

**Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования «Российский химико-технологический университет  
имени Д.И. Менделеева»**

На правах рукописи



**Бабкин Михаил Андреевич**

**Разработка математической модели и цифрового двойника  
процессов измельчения в планетарной мельнице**

1.2.2. Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

**АВТОРЕФЕРАТ**

диссертации на соискание ученой степени кандидата

технических наук

Москва – 2025

Работа выполнена на кафедре информационных компьютерных технологий федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева»

Научный руководитель: доктор технических наук, профессор Кольцова Элеонора Моисеевна, заведующий кафедрой информационных компьютерных технологий ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева»

Официальные оппоненты:

доктор технических наук  
Еремин Антон Владимирович

Федеральное государственное  
бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования "Самарский  
государственный технический  
университет"

доктор технических наук  
Бобков Владимир Иванович

Филиал федерального государственного  
бюджетного образовательного  
учреждения высшего образования  
«Национальный исследовательский  
университет "МЭИ" в г. Смоленске

Ведущая организация:

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт программных систем им. А.К. Айламазяна Российской академии наук (ИПС им. А.К. Айламазяна РАН)

Защита состоится «19» сентября 2025 г. в 11:00 на заседании диссертационного совета РХТУ.2.6.10 федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева» (125047, г. Москва, Миусская пл., д. 9, ауд. 443, конференц-зал).

С диссертацией можно ознакомиться в Информационно-библиотечном центре РХТУ им. Д.И. Менделеева и на официальном сайте: <https://www.mustr.ru>.

Автореферат разослан «\_\_» \_\_\_\_\_ 2025 г.

Ученый секретарь диссертационного  
совета РХТУ.2.6.10  
Кандидат технических наук, доцент



В.А. Василенко

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

**Актуальность темы исследования.** Процессы измельчения играют ключевую роль в широком спектре производств, включая производство тонкодисперсных порошков, наноматериалов, фармацевтических препаратов, керамики, пигментов, катализаторов и аккумуляторов. Повышенные требования к качеству и однородности получаемых материалов обуславливают необходимость точного контроля процессов измельчения. Планетарные мельницы представляют собой один из наиболее энергоэффективных и универсальных типов оборудования для сверхтонкого измельчения, обеспечивая экстремально высокую кинетическую энергию взаимодействующих тел. Однако, несмотря на их распространённость, процессы, происходящие внутри таких систем, остаются сложными для описания. Сложность обусловлена многофазностью, нелинейностью кинетики разрушения.

Современные подходы к моделированию, такие как метод моментов, метод дискретных элементов (DEM), а также уравнения популяционного баланса (PBM), имеют как достоинства, так и серьёзные ограничения. DEM требует колоссальных вычислительных ресурсов, и не может применяться для длительного предсказания распределения размеров частиц. PBM-методы требуют априорного знания функций дробления и разрушения, а также способа закрепления модели. Как правило, в качестве замыкающих условий используются эмпирические выражения, параметры которых подбираются под конкретный материал или установку, что снижает универсальность модели.

Поэтому для поиска параметров популяционных моделей, отражающих физико-химическую сущность протекающих явлений должен быть разработан подход на основе аппарата механики гетерогенных сред.

Особенно остро стоит задача определения критерия прекращения измельчения. В промышленной практике часто ориентируются на среднюю величину размера частиц, однако такое определение не связано с физическим смыслом устойчивости системы. В результате, проектирование технологического процесса осложнено отсутствием обоснованного предельного состояния.

В данной работе впервые предлагается применение вариационного принципа минимума производства энтропии при определении зависимости для диаметра частиц, устойчивых к дроблению.

Этот принцип позволяет перейти от эмпирического подхода к фундаментально-обоснованному, повысить воспроизводимость результатов моделирования и их применимость к различным типам материалов.

Одновременно, развитие технологий цифровых двойников и виртуальных тренажёров позволяет интегрировать такие модели в образовательную и производственную сферу применения. Визуализация результатов расчёта в виде VR-модуля с обратной связью предоставляет не только инструмент анализа, но и обучающую платформу для инженеров, технологов и студентов.

Актуальность также подтверждается соответствием диссертационной работы Распоряжению Правительства РФ от 6 ноября 2021 г. № 3142-р «Об утверждении стратегического направления в области цифровой трансформации обрабатывающих отраслей промышленности», в рамках которого определены проекты «Умное производство», «Цифровой инжиниринг», для реализации которых необходимо разработать методологию обеспечения цифровой трансформации промышленных предприятий с использованием инструментария «Индустрии 4.0».

#### **Степень разработанности темы.**

Разработка теоретических и прикладных основ процессов измельчения активно велась в ведущих научных центрах России, таких как РХТУ им. Д.И. Менделеева, ИГХТУ, СПбГТИ и ТГТУ. Существенный вклад в становление кинетических моделей и методов параметризации процессов разрушения внесли представители школ В.В. Кафарова, О.М. Флисюка, В.Н. Блиничева и В.Ф. Першина.

Разработка теоретических и прикладных основ процессов тонкого измельчения получила значительное развитие в ведущих научных центрах США, таких как Пенсильванский государственный университет, Университет Юты и Калифорнийский университет в Беркли. Существенный вклад в становление кинетических моделей, методов параметризации и популяционного моделирования процессов разрушения внесли представители школы Лоуренса Остина, Питера Лакки и Р.Р. Климпела. Их труды заложили фундамент для описания помола как скоростного процесса, а также разработали инструментарий для определения функций дробления и распределения, получивший широкое применение при проектировании и оптимизации мелющего оборудования.

В настоящей работе фундаментальные положения механики гетерогенных сред, лежащие в основе создания структур термодинамических движущих сил и потоков,

базируются на работах научной школы академиков РАН Х.А. Рахматулина и Р.И. Нигматулина.

Фундаментальные термодинамические положения, являющиеся основой критерия устойчивости измельчения, базируются на работах Ильи Пригожина, разработавшего концепцию термодинамики неравновесных систем. Принцип минимума производства энтропии, сформулированный им, в настоящей работе применяется как физически обоснованный механизм описания стационарного состояния кинетической системы разрушения.

Однако несмотря на значительный вклад внесения научными и зарубежными школами в исследование и моделирование процессов измельчения