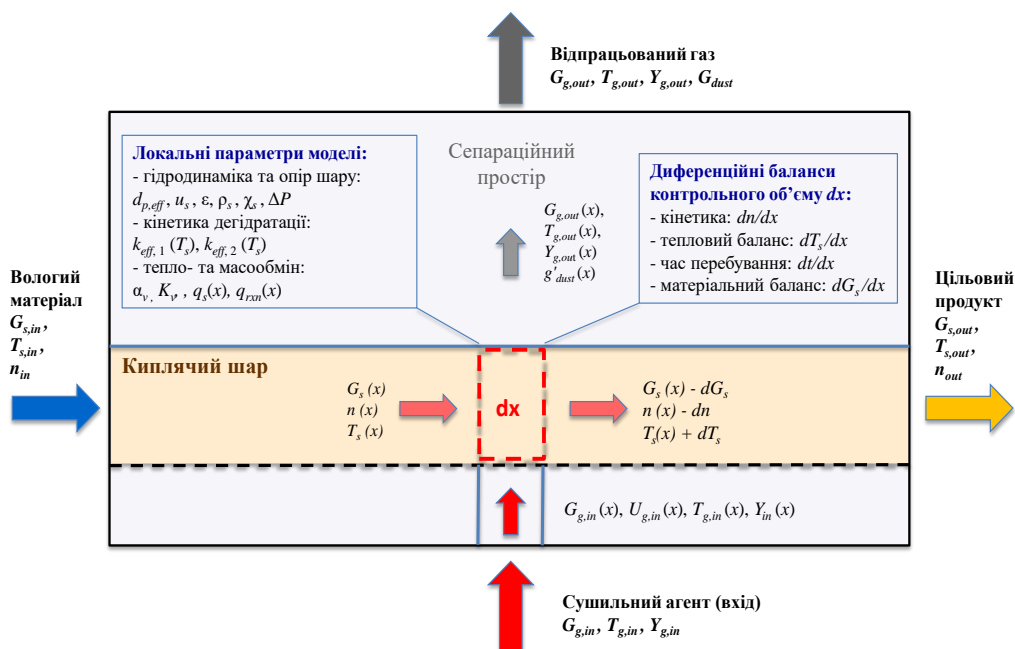


Рис. 1. Розрахункова схема апарата

Математичне ядро моделі базується на розв'язанні системи звичайних диференціальних рівнянь балансу маси та енергії, складених для елементарного контрольного об'єму шару довжиною  $dx$ . Система описує зміну ключових параметрів твердої фази вздовж апарата і включає:

1. Рівняння зміни вологовмісту матеріалу ( $dn / dx$ ) внаслідок хімічної реакції дегідратації;
2. Рівняння теплового балансу для визначення градієнта температури твердої фази ( $dT_s / dx$ ), що враховує теплоту, підведену сушильним агентом, та ендотермічний ефект фазових перетворень;
3. Рівняння масового балансу ( $dG / dx$ ), яке фіксує зміну масового потоку матеріалу за рахунок втрати вологи та винесення дрібних фракцій газовим потоком;
4. Кінетичне рівняння локального часу перебування ( $dt / dx$ ), що визначається швидкістю повздовжнього переміщення шару.

З погляду обчислювальної математики сформована система диференціальних рівнянь належить до класу жорстких систем. Жорсткість зумовлена специфікою хімічної кінетики процесу дегідратації: наявністю нелінійних експоненціальних членів з високими енергіями активації та різкими температурними тригерами фазових переходів. При досягненні матеріалом температур активації градієнти вологості та температури ( $dn / dx, dT_s / dx$ ) локально значно змінюються. Використання класичних явних методів інтегрування, наприклад, методів Рунге–Кутта, для таких систем приводить до втрати стійкості або вимагає нескінченно малого кроку розрахунку. Тому для чисельного розв'язання цієї системи застосовано алгоритм `ode15s` у середовищі MATLAB, заснований на формулах чисельного диференціювання. Це гарантує високу точність та обчислювальну стійкість моделі.

**Фізико-хімічна динаміка: TGA–кінетика та еволюція властивостей частинок.** Переважна більшість існуючих інженерних моделей, що описують конвективне сушіння у псевдозрідженому шарі, базується на використанні емпіричних або напівемпіричних рівнянь кінетики сушіння [19]. Такі підходи є фізично адекватними, однак, лише для процесів видалення вільної поверхневої або капілярно-зв'язаної вологи. У випадку з залізним купоросом волога є структурним елементом кристалічної ґратки. Відповідно, процес її видалення є не просто фазовим переходом першого роду (випаровуванням), а ендотермічною топохімічною реакцією розкладання твердого тіла. Тому базою для математичного опису кінетики масообміну в розробленій моделі слугують результати термогравіметричного аналізу (TGA), які дозволяють застосувати суворі рівняння макрокінетики [11].

Згідно з даними диференційної скануючої калориметрії (DSC) та TGA, отриманими у роботі [20], термічна дегідратація гептагідрату сульфату заліза до цільового моногідрату протікає у дві послідовні стехіометричні стадії з утворенням проміжного тетрагідрату:

1.  $\text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{FeSO}_4 \cdot 4\text{H}_2\text{O} + 3\text{H}_2\text{O} \uparrow$
2.  $\text{FeSO}_4 \cdot 4\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{FeSO}_4 \cdot 1\text{H}_2\text{O} + 3\text{H}_2\text{O} \uparrow$

Швидкість зміни вологовмісту матеріалу  $n$  у часі описується кінетичним рівнянням першого порядку відносно рушійної сили [20]:

$$\frac{dn}{dt} = -k_{eff}(T_s)(n - n_{eq}),$$

де  $n$  – поточний вологовміст матеріалу, моль  $\text{H}_2\text{O}$  / моль  $\text{FeSO}_4$ ;

$t$  – час процесу, с;

$-k_{eff}(T_s)$  – ефективна константа швидкості реакції,  $\text{с}^{-1}$ , яка залежить від температури твердої фази  $T_s$ , К;

$n_{eq}$  – рівноважний вологовміст матеріалу, моль / моль.

Ефективна константа швидкості реакції підпорядковується закону Арреніуса. Для першої стадії при  $n > 4$  процес лімітується енергією активації відриву перших трьох молекул води [20]:

$$k_{eff} = k_1 \exp\left(-\frac{E_{a1}}{RT_s}\right),$$

де  $k_1$  – передекспоненційний множник першої стадії,  $\text{с}^{-1}$ ;

$E_{a1}$  – енергія активації першої стадії, кДж / моль;

$R$  – універсальна газова стала,  $R = 8,314$  Дж / (моль · К).

Перехід до другої стадії вимагає розриву міцніших координаційних зв'язків молекул води з іоном  $\text{Fe}^{2+}$ , що супроводжується зростанням енергії активації  $E_{a2}$  [20]. Фізично ця стадія інтенсифікується лише після досягнення матеріалом температури активації  $T_{act2}$  [20].

Для уникнення математичної жорсткості, пов'язаної з розривами функцій, застосовано гладкий температурний перехід:

$$k_{eff} = k_2 \exp\left(-\frac{E_{a2}}{RT_s}\right) \cdot 0,5 \cdot \left[1 + \tanh\left(\frac{T_s - T_{act}}{\Delta T}\right)\right],$$

де  $\Delta T$  – діапазон згладжування, прийнято  $\Delta T = 1,0$  К.

Одночасно з хімічним перетворенням відбувається зміна теплофізичних та механічних властивостей частинок. У процесі втрати кристалізаційної вологи молярна маса частинки зменшується від  $M_7$  до  $M_1$ , істинна густина твердого каркаса нелінійно зростає від вихідного значення гептагідрату  $\rho_7$  до густини моногідрату  $\rho_1$  [21]. Поточний молярний об'єм твердої фази розраховується як:

$$V_c(n) = \frac{M_{\text{FeSO}_4} + n \cdot M_{\text{H}_2\text{O}}}{\rho_s(n)},$$

де  $M_{\text{FeSO}_4}$  – молярна маса безводного сульфату заліза, г/моль;

$M_{\text{H}_2\text{O}}$  – молярна маса води, г/моль.

$\rho_s(n)$  – локальна густина твердої фази як функція поточного вологовмісту, кг/м<sup>3</sup>.

Зменшення молярного об'єму призводить до макроскопічної термічної усадки частинок. Допущенням моделі є збереження цілісності частинок у процесі обробки. Не розглядаються зміна кількості частинок у шарі за рахунок механізму агломерації, злипання або вторинного пилоутворення внаслідок механічних факторів деструкції та стирання [8]. Згідно з класичною макрокінетичною теорією [12], виключно за умови відсутності руйнування та злипання гранул, правомірним є застосування принципу суворої пропорційності між об'ємною усадкою частинки та зміною її маси і густини внаслідок дегідратації [22]. Для математичного опису пропорційності введено коефіцієнт об'ємної усадки, що визначається відношенням поточного молярного об'єму до вихідного молярного об'єму гептагідрату:

$$\xi_{vol}(x) = \frac{(M_{\text{FeSO}_4} + n(x) \cdot M_{\text{H}_2\text{O}}) \cdot \rho_7}{(M_{\text{FeSO}_4} + 7 \cdot M_{\text{H}_2\text{O}}) \cdot \rho_s(x)}$$

де  $\xi_{vol}(x)$  – коефіцієнт об'ємної усадки частинки на координаті  $x$ .

Відповідно, на основі принципу пропорційності, локальний еквівалентний діаметр кожної індивідуальної частинки зменшується пропорційно коефіцієнту об'ємної усадки:

$$d_p(x) = d_{p,0} \cdot \sqrt[3]{\xi_{vol}(x)}.$$

Цей взаємозв'язок між втратою маси, зростанням густини та геометричною усадкою без зміни загальної популяції частинок формує базис для подальшого розрахунку аеродинамічних сил та швидкості витання в блоці гідродинаміки.

**Розподіл Розіна–Раммлера, межі псевдозрідження та винесення частинок з киллячого шару.** На початковому етапі розробки математичної моделі було здійснено спробу апроксимувати інтегральну криву розсіву за допомогою емпіричного полінома третього ступеня. Хоча поліноміальна функція забезпечувала високий коефіцієнт детермінації  $R^2 \approx 0,81$  при описі самої кривої, її використання в гідродинамічному розрахунку виявилось фізично некоректним. Інтегрування полінома для знаходження математичного сподівання (центру мас розподілу) призводило до штучного зсуву середнього діаметра в бік крупних фракцій. Розрахунковий середній діаметр сягав  $\approx 1,0$  мм. Це вимагало введення нефізичного поправочного коефіцієнта 0,61 для узгодження з реальною питомою поверхнею кристалів, що є неприпустимим для побудови детермінованих моделей. Тому, для узгодження з експериментальними даними ситового аналізу залізного купоросу в розробленій моделі базовий дисперсний склад апроксимовано двопараметричною функцією розподілу Розіна–Раммлера [23]. Цей розподіл дозволяє аналітично визначити початковий еквівалентний поверхнево-об'ємний діаметр  $d_{32}$ , який є ключовим параметром для розрахунку міжфазної поверхні обміну через повну Гамма-функцію:

$$d_{32} = \frac{d_{RR}}{\Gamma(1-1/k)},$$

де  $d_{RR}$  – масштабний параметр розподілу Розіна–Раммлера, м;

$k$  – індекс однорідності розподілу;

$\Gamma$  – повна Гамма-функція Ейлера.

Для розрахунку гідродинамічного стану шара на кожному кроці інтегрування використовуються локальні критерії Архімеда та Рейнольдса:

$$\text{Ar} = \frac{g \cdot d_{p,eff}^3 \cdot \rho_g \cdot (\rho_s - \rho_g)}{\mu_g^2}, \quad \text{Re} = \frac{d_{p,eff} \cdot U_g \cdot \rho_g}{\mu_g}.$$

Для визначення меж гідродинамічної стійкості важливим є розрахунок швидкості початку псевдозрідження  $U_{mf}$ . Цей параметр визначає нижню межу робочої швидкості газу, за якої шар переходить із нерухомого стану в псевдозріджений. Критерій Рейнольдса для початку псевдозрідження обчислюється на основі поточного критерію Архімеда за класичною напівемпіричною залежністю Вен-Ю [8]:

$$Re_{mf} = \sqrt{C_1^2 + C_2 \cdot Ar} - C_1,$$

де  $C_1, C_2$  –емпіричні константи рівняння Вен-Ю, для широкого спектра дисперсних матеріалів,  $C_1 = 33,7, C_2 = 0,0408$  [3].

На основі  $Re_{mf}$  визначається локальна швидкість початку псевдозрідження:

$$U_{mf} = \frac{Re_{mf} \cdot \mu_g}{d_{p,eff} \cdot \rho_g}.$$

Поточна поризність активного псевдозрідженого шару обчислюється за критеріальним рівнянням Годеса, яке довело надійність для полідисперсних систем при різних режимах кипіння:

$$\varepsilon = \left( \frac{18Re + 0,36Re^2}{Ar} \right)^{0,21}.$$

Механізм винесення частинок у моделі описано залежностями [24]:

$$Re_t = \frac{Ar_{cr}}{18 + 0,61\sqrt{Ar_{cr}}}, U_t = \frac{Re_t \cdot \mu_g}{d_{cr} \cdot \rho_g},$$

де  $d_{cr}$  – критичний діаметр частинки, що виноситься потоком, м.

Однак використання лише локального значення  $d_{cr}$  є помилковим в умовах змінного профілю швидкостей та безперервної втрати маси частинками внаслідок сушіння. Для розв’язання цієї проблеми в алгоритм інтегровано логіку «пам’яті» газового потоку. Фактичний діаметр відсікання  $d_{cut}$ , який формує усічену функцію розподілу, визначається оператором максимуму між здатністю потоку винести частинку на вході в апарат та його локальною здатністю з урахування об’ємної усадки частинки  $\xi_{vol}$ :

$$d_{cut}(x) = \max \left( d_{cr,in}, \frac{d_{cr}(x)}{\xi_{vol}(x)} \right).$$

Моделювання таких динамічних систем вимагає застосування ресурсомістких рівнянь популяційного балансу [25]. У представленій моделі застосовано аналітичний перерахунок зсунутого діаметра  $d_{32}$ . Відсікання лівого (дрібнодисперсного) хвоста функції Розіна–Раммлера по межі  $d_{cut}$  дозволяє визначити новий ефективний  $d_{32}^{rem}$  через інтегрування залишку функції розподілу за допомогою неповної верхньої Гамма-функції:

$$d_{32}^{rem} = d_{RR} \frac{\exp(-t_{cut})}{\Gamma(1-1/k, t_{cut})},$$

де  $d_{32}^{rem}$  – ефективний діаметр для залишкової (невинесеної) маси матеріалу, м;  
 $t_{cut}$  – безрозмірна межа відсікання винесеної фракції,  $t_{cut} = (d_{cut}/d_{RR})^k$ .

Остаточний ефективний геометричний діаметр у локальному об’ємі  $dx$ , який повертається в гідродинамічний та тепловий баланси становить:

$$d_{p,eff} = d_{32}^{rem} \cdot \sqrt[3]{\xi_{vol}(x)}.$$

**Тепломасообмін.** Інтенсивність процесів перенесення маси та теплоти між дисперсною фазою та сушильним агентом у псевдозрідженому шарі визначається локальними гідродинамічними умовами та теплофізичними властивостями фаз. У цій моделі локальні коефіцієнти міжфазного обміну розраховуються на основі безрозмірних критеріальних рі-

внянь, специфічних для киплячого шару [8]. Для розрахунку зовнішнього коефіцієнту масовіддачі використовується критерій Шервуда, а для розрахунку поверхневого коефіцієнта тепловіддачі – критерій Нуссельта. Обидва критерії є функціями режимних параметрів потоку, фізичних властивостей середовища та локальної порозності шару [8]:

$$\begin{aligned} \text{Nu} &= (7 - 10\varepsilon + 5\varepsilon^2) \cdot (1 + 0,7\text{Re}^{0,2}\text{Pr}^{0,33}) + (1,33 - 2,4\varepsilon + 1,2\varepsilon^2) \cdot \text{Re}^{0,7}\text{Pr}^{0,33}, \\ \text{Sh} &= (7 - 10\varepsilon + 5\varepsilon^2) \cdot (1 + 0,7\text{Re}^{0,2}\text{Sc}^{0,33}) + (1,33 - 2,4\varepsilon + 1,2\varepsilon^2) \cdot \text{Re}^{0,7}\text{Sc}^{0,33}, \end{aligned}$$

де  $\text{Nu}$  – локальний критерій Нуссельта,  $\text{Nu} = \frac{\alpha_f \cdot d_{p,eff}}{\lambda_g}$ ;

$$\text{Sh} \text{ – локальний критерій Шервуда, } \text{Sh} = \frac{\beta \cdot d_{p,eff}}{D_{AB}};$$

$$\text{Pr} \text{ – локальний критерій Прандтля для газової фази, } \text{Pr} = \frac{c_{p,g} \cdot \mu_g}{\lambda_g};$$

$$\text{Sc} \text{ – локальний критерій Шмідта для газової фази, } \text{Sc} = \frac{\mu_g}{\rho_g \cdot D_{AB}};$$

$\alpha_f$  – поверхневий коефіцієнт тепловіддачі від газу до поверхні частинки, Вт / (м<sup>2</sup>·К);

$\beta$  – поверхневий коефіцієнт масовіддачі, м/с;

$\lambda_g$  – коефіцієнт теплопровідності газу, Вт / (м·К);

$D_{AB}$  – коефіцієнт дифузії водяної пари у повітрі, м<sup>2</sup>/с.

Особливістю дегідратації є формування на поверхні частинок шару твердого продукту реакції. Оскільки цільовим продуктом процесу є моногідрат сульфату заліза, а не повністю безводна сіль – ангідрит, процес розкладання в математичній моделі зупиняється на стадії формування стабільної кристалічної структури моногідрату. Для адекватного математичного опису для цього застосовано концепцію стиснення частинки SCM. Згідно з цією моделлю реакція дегідратації відбувається на фронті поділу фаз між непрореагованим гідратним ядром та утвореною пористою скоринкою моногідрату. Ключовим припущенням розробленого математичного алгоритму є те, що утворення скоринки моногідрату не змінює параметри самої хімічної кінетики і рівняння Арреніуса залишаються незмінними. Однак цей шар створює суттєвий додатковий термічний опір для підведення тепла до зони реакції [22]. Вплив цього термічного опору враховується шляхом введення ефективного коефіцієнта теплопередачі  $\alpha_{eff}$ , який лімітується значенням критерію Біо для твердої фази:

$$\text{Bi} = \frac{\alpha_f \left( \frac{d_{p,eff}}{2} \right)}{\lambda_s},$$

де  $\text{Bi}$  – критерій Біо, що характеризує співвідношення між термічним опором твердого тіла та термічним опором пограничного шару газу;

$\lambda_s$  – теплопровідність моногідрату, Вт / (м·К);

Ефективний коефіцієнт теплопередачі розраховується за рівнянням для сферичної частинки з оболонкою:

$$\alpha_{eff} = \frac{\alpha_f}{1 + \text{Bi} \left( \frac{1}{\xi_{core}} - 1 \right)},$$

де  $\xi_{core}$  – безрозмірний радіус непрореагованого гідратного ядра.

Значення  $\xi_{core}$  динамічно змінюється від 1 на вході в апарат до нуля при повному перетворенні на моногідрат пропорційно ступеню протікання хімічної реакції. Чим товщою стає скоринка моногідрату, тим більше ефективний коефіцієнт  $\alpha_{eff}$  відхиляється від ідеального поверхневого  $\alpha_f$ , що фізично уповільнює процес нагрівання ядра.

Отримані значення ефективного коефіцієнта теплопередачі та коефіцієнта масовіддачі перераховуються в об'ємні коефіцієнти обміну  $\alpha_v$ ,  $K_v$  з урахуванням питомої міжфазної поверхні полідисперсного шару  $a_v = \frac{6 \cdot (1-\varepsilon)}{d_{p,eff} \cdot \varphi}$ . Ці об'ємні коефіцієнти інтегруються у диференціальні баланси математичної системи для розрахунку локальних температурних та концентраційних градієнтів.

**Блок диференціальних балансів та розрахунку енергетичних потоків.** Математична основа являє собою систему звичайних диференціальних рівнянь, яка інтегрує локальні гідродинамічні, кінетичні, теплофізичні параметри у єдиний баланс елементарного контрольованого об'єму  $dx$  вздовж осі апарата. Для замикання системи рівнянь енергії необхідно розрахувати динамічну теплоємність твердої фази. Оскільки матеріал є сумішшю безводного сульфату заліза та кристалізаційної вологи, його локальна молярна теплоємність  $c_{p,mol}(x)$  обчислюється за правилом адитивності Неймана–Коппа для твердих тіл [3]:

$$c_{p,mol}(x) = c_{p,anh} + n(x) \cdot c_{p,w},$$

де  $c_{p,mol}(x)$  – поточна молярна теплоємність кристалогідрата, Дж/(моль·К);  
 $c_{p,anh}$  – молярна теплоємність безводного сульфату заліза, Дж/(моль·К);  
 $c_{p,w}$  – молярна теплоємність зв'язаної кристалізаційної води, Дж/(моль·К);

Відповідно, питома масова теплоємність твердої фази  $c_{p,s}(x)$  у кожному перерізі становить:

$$c_{p,s}(x) = c_{p,mol}(x) / M_c(x),$$

де  $M_c(x)$  – поточна молярна маса гідрату, кг/моль.

Для визначення ефективного локального теплового потоку, що передається від газу до частинок на ділянці  $dx$ , застосовано метод числа одиниць перенесення [26]:

$$NTU(x) = \frac{\alpha_v(x)H}{\dot{m}'_g(x)c_{p,g}},$$

де  $NTU(x)$  – локальне число одиниць перенесення;  
 $\alpha_v(x)$  – об'ємний ефективний коефіцієнт теплопередачі,  $\alpha_v = \alpha_{eff} \cdot a_v$ , Вт / (м<sup>3</sup>·К);  
 $H$  – висота псевдозрідженого шару, м;  
 $\dot{m}'_g(x)$  – питома масова витрата сушильного агента на одиницю площі, кг / (м<sup>3</sup>·с);

Теплова ефективність шару (термічний ККД локального об'єму) визначається як:

$$\eta_{th}(x) = 1 - \exp(-NTU(x)).$$

Питомий лінійний тепловий потік, що передається твердій фазі від сушильного агента на ділянці  $dx$ , в моделі розраховується рівнянням:

$$q_s(x) = \dot{m}_{g,L} \cdot c_{p,g} \cdot [T_{g,in}(x) - T_s(x)] \cdot \eta_{th}(x),$$

де  $\dot{m}_{g,L}$  – масова витрата газу на 1 погонний метр довжини апарату, кг / (м·с);  
 $T_{g,in}(x)$  – температура сушильного агента на вході у поточній секції, К;  
 $T_s(x)$  – поточна температура твердої фази, К.

Паралельно з нагріванням відбувається інтенсивне поглинання теплоти хімічною реакцією дегідратації. Питома лінійна витрата теплоти на реакцію становить:

$$q_{rxn}(x) = F_s(x) \cdot \left| \frac{dn}{dx} \right| \cdot \Delta H_{rxn}(n),$$

де  $F_s(x)$  – локальна молярна витрата твердої фази, моль/с;  
 $\frac{dn}{dx}$  – градієнт вологовмісту за довжиною апарату, моль/(моль·м);

$\Delta H_{rxn}(n)$  – молярна ентальпія (тепловий ефект) реакції дегідратації для поточної стадії, яка включає енергію розриву координаційних зв'язків та приховану теплоту пароутворення води, Дж/(моль) [20].

Повна математична модель процесу зводиться до системи чотирьох зв'язних звичайних диференціальних рівнянь, які одночасно інтегруються вздовж координати  $x$ :

1. Рівняння масообміну (кінетика дегідратації). Для інтегрування в одновимірну стаціонарну модель часова похідна перетворюється на просторову вздовж осі « $x$ » через локальну швидкість поздовжнього руху твердої фази:

$$\frac{dn}{dx} = -\frac{k_{eff}(T_s)}{u_s(x)}(n - n_{eq}),$$

де  $x$  – поздовжня координата, м;

$u_s$  – локальна лінійна швидкість поздовжнього руху твердої фази у шарі, м/с.

2. Рівняння теплового балансу твердої фази:

$$\frac{dT_s}{dx} = \frac{q_s(x) - q_{rxn}(x)}{G_s(x) \cdot c_{p,s}(x)},$$

де  $G_s(x)$  – поточна масова витрата твердої фази, кг/с.

3. Рівняння матеріального балансу твердої фази з урахуванням винесення:

$$\frac{dG_s}{dx} = -G_s(x) \cdot \left| \frac{dn}{dx} \right| \cdot \frac{M_{H_2O}}{M_c} - g'_{dust}(x),$$

де  $g'_{dust}(x)$  – інтенсивність винесення пилу з шару на одиницю довжини, кг / (м·с).

4. Кінетичне рівняння локального часу перебування:

$$\frac{dt}{dx} = \frac{1}{u_s(x)} = \frac{\chi_s(x) \cdot B \cdot H}{G_s(x)},$$

де  $\chi_s(x)$  – масова концентрація частинок, кг / м<sup>3</sup>;

$B$  – ширина апарата, м.

Розв'язання сформованої системи рівнянь, що становить задачу Коші з початковими умовами при  $x=0$  ( $t=0$ ,  $n=7$ ,  $T_s=T_{in}$ ,  $G_s=G_{in}$ ), реалізовано в середовищі MATLAB при застосуванні алгоритму ode15s. Завершення інтегрування в точці  $x=L$  (де  $L$  – загальна довжина апарата) формує вихідний вектор характеристик цільового продукту, який передається на верхній рівень алгоритму в модуль багатокритеріальної оптимізації.

**Надбудова: алгоритм багатокритеріальної оптимізації на базі NSGA-II.** Сучасне проєктування хіміко-технологічних систем вимагає переходу від ітераційного емпіричного підбору параметрів до математичного синтезу оптимальних рішень. У розробленій дворівневій обчислювальній архітектурі система нелінійних диференціальних рівнянь виконує роль детермінованого математичного ядра нижнього рівня, який генерує просторові профілі процесу дегідратації для будь-яких закладених вихідних умов. Верхнім рівнем є надбудова багатокритеріальної оптимізації, яка реалізує глобальний пошук раціональних режимних параметрів у багатовимірному просторі на основі оцінки відгуку цільових функцій [27; 28]. Враховуючи конструктивні особливості аеродинамічно секціонованого горизонтального апарата керування процесом здійснюється не лише статичними параметрами на вході, а й формуванням безперервних поздовжніх профілів. Тому простором пошуку є багатовимірний вектор керуючих змінних  $X$ , який включає масове навантаження по сировині, початкові параметри теплоносія та поліноміальні коефіцієнти просторових профілів швидкості й температури:

$$X = [G_{in}, U_{in}, T_{in}, a_T, b_T, c_1, c_2],$$

де  $a_T$ ,  $b_T$  – коефіцієнти функції температурного профілю:

$$T_{g,in}(x) = T_{g,in}(0) - a_T \cdot x^{b_T};$$

$c_1, c_2$  – коефіцієнти параболічного профілю швидкості газу:

$$U_g(x) = U_g(0) - c_1 \cdot x + c_2 \cdot x^2.$$

Як критерії оптимальності обрано дві конкуруючі цільові функції, що відображають фундаментальний компроміс між інтенсифікацією виробництва та його енергетичною досконалістю.

Перша цільова функція спрямована на пошук режимів, які забезпечують максимальний вихід сухого цільового продукту моногідрату з одиниці об'єму апарата в одиницю часу. У термінах математичного програмування алгоритм мінімізує від'ємне значення продуктивності:

$$f_1(X) = -G_{out}(X) \rightarrow \min.$$

Друга цільова функція відображає сукупні витрати енергії на випаровування одиниці маси вологи. В алгоритм додатково інтегровано механічну потужність газодувок, зведених до єдиного енергетичного еквівалента [29]:

$$f_2(X) = q_{\Sigma} = \frac{Q_{s,\Sigma} + N}{W} \rightarrow \min,$$

де  $q_{\Sigma}$  – сумарні енерговитрати, кДж / кг випареної вологи;

$Q_{s,\Sigma}$  – загальний тепловий потік, витрачений на нагрівання сушильного агента в усіх секціях, кВт;

$W$  – загальна витрата видаленої в апараті кристалізаційної вологи, кг/с;

$N$  – ефективна механічна потужність приводів газодувок, кВт.

**Фізико-математичний конфлікт і термодинамічний аналіз.** Коректність постановки задачі гарантується наявністю фізичного антагонізму між першою та другою функцією. Збільшення подачі сировини для максимізації продуктивності вимагає інтенсифікації дуття та підняття температур. Проте, згідно з другим законом термодинаміки та ексергетичним аналізом процесів сушіння [3; 5], підняття температури і надмірне зростання швидкості газу призводять до зниження часу контакту фаз. Внаслідок цього сушильний агент залишає поверхню шару з високим залишковим тепловим потенціалом. Це супроводжується масштабним термічним знищенням ексергії через викид відпрацьованих газів в атмосферу [5] та зростанням механічної потужності вентиляторів. Як наслідок, інтенсифікація продуктивності неминуче призводить до різкого погіршення другого критерію – зростання питомих енерговитрат.

Оскільки цільові функції є конфліктуючими, а простір пошуку є багатовимірним, використання класичного методу сіткового сканування є обчислювально неможливим через розмірності. Для розв'язання цієї задачі застосовано швидкий алгоритм недомінованого сортування NSGA-II [30]. Перевага NSGA-II полягає у його здатності підтримувати високе різноманіття популяції рішень та застосуванню підходу, що запобігає втраті знайдених оптимальних точок при зміні поколінь. Еволюційний алгоритм стартує з популяції випадкових або інформованих векторів і шляхом ітераційних операцій генерує множину недомінованих рішень – фронт Парето. Кожна точка на фронті Парето представляє такий технологічний режим, за якого неможливо збільшити продуктивність апарата без одночасного погіршення енергетичної ефективності. Це створює строгий математичний баланс для прийняття остаточного інженерного рішення щодо робочих профілів у багатосекційному апараті.

**Вихідні фізико-хімічні та кінетичні параметри моделі.** Для забезпечення прозорості та можливості повного відтворення чисельних результатів математичного моделювання всі базові фізико-хімічні властивості матеріалу, кінетичні константи дегідратації та рівняння для розрахунку теплофізичних властивостей сушильного агента зведені в табл. 1.

Параметри гранулометричного складу залізного купоросу не є статичними апріорними даними і визначаються в розділі результатів на основі математичної обробки експериментальних даних ситового аналізу [21].

*Таблиця 1 – Фізико-хімічні властивості матеріалу, кінетичні константи дегідратації та теплофізичні властивості сушильного агента*

Параметр	Позначення	Значення / Рівняння	Джерело
1. Властивості твердої фази:			
Молярна маса безводного FeSO <sub>4</sub>	$M_{\text{FeSO}_4}$	151,91 г/моль	[2]
Молярна маса води	$M_{\text{H}_2\text{O}}$	18,015 г/моль	[2]
Істинна густина гептагідрату	$\rho_7$	1890 кг/м <sup>3</sup>	[2, 21]
Істинна густина моногідрату	$\rho_1$	3000 кг/м <sup>3</sup>	[2, 21]
Теплопровідність твердих частинок	$\lambda_s$	0,50 Вт/(м·К)	[31]
Молярна теплоємність безводного FeSO <sub>4</sub>	$c_{p,anh}$	92,05 Дж/(моль·К)	[3]
Молярна теплоємність зв'язаної води	$c_{p,w}$	44,30 Дж/(моль·К)	[3]
2. Кінетика дегідратації:			
Стадія 1:			
Енергія активації	$E_{a1}$	93,4 кДж/моль	[20]
Передекспоненційний множник	$k_1$	$\exp(24,5) \text{ c}^{-1}$	[20]
Молярна ентальпія реакції дегідратації	$\Delta H_{rxn,1}$	48,56 кДж/(моль води)	[20]
Стадія 2:			
Енергія активації	$E_{a2}$	111,8 кДж/моль	[20]
Передекспоненційний множник	$k_2$	$\exp(28,2) \text{ c}^{-1}$	[20]
Молярна ентальпія реакції дегідратації	$\Delta H_{rxn,2}$	60,13 кДж/(моль води)	[20]
Температура активації стадії 2	$T_{act2}$	363 К	[20]
Температура активації стадії 3	$T_{act3}$	≈493–523 К	[20]
3. Властивості газової фази (повітря):			
Динамічна в'язкість	$\mu_g(T)$	$1,8 \cdot 10^{-5} (T/293)^{0,7} \text{ Па} \cdot \text{с}$	[26]
Питома ізобарна теплоємність повітря	$c_{p,g}(T)$	$1005 + 0,2(T-293) \text{ Дж}/(\text{кг} \cdot \text{К})$	[26]
Коефіцієнт дифузії водяної пари в повітрі	$D_{AB}(T)$	$2,2 \cdot 10^{-5} (T/273)^{1,75} \text{ м}^2/\text{с}$	[26]
4. Геометричні характеристики фізичного об'єкта моделювання:			
Довжина x Ширина газорозподільної решітки	$L \times B$	1 x 0,1 м	Дані авторів
Висота шару матеріалу	$H$	0,1 м	

### Результати та обговорення.

**Апроксимація вихідного гранулометричного складу.** Основою для моделювання гідродинаміки псевдозрідження та процесів тепломасообміну залізного купоросу став математичний опис початкового гранулометричного складу. За результатами ситового аналізу вихідного матеріалу встановлено, що матеріал є полідисперсним з домінуючою масовою часткою фракції в діапазоні 0,3–0,8 мм [21]. Розподіл частинок у моделі описано двопараметричною функцією Розіна–Раммлера. На основі лінеаризації експериментальних даних у подвійних логарифмічних координатах визначено константи розподілу: масштабний параметр (розмір при якому залишок на ситі становить 36,8 %)  $d_{RR} = 0,813 \text{ мм}$  та індекс однорідності  $k = 2,188$ . Значення  $k > 2$  свідчить про відносно вузький спектр розмірів основної маси кристалів.

Застосування функції Розіна–Раммлера дозволило аналітично без використання емпіричних поправок розрахувати початковий еквівалентний діаметр  $d_{32}$ :

$$d_{32} = \frac{0,813 \cdot 10^{-3}}{\Gamma(1-1/2,188)} = 0,4965 \text{ мм.}$$

Отримане значення  $d_{32}$  узгоджується з результатами прямого розрахунку за експериментальними масовими частками на ситах [21]. Значення  $d_{32}$  було прийнято як базова точка відліку для подальшого розрахунку локальних критеріїв Ar, Re та питомої поверхні міжфазового обміну  $\alpha_v$ .

**Аналіз базового технологічного режиму, верифікація динаміки фазових перетворень.** Перед проведенням комплексного багатовимірного синтезу оптимальних керуючих впливів критично важливим етапом визначено верифікацію розробленої моделі на предмет фізичної адекватності. Було розраховано базовий технологічний режим роботи апарату загальною довжиною 1 м. Вихідна продуктивність по сирому матеріалу була зафіксована на рівні  $G_{s,in} = 7 \cdot 10^{-3}$  кг/с. З метою стрес-тестування диференційної системи на чутливість до просторових градієнтів профілі теплоносія були задані у вигляді штучних нелінійних функцій. Профіль температури сушильного агента під газорозподільною решіткою було задано у вигляді спадної параболи  $T_{g,in}(x) = 220 - 50x^2$  від 220 °С на вході до 170 °С на виході. Профіль фіктивної швидкості газу задано синусоїдальним характером  $U_g(x) = 1,3 - 0,4 \cdot \sin(\pi x)$ , що імітує різну інтенсивність дуття по довжині сушарки з примусовим мінімумом швидкості 0,9 м/с у центрі апарату ( $x = 0,5$  м). Просторові профілі ключових параметрів, згенеровані розрахунковим блоком моделі (рис. 2) демонструють нелінійний характер топохімічної дегідратації.

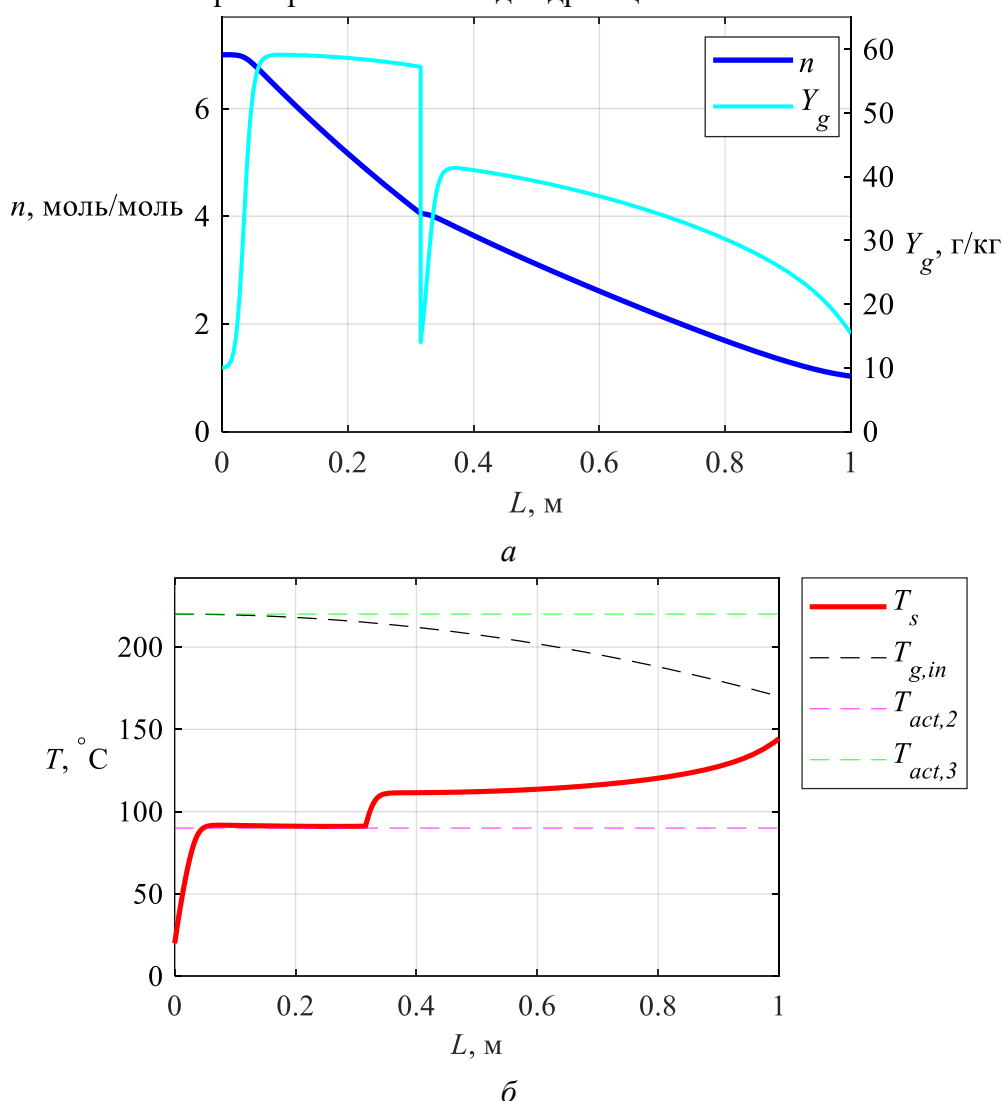


Рис. 2. Профілі для базового технологічного режиму:  
 а – вологовмісту матеріалу; б – температур фаз

На початковій ділянці апарату (до  $x \approx 0,35$ ) спостерігається інтенсивне падіння вологовмісту матеріалу  $n(x)$  від початкових 7,0 до 4,0 моль/моль. Ця зона характеризується перебігом першої стадії реакції, ентальпія якої становить 48,56 кДж/(моль випареної

води). Температурний профіль твердої фази у цій зоні зазнає різкого нагрівання від 20 °С до 90 °С, після чого фіксується на цьому рівні, демонструючи ефект термічного вирівнювання. Незважаючи на контакти з високотемпературним газом матеріал не перегрівается, оскільки підведений тепловий потік повністю поглинається потужним ендотермічним ефектом хімічної реакції. При зниженні вологовмісту нижче 4,0 активується друга стадія дегідратації ( $4\text{H}_2\text{O} \rightarrow 1\text{H}_2\text{O}$ ). Оскільки енергія активації цієї стадії значно вища ( $E_{a,2} = 111,8$  кДж/моль), а ентальпія реакції зростає до 60,13 кДж/(моль води), подальше видалення вологи вимагає вищих температур частинки. Температура матеріалу  $T_s$  починає плавно зростати досягаючи 112 °С на відмітці  $x = 0,35$  м. Розрахунковий кінцевий вологомист на виході з апарата для базової продуктивності становить 1,03 моль  $\text{H}_2\text{O}$ /моль  $\text{FeSO}_4$  при фінальній температурі продукту 142 °С. Матеріал плавно наближається до цільового стану моногідрату, при цьому реакція дегідратації природно сповільнюється завдяки зменшенню рушійної сили ( $n - 1$ ). Досягнутої температури абсолютно недостатньо для активації третьої стадії дегідратації ( $T_{act,3} \approx 220$  °С,  $E_{a,3} = 217,1$  кДж/моль), що верифікує здатність моделі прогнозувати безпечний режим без утворення пересушеного ангідриду.

Ключовим фактором, що лімітує швидкість процесу наприкінці апарата, є еволюція внутрішнього термічного опору частинки. Розрахунки показують, що у міру наближення вологовмісту до моногідрату, товщина пористої скоринки стає максимальною. Ефективна теплопередача всередину частинки гальмується, що пояснює асимптотичний характер кривої сушіння  $n(x)$  на фінальних секціях апарата і підтверджує фізичну адекватність моделі SCM.

Динаміка об'ємних коефіцієнтів тепло- та масообміну ілюструє цей перехідний механізм (рис. 3).

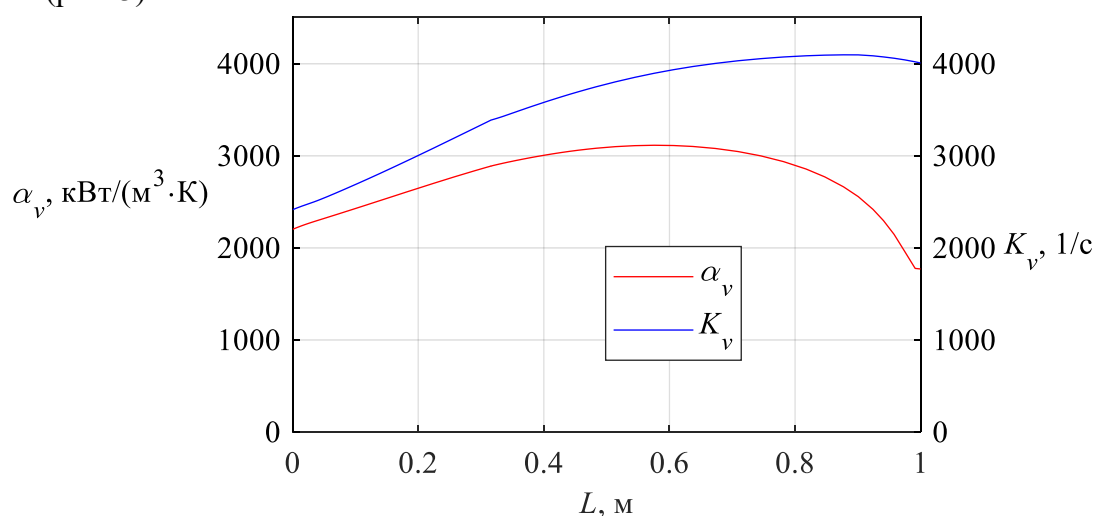


Рис. 3. Профілі об'ємних коефіцієнтів тепло- та масообміну

Об'ємний коефіцієнт масовіддачі  $K_v$ , який контролюється переважно зовнішньою аеродинамікою, стабільно зростає майже на всій довжині сушарки (до  $x = 0,9$  м). Це зумовлено безперервним збільшенням питомої міжфазної поверхні шару  $a_v$  внаслідок термічної усадки частинок. Його спад на самій кінцевій ділянці викликаний розширенням шару через зростання швидкості газу та відповідним зменшенням об'ємної концентрації дисперсної фази. Натомість об'ємний коефіцієнт теплопередачі та  $\alpha_v$  зростає лише на ділянці до середини апарату (до  $x = 0,57$  м). Після проходження цієї координати товщина пористої скоринки моногідрату стає настільки великою, що її внутрішній опір повністю нівелює збільшення міжфазної поверхні. Відбувається падіння ефективного коефіцієнта

теплопередачі, що відображається у спадному тренді  $\alpha_v$  і підтверджує лімітуючу роль внутрішньотермічної стадії теплопровідності наприкінці процесу.

Одночасно з інтенсивним тепломасообміном, глибока дегідратація супроводжується перебудовою фізичної структури матеріалу. Втрата 6 молів кристалізаційної вологи приводить до суттєвої об'ємної усадки частинок, при цьому істинна густина твердої фази безперервно зростає від початкових  $1890 \text{ кг/м}^3$  до значень близьких до  $3000 \text{ кг/м}^3$  при зменшенні еквівалентного діаметра  $d_{32}$ , що кардинально змінює локальну гідродинаміку.

Задане синусоїдальне падіння швидкості газу  $U_g$  від 1,3 до 0,9 м/с у середній частині апарата призводить до локального зменшення порозності шару  $\epsilon$  від початкових 0,65 до 0,59. У комбінації зі зростанням істинної густини частинок це викликає стрімке зростання концентрації маси частинок від  $670 \text{ кг/м}^3$  на вході до  $954 \text{ кг/м}^3$  у центрі апарата. На другій половині апарату розрахункова швидкість газу знову зростає, розширюючи шар до  $\epsilon = 0,65$ , що уповільнює темп зростання концентрації маси частинок до фінального значення  $1031 \text{ кг/м}^3$ .

Особливої уваги заслуговує механіка винесення частинок з апарату з відпрацьованим сушильним газом (рис. 4). Алгоритм реалізує концепцію динамічного усічення функції розподілу, де локальний критичний діаметр відсікання  $d_{cut}$  безперервно змінюється. На вході в апарат ( $x = 0$ ) при швидкості газу 1,3 м/с очікувано відбувається первинне видування найдрібніших фракцій, у середній частині апарату завдяки штучному зниженню швидкості процес винесення призупиняється. Проте, на другій половині апарата, де швидкість газу знов зростає, спостерігається інтенсивне вторинне винесення. Частинки, які на вході в апарат уникли винесення, за час проходження перших секцій зазнали глибокої усадки і зменшилися в об'ємі. При відновленні високої швидкості дуття частинки вже меншого діаметру, але значно більшої істинної густини, долають межу швидкості витання і захоплюються газовим потоком.

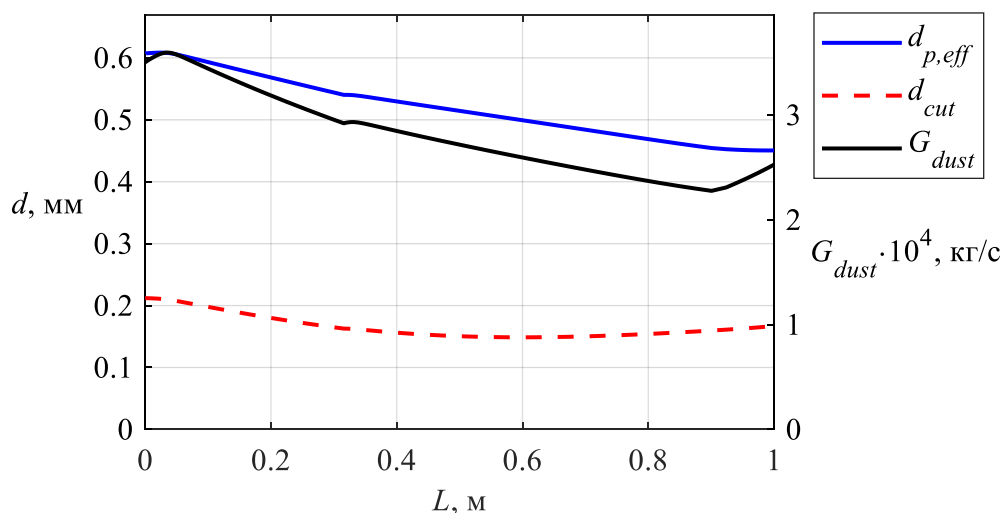


Рис. 4. Зміна діаметрів та інтенсивності винесення в апараті

Зміна гранулометричного складу матеріалу внаслідок одночасної дії термічної усадки та механізму винесення представлена на рис. 5 у вигляді 3D-поверхні. Для переходу від диференціальної функції щільності розподілу до масових часток фракцій  $\Delta Q_3$  розрахунок проводився кроком 0,1 мм.

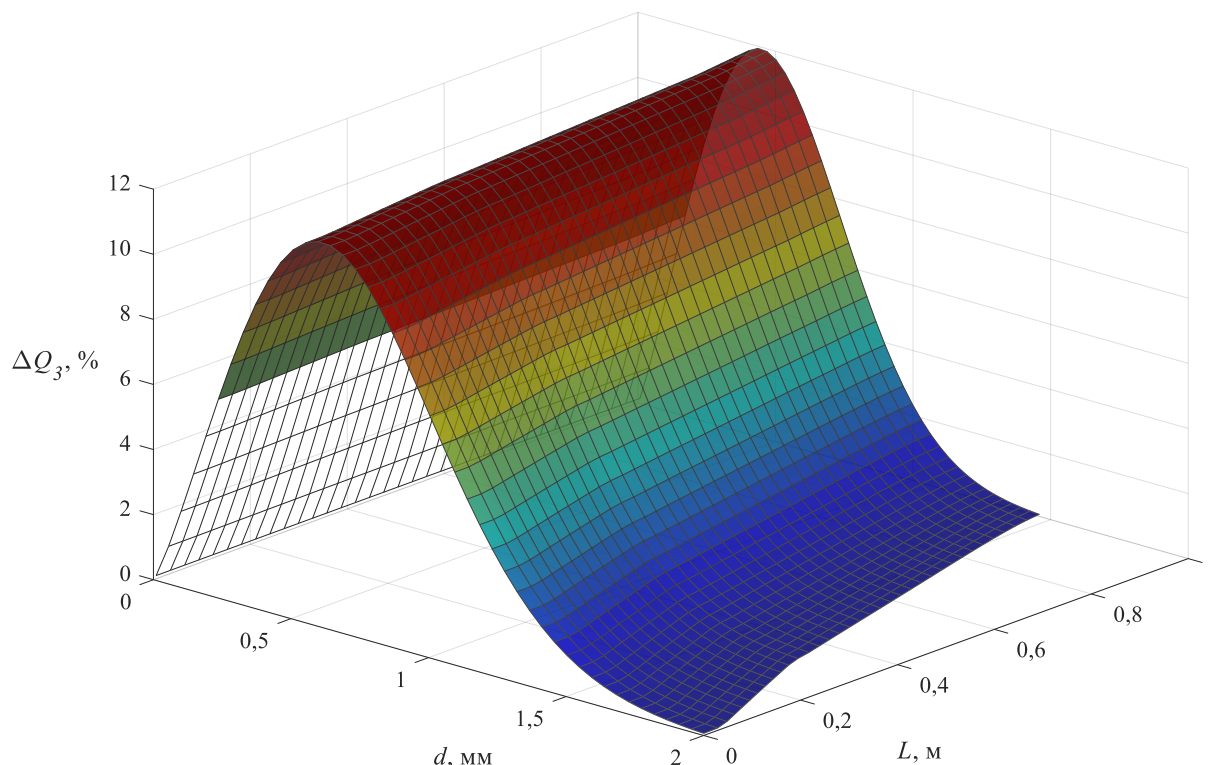


Рис. 5. Зміна діаметрів та інтенсивності винесення в апараті

Сітка графіку ілюструє повний теоретичний розподіл частинок, пік якого плавно зміщується від  $\approx 0,6$  мм до  $\approx 0,4$  мм виключно через втрату кристалізаційної вологи та ущільнення. Суцільна кольорова поверхня відображає фактичну наявність матеріалу в шарі, Відсутність кольорової заливки у зоні дрібних фракцій візуалізує динамічне усічення спектра розмірів газовим потоком. Найбільша деформація гранулометричного складу відбувається на вході в апарат і на його фінальній стадії, де швидкість газу є максимальною.

Результати аналізу базового технологічного режиму повністю верифікують працездатність створеної математичної моделі. Водночас емпіричний підбір вхідних параметрів дозволяє отримати якісний продукт, проте не гарантує досягнення технологічного максимуму продуктивності. Наявність верифікованої обчислювальної бази відкриває шлях до машинного синтезу оптимальних режимів у багатовимірному просторі рішень.

**Багатокритеріальна оптимізація профілів керування в багатовимірному просторі.** Вибір раціонального режиму роботи горизонтальної багатосекційної сушарки полягає в забезпеченні визначеної кінцевої якості продукту та необхідності балансувати між інтенсифікацією виробництва та енергетичною ощадністю. Оскільки конструкція апарата дозволяє формувати незалежні аеродинамічний та температурний профілі вздовж решітки, простір пошуку було суттєво розширено. Вектор керуючих змінних  $X$  складався із наступних незалежних параметрів: масового навантаження по сировині ( $G_{s,in} \in [0,003; 0,012]$  кг/с), початкової (в першій секції) швидкості газу ( $U_{g,in} \in [0,8; 1,3]$  м/с), початкової (в першій секції) температури теплоносія ( $T_{g,in} \in [150; 250]$  °C), а також чотирьох поліноміальних коефіцієнтів ( $c_{1,U}, c_{2,U}, a_T, b_T$ ), які математично формулювали просторові профілі.

З двох конкуруючих цільових функцій перша спрямовувалась на максимізацію масової продуктивності апарата за готовим продуктом, друга полягала у мінімізації сумарних питомих енерговитрат, що включали як теплову потужність, так і еквівалентну механічну роботу дуттьового обладнання.

На модель накладено наступні обмеження:

1. Захист від недосушування та пересушування:  $0,85 \leq n_{out} \leq 1,15$ ;
2. Запобігання термічній деструкції:  $T_s \leq 150^\circ\text{C}$ .
3. Лімітування інтенсивності пневмотранспорту:  $U_g / U_{mf} \leq 6,0$ .
4. Захист від залягання шару  $U_g / U_{mf} > 2,0$ .

Для глобального пошуку було застосовано генетичний алгоритм невідоміюваного сортування NSGA-II, який згенерував множини  $2 \cdot 10^4$  невідоміюваних компромісних рішень (фронт Парето) (рис. 6). Кожна точка на фронті представляє режим за якого неможливо збільшити продуктивність без погіршення енергетичної ефективності.

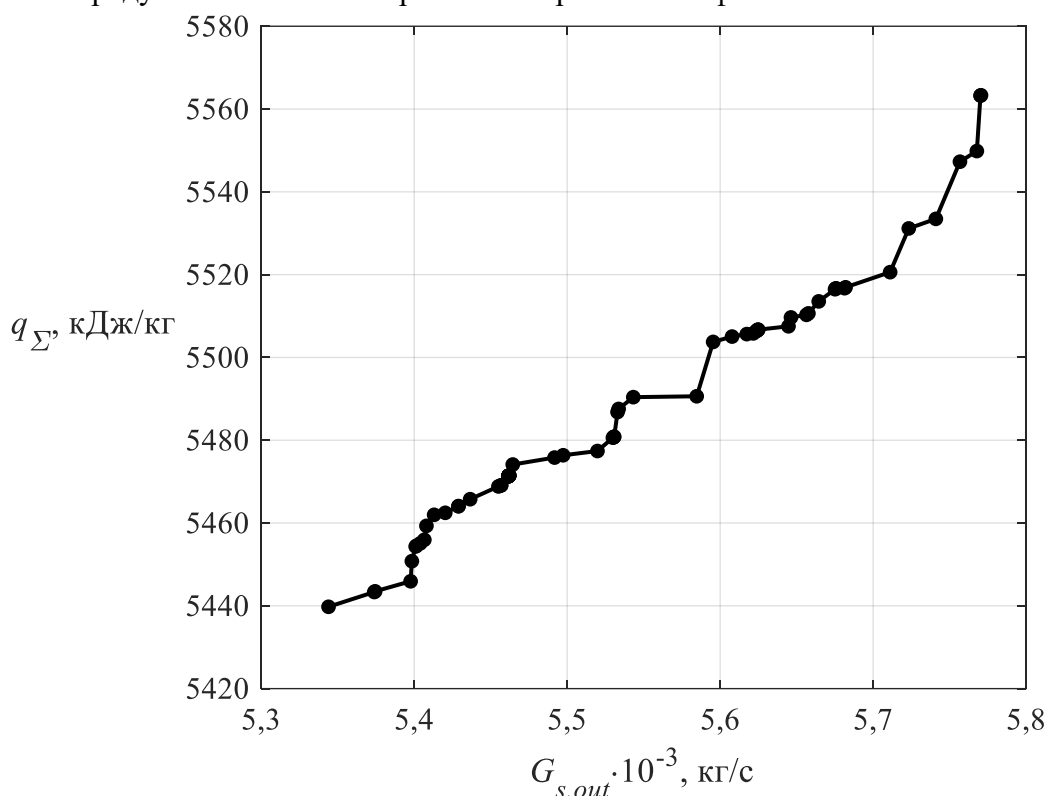


Рис. 6. Фронт Парето

**Подолання стохастичної нестабільності. Метод інформованої ініціалізації.** Первинні запуски алгоритму NSGA-II з повністю випадковою генерацією початкової популяції виявили схильність системи до передчасної конвергенції в локальних екстремумах. Висока нелінійність моделі та наявність фізичних обмежень перетворила простір рішень на вузький коридор зі складною топологією. За відсутності апріорних даних «сліпий» алгоритм часто потрапляв у пастку низьких швидкостей псевдозродження  $U_{g,in} \approx 0,9$  м/с. За таких умов газова фаза була фізично не здатна передати достатню кількість теплоти для випаровування значних мас води навіть при температурах  $240 \dots 250^\circ\text{C}$ . Щоб уникнути недосушування, алгоритм штучно знижував витрату вологого гептагідрату. Внаслідок цього еволюційний пошук припинявся на заниженій масовій продуктивності  $G_{s,out} \approx 0,0035$  кг/с при високих енерговитратах (понад 6500 кДж/кг).

Для усунення стохастичної нестабільності та розширення простору пошуку було імплементовано метод початкової ініціалізації. Суть полягала в інтеграції до базової матриці першого покоління (початкової популяції) координат перспективного технологічного вектору, виявленого під час попереднього аналізу ( $G_{s,in} = 0,0095$  кг/с,  $U_{g,in} = 1,28$  м/с,  $T_{g,in} = 245^\circ\text{C}$ ). Цей крок дозволив алгоритму миттєво покинути локальну гідродинамічну пастку і сфокусувати обчислювальні ресурси NSGA-II на вдосконаленні області глобального технологічного оптимуму.

**Аналіз глобального оптимуму та топології просторових рішень.** Впровадження початкової ініціалізації забезпечило понад 44 400 успішних інтегрувань (результатів розрахунків). Алгоритм сформував високо розташований фронт Парето, що характеризується масовою ефективністю  $G_{s,out} = 0,00534\text{--}0,00577$  кг/с при стабільно низьких питомих енерговитратах  $q_{\Sigma}$ , що знизилися до рівня 5440...5563 кДж/кг.

Аналіз режиму абсолютної максимальної продуктивності розкриває фізичну суть синтезованих алгоритмів керуючих впливів (рис. 5).

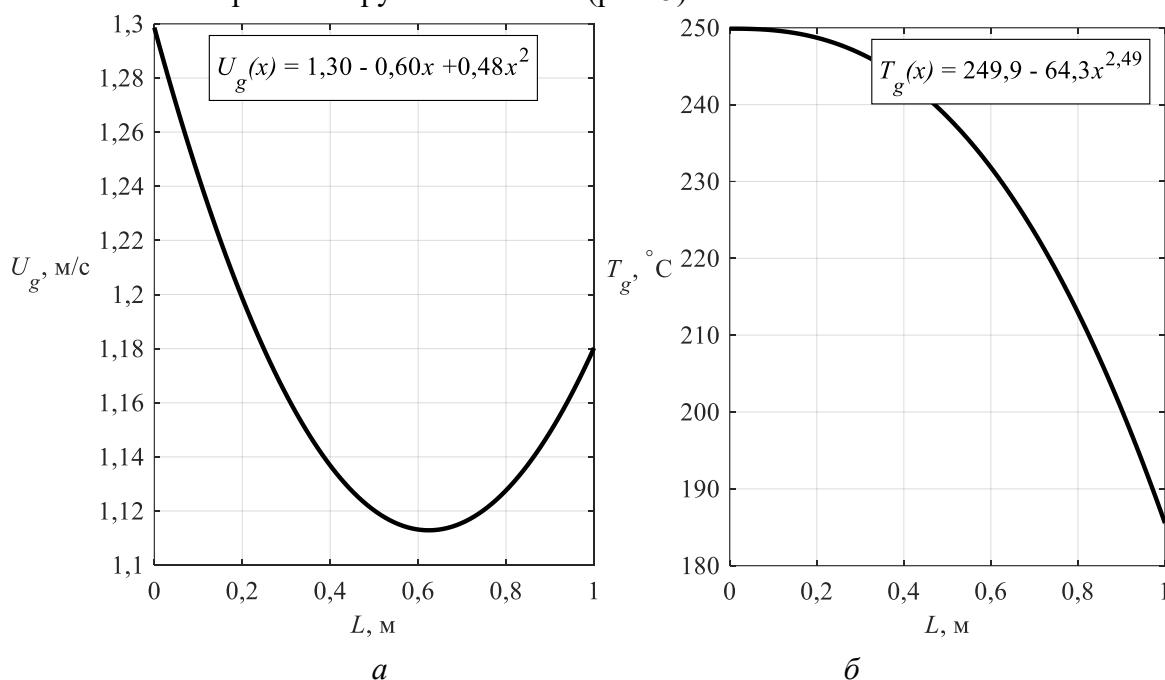


Рис. 7. Синтезовані оптимальні профілі для режиму максимальної продуктивності: а – швидкості; б – температури газу

Гідродинамічний профіль сушильного агента набуває вираженої форми параболічної кривої:  $U_g(x) = 1,3 - 0,60 \cdot x + 0,48 \cdot x^2$ . Виявлений локальний мінімум швидкості в центральній зоні апарата є точним відгуком системи на еволюцію аеродинамічних характеристик. На вході алгоритм формує форсоване дуття (1,3 м/с) для руйнування агломератів вологого гептагідрату. У центральній зоні алгоритм автоматично ініціює спад швидкості до 1,11 м/с, блокуючи значне винесення пилу. На виході фіксується компенсаційне зростання швидкості до 1,18 м/с для надійного утримання ущільненого моногідрату. Температурний профіль газу  $T_{g,in}(x) = 250 - 64,3 \cdot x^{2,49}$  реалізує стратегію пролонгованого впливу. Максимальний тепловий потенціал утримується вздовж основної частини робочої камери. Стрімкий експоненційний температурний спад до 186 °С, локалізований виключно наприкінці апарата, гарантує стабілізацію температури твердої фази на безпечному рівні 132,8 °С. Важливо підкреслити, що наведені числові значення поліноміальних коефіцієнтів не слід розглядати як жорстко детерміновані константи. Їхня головна цінність полягає у математичному відображенні загальної макродинаміки, векторної спрямованості та ключових градієнтів тепломасообміну. У межах знайденого Парето-оптимального діапазону точні значення цих коефіцієнтів мають певну варіативність.

Побудований тривимірний ландшафт для простору керуючих змінних (рис. 7) наочно візуалізує конкурентний конфлікт цілей та складність оптимізації. Точка максимальної продуктивності (червона маркерна позначка) розташована на крутому схилі площини енерговитрат на межі допустимої технологічної зони. Рух у зону абсолютного енергетичного мінімуму (зелена маркерна позначка  $q_{\Sigma} = 5440$  кДж/кг) супроводжується стрімким звуженням допустимого коридору параметрів і експоненційним падінням масової ефективності.

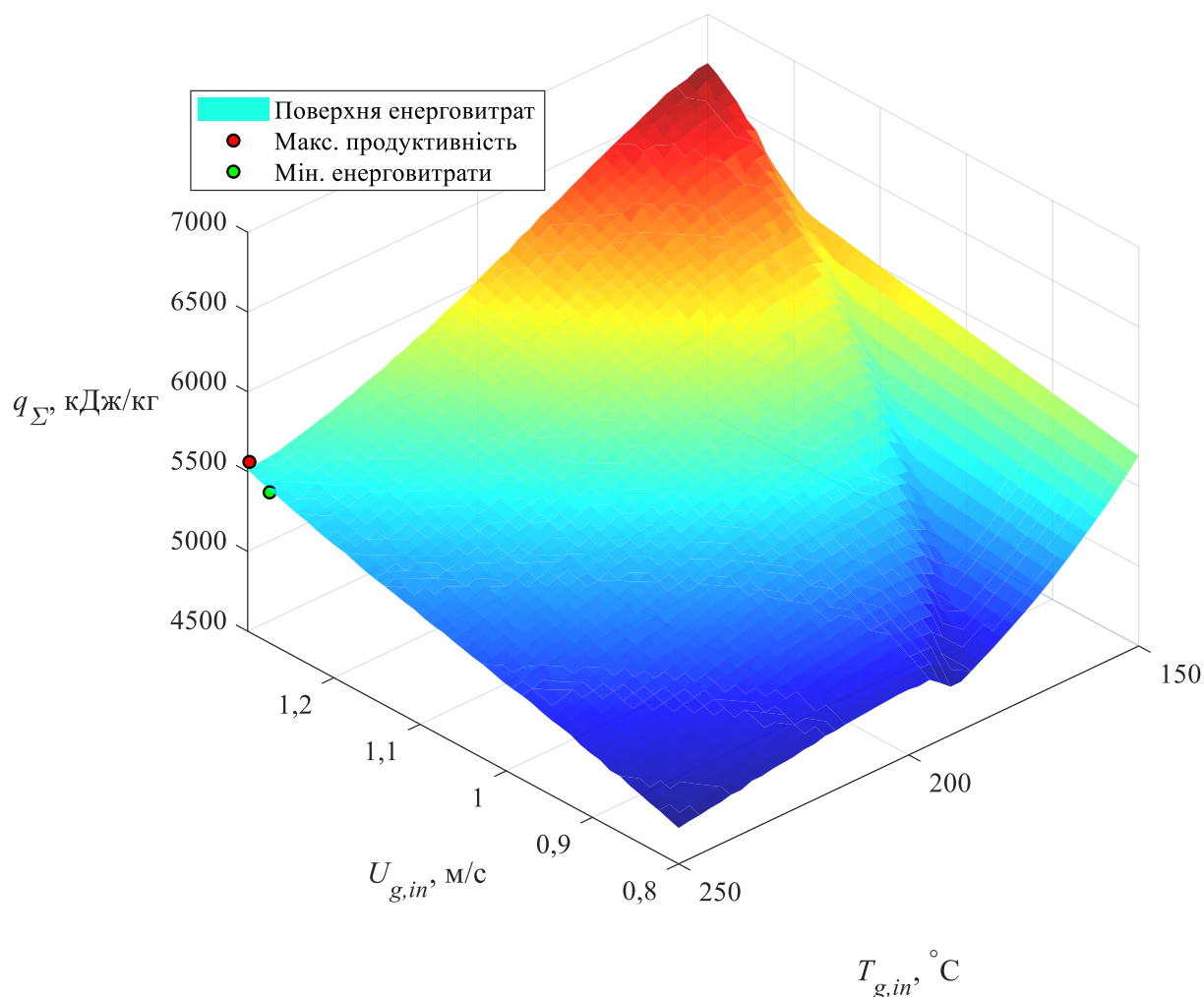


Рис. 7. Ландшафт рішень і конкурентний конфлікт цільових функцій

Отримані результати доводять, що шлях конструювання технологічного обладнання для дегідратації термолабільних кристалогідратів лише з використанням традиційних статичних параметрів може бути енергетично й технологічно хибним. Ефективне ведення процесу вимагає застосування методів багатовимірного машинного синтезу для динамічного управління просторовими профілями тепломасообміну.

**Обмеження результатів та перспективи подальших досліджень.** Попри високу точність та обчислювальну стійкість розробленої 1D-моделі результати досліджень мають інтерпретуватися з урахуванням прийнятих припущень.

По-перше, кінетичний модуль та блок винесення базується на ідеалізованій моделі стиснення частинки, яка враховує виключно термічну об'ємну усадку. У реальних промислових апаратах кристалогідрати зазнають додаткового вторинного пилоутворення внаслідок механічного стирання між собою та стінками обладнання, а також можливого термічного розтріскування при різкому нагріванні. Відповідно, фактична інтенсивність винесення пилу в реальних умовах може бути вищою за розраховану по функції Розіна–Рамплера.

По-друге, динамічна структура потоку твердої фази в горизонтальному апараті прийнята за моделлю ідеального витіснення. Хоча широке аеродинамічне секціонування суттєво звужує розподіл часу перебування, у реальному киплячому шарі завжди присутнє зворотнє перемішування та повздовжня дисперсія.

Перспективи подальшого розвитку даного дослідження полягають у переході від 1D– до CFD–DEM моделювання. Отримані в цій роботі оптимальні профілі швидкості та температур слугуватимуть оптимальними вихідними даними та граничними умовами, що дозволить дослідити динаміку псевдозрідження, кінетику дегідратації, верифікувати процеси змішування полідисперсної фази, що недоступно в рамках цієї одновимірної моделі.

**Висновки.** Розроблено математичну модель для розрахунку та оптимізації процесу безперервної дегідратації залізного купоросу в горизонтальному багатосекційному апараті киплячого шару. Обґрунтовано застосування детермінованої одновимірної моделі, що поєднує еволюцію гранулометричного складу матеріалу, розрахунки динамічної зміни тепло-фізичних властивостей частинок, кінетики дегідратації кристалогідрата з хімічно зв'язаною вологою. Це дозволило оцінити гідродинаміку псевдозрідження, інтенсивність винесення дрібних фракцій матеріалу із сушильним агентом, зміни тепло- та масообміну вздовж локальних секцій та в апараті загалом. Модель на основі алгоритму *ode15s* у середовищі MATLAB дозволила провести розрахунки без залучення ресурсомістких методів популяційного балансу PBM, забезпечила обчислювальну стійкість, необхідну для ітераційної оптимізації.

Сформульовано та, із застосуванням алгоритму NSGA–II, розв'язано задачу багато-критеріальної оптимізації у визначеному просторі керуючих змінних. Виявлено схильність алгоритму до передчасної конвергенції у локальних гідродинамічних пастках із заниженою масовою продуктивністю. Доведено, що впровадження методу попередньої ініціалізації успішно долає стохастичну нестабільність алгоритму.

Проведено аналіз синтезованого фронту Парето множини рішень, що забезпечують високу масову продуктивність при мінімізації сумарних питомих енерговитрат.

З урахуванням прийнятих у моделі припущень і технологічних обмежень встановлено оптимальний гідродинамічний та температурний профіль сушильного агента, що подається в апарат.

Отримані результати доводять технологічну й енергетичну ефективність, а також доцільність застосування методів багатовимірного пошуку оптимальних параметрів і режимів.

#### Список використаних джерел

1. Gázquez, M. J., Bolívar, J. P., Garcia-Ten, J., & Vaca, F. (2021). A review of the commercial uses of sulphate minerals from the titanium dioxide pigment industry: The case of Huelva (Spain). *Minerals*, 11(6), Article 575.
2. Lide, D. R. (Ed.). (2004). *CRC Handbook of Chemistry and Physics* (85th ed.). CRC Press.
3. Green, D. W., & Perry, R. H. (Eds.). (2008). *Perry's chemical engineers' handbook* (8th ed.). McGraw-Hill.
4. Gálwey, A. K., & Brown, M. E. (1999). *Thermal decomposition of ionic solids*. Elsevier.
5. Mujumdar, A. S. (Ed.). (2014). *Handbook of industrial drying* (4th ed.). CRC Press.
6. Атаманюк, В. М., & Гумницький, Я. М. (2013). *Наукові основи фільтраційного сушіння дисперсних матеріалів*. Видавництво Львівської політехніки.
7. Tsiura, N., Kindzera, D., Huzova, I., & Atamanyuk, V. (2021). Study of the kinetics of drying iron (II) sulfate heptahydrate by filtration method. *ScienceRise*, (1), 11–21.
8. Kunii, D., & Levenspiel, O. (1991). *Fluidization engineering* (2nd ed.). Butterworth-Heinemann.
9. Bachmann, P., & Tsotsas, E. (2015). Analysis of residence time distribution data in horizontal fluidized beds. *Procedia Engineering*, 102, 790–798.
10. Gidaspow, D. (1994). *Multiphase flow and fluidization: Continuum and kinetic theory descriptions*. Academic Press.
11. Rego, A. S. C. (2022). *Kinetic study on thermal decomposition of sulfates: TGA experiments and modelling* [Doctoral dissertation, Pontificia Universidade Católica do Rio de Janeiro]. PUC-Rio Digital Repository.
12. Levenspiel, O. (1998). *Chemical reaction engineering* (3rd ed.). John Wiley & Sons.

13. Burgschweiger, J., & Tsotsas, E. (2002). Experimental investigation and modelling of continuous fluidized bed drying under steady-state and dynamic conditions. *Chemical Engineering Science*, 57(24), 5021–5038.
14. Nilsson, L., & Wimmerstedt, R. (1988). Residence time distribution and particle dispersion in a longitudinal-flow fluidized bed. *Chemical Engineering Science*, 43(5), 1153–1160.
15. Alonso, J., & Picado, A. (2021). Simulation of a continuous fluidised bed dryer for shelled corn. *Nexo Revista Científica*, 34(03), 58–70.
16. de Munck, M. J. A., Dullemond, M., Peters, E. A. J. F., & Kuipers, J. A. M. (2023). Experimental gas-fluidized bed drying study on the segregation and mixing dynamics for binary and ternary solids. *Chemical Engineering Journal*, 465, Article 142756.
17. Chen, K., Bachmann, P., Bück, A., Jacob, M., & Tsotsas, E. (2017). Experimental study and modeling of particle drying in a continuously-operated horizontal fluidized bed. *Particuology*, 34, 14–26.
18. Dincer, I., & Sahin, A. Z. (2004). A new model for thermodynamic analysis of a drying process. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 47(4), 645–652.
19. Friso, D. (2021). Mathematical modelling of conveyor-belt dryers with tangential flow for food drying up to final moisture content below the critical value. *Inventions*, 6(2), 43.
20. Wang, T., Debelak, K. A., & Roth, J. A. (2007). Dehydration of iron(II) sulfate heptahydrate. *Thermochimica Acta*, 462(1-2), 89–93.
21. Kirnyi, V., & Yuhymenko, M. (2025). Physical and chemical properties of iron(II) sulfate heptahydrate as factors for selecting the drying process mode in a fluidized bed apparatus. *Technology Audit and Production Reserves*, 4(3(84)), 18–25.
22. Neugebauer, C., Bück, A., Palis, S., Mielke, L., Tsotsas, E., & Kienle, A. (2018). Influence of thermal conditions on particle properties in fluidized bed layering granulation. *Processes*, 6(12), 233.
23. Allen, T. (2003). *Powder sampling and particle size determination* (1st ed.). Elsevier Science.
24. Geldart, D. (Ed.). (1986). *Gas fluidization technology*. John Wiley & Sons.
25. Meyer, K., Bück, A., & Tsotsas, E. (2015). Dynamic multi-zone population balance model of particle formulation in fluidized beds. *Procedia Engineering*, 102, 1456–1465.
26. Bergman, T. L., Lavine, A. S., Incropera, F. P., & DeWitt, D. P. (2011). *Fundamentals of heat and mass transfer* (7th ed.). John Wiley & Sons.
27. Rangaiah, G. P., & Bonilla-Petriciolet, A. (Eds.). (2013). *Multi-objective optimization in chemical engineering: developments and applications*. John Wiley & Sons.
28. Bhaskar, V., Gupta, S. K., & Ray, A. K. (2000). Applications of multiobjective optimization in chemical engineering. *Reviews in Chemical Engineering*, 16(1), 1–54.
29. Nazghelichi, T., Jafari, A., Kianmehr, M. H., & Aghbashlo, M. (2013). CFD simulation and optimization of factors affecting the performance of a fluidized bed dryer. *Iranian Journal of Chemistry and Chemical Engineering*, 32(4), 115–129.
30. Deb, K., Pratap, A., Agarwal, S., & Meyarivan, T. (2002). A fast and elitist multiobjective genetic algorithm: NSGA-II. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, 6(2), 182–197.
31. Zalba, B., Marín, J. M., Cabeza, L. F., & Mehling, H. (2003). Review on thermal energy storage with phase change: materials, heat transfer analysis and applications. *Applied Thermal Engineering*, 23(3), 251–283.

### References

1. Gázquez, M. J., Bolívar, J. P., Garcia-Ten, J., & Vaca, F. (2021). A review of the commercial uses of sulphate minerals from the titanium dioxide pigment industry: The case of Huelva (Spain). *Minerals*, 11(6), Article 575.
2. Lide, D. R. (Ed.). (2004). *CRC Handbook of Chemistry and Physics* (85th ed.). CRC Press.
3. Green, D. W., & Perry, R. H. (Eds.). (2008). *Perry's chemical engineers' handbook* (8th ed.). McGraw-Hill.
4. Gálwey, A. K., & Brown, M. E. (1999). *Thermal decomposition of ionic solids*. Elsevier.
5. Mujumdar, A. S. (Ed.). (2014). *Handbook of industrial drying* (4th ed.). CRC Press.
6. Atamaniuk, V. M., & Humnytskyi, Ya. M. (2013). *Naukovi osnovy filtratsiinoho sushinnia dyspersnykh materialiv* [Scientific basis of filtration drying of dispersed materials]. Lviv Polytechnic Publishing House.
7. Tsiura, N., Kindzera, D., Huzova, I., & Atamanyuk, V. (2021). Study of the kinetics of drying iron (II) sulfate heptahydrate by filtration method. *ScienceRise*, (1), 11–21.

8. Kunii, D., & Levenspiel, O. (1991). *Fluidization engineering* (2nd ed.). Butterworth-Heinemann.
9. Bachmann, P., & Tsotsas, E. (2015). Analysis of residence time distribution data in horizontal fluidized beds. *Procedia Engineering*, 102, 790–798.
10. Gidaspow, D. (1994). *Multiphase flow and fluidization: Continuum and kinetic theory descriptions*. Academic Press.
11. Rego, A. S. C. (2022). *Kinetic study on thermal decomposition of sulfates: TGA experiments and modelling* [Doctoral dissertation, Pontificia Universidade Católica do Rio de Janeiro]. PUC-Rio Digital Repository.
12. Levenspiel, O. (1998). *Chemical reaction engineering* (3rd ed.). John Wiley & Sons.
13. Burgschweiger, J., & Tsotsas, E. (2002). Experimental investigation and modelling of continuous fluidized bed drying under steady-state and dynamic conditions. *Chemical Engineering Science*, 57(24), 5021–5038.
14. Nilsson, L., & Wimmerstedt, R. (1988). Residence time distribution and particle dispersion in a longitudinal-flow fluidized bed. *Chemical Engineering Science*, 43(5), 1153–1160.
15. Alonso, J., & Picado, A. (2021). Simulation of a continuous fluidised bed dryer for shelled corn. *Nexo Revista Científica*, 34(03), 58–70.
16. de Munck, M. J. A., Dullemond, M., Peters, E. A. J. F., & Kuipers, J. A. M. (2023). Experimental gas-fluidized bed drying study on the segregation and mixing dynamics for binary and ternary solids. *Chemical Engineering Journal*, 465, Article 142756.
17. Chen, K., Bachmann, P., Bück, A., Jacob, M., & Tsotsas, E. (2017). Experimental study and modeling of particle drying in a continuously-operated horizontal fluidized bed. *Particuology*, 34, 14–26.
18. Dincer, I., & Sahin, A. Z. (2004). A new model for thermodynamic analysis of a drying process. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 47(4), 645–652.
19. Friso, D. (2021). Mathematical modelling of conveyor-belt dryers with tangential flow for food drying up to final moisture content below the critical value. *Inventions*, 6(2), 43.
20. Wang, T., Debelak, K. A., & Roth, J. A. (2007). Dehydration of iron(II) sulfate heptahydrate. *Thermochimica Acta*, 462(1-2), 89–93.
21. Kirnyi, V., & Yukhymenko, M. (2025). Physical and chemical properties of iron(II) sulfate heptahydrate as factors for selecting the drying process mode in a fluidized bed apparatus. *Technology Audit and Production Reserves*, 4(3(84)), 18–25.
22. Neugebauer, C., Bück, A., Palis, S., Mielke, L., Tsotsas, E., & Kienle, A. (2018). Influence of thermal conditions on particle properties in fluidized bed layering granulation. *Processes*, 6(12), 233.
23. Allen, T. (2003). *Powder sampling and particle size determination* (1st ed.). Elsevier Science.
24. Geldart, D. (Ed.). (1986). *Gas fluidization technology*. John Wiley & Sons.
25. Meyer, K., Bück, A., & Tsotsas, E. (2015). Dynamic multi-zone population balance model of particle formulation in fluidized beds. *Procedia Engineering*, 102, 1456–1465.
26. Bergman, T. L., Lavine, A. S., Incropera, F. P., & DeWitt, D. P. (2011). *Fundamentals of heat and mass transfer* (7th ed.). John Wiley & Sons.
27. Rangaiah, G. P., & Bonilla-Petriciolet, A. (Eds.). (2013). *Multi-objective optimization in chemical engineering: developments and applications*. John Wiley & Sons.
28. Bhaskar, V., Gupta, S. K., & Ray, A. K. (2000). Applications of multiobjective optimization in chemical engineering. *Reviews in Chemical Engineering*, 16(1), 1–54.
29. Nazghelichi, T., Jafari, A., Kianmehr, M. H., & Aghbashlo, M. (2013). CFD simulation and optimization of factors affecting the performance of a fluidized bed dryer. *Iranian Journal of Chemistry and Chemical Engineering*, 32(4), 115–129.
30. Deb, K., Pratap, A., Agarwal, S., & Meyarivan, T. (2002). A fast and elitist multiobjective genetic algorithm: NSGA-II. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, 6(2), 182–197.
31. Zalba, B., Marín, J. M., Cabeza, L. F., & Mehling, H. (2003). Review on thermal energy storage with phase change: materials, heat transfer analysis and applications. *Applied Thermal Engineering*, 23(3), 251–283.

Дата першого надходження статті до видання: 22.02.2026  
Дата прийняття статті до друку після рецензування: 15.03.2026

**Viacheslav Kirnyi<sup>1</sup>, Mykola Yukhymenko<sup>2</sup>**<sup>1</sup>PhD student of the Department of Chemical Engineering  
Sumy State University (Sumy, Ukraine)E-mail: [v.kirnyi@pohnp.sumdu.edu.ua](mailto:v.kirnyi@pohnp.sumdu.edu.ua). ORCID: <http://orcid.org/0000-0003-1490-0600><sup>2</sup>PhD in Technical Sciences, Associate Professor of the Department of Chemical Engineering  
Sumy State University (Sumy, Ukraine)E-mail: [m.yukhymenko@pohnp.sumdu.edu.ua](mailto:m.yukhymenko@pohnp.sumdu.edu.ua). ORCID: <http://orcid.org/0000-0002-1405-1269>**MULTI-OBJECTIVE OPTIMIZATION OF IRON(II) SULFATE HEPTAHYDRATE DEHYDRATION IN A SECTIONAL FLUIDIZED BED DRYER**

*This article addresses the mathematical modeling and multi-objective optimization of the continuous dehydration process of iron(II) sulfate heptahydrate to produce a stable monohydrate. A comprehensive, deterministic 1D model has been developed for a horizontal sectional fluidized bed dryer. The model considers the impact of thermal conductivity on heat transfer kinetics, as well as the stepwise nature of chemically bound moisture dehydration. It also incorporates an analytical calculation of the dynamic evolution of particle size distribution. This approach enables the highly accurate prediction of the intensity of material particle elutriation from the fluidized bed due to the upward flow of the drying agent. This method avoids the use of resource-intensive population balance methods and provides the computational stability necessary for iterative optimization.*

*A multi-objective optimization problem was formulated in a multidimensional space of control variables to determine the rational operating regimes. The Non-dominated Sorting Genetic Algorithm II (NSGA-II) was used to solve this problem. The solution space was found to have a highly complex topology due to four nonlinear physicochemical constraints that prevent under-drying, over-drying, defluidization, and pneumatic transport. Additionally, the algorithm's tendency to prematurely converge in local hydrodynamic traps with underestimated mass efficiency was revealed. To overcome the algorithm's stochastic instability, an informed initialization method was implemented to ensure a transition to the global optimum zone. Analysis of the Pareto front identified a set of non-dominated trade-off solutions that maximize the dryer's mass productivity while minimizing total specific energy consumption. The optimal hydrodynamic profile of the drying agent is parabolic. It forms an aerodynamic minimum in the central zone that compensates for particle mass loss and blocks massive dust elutriation. The optimal temperature profile exhibits exponential decay, implementing a prolonged kinetic forcing strategy while preventing thermal degradation of the target monohydrate.*

**Keywords:** dehydration; iron(II) sulfate; horizontal sectional fluidized bed dryer; mathematical modeling; multi-objective optimization.

Fig.: 7. Table: 1. References: 31.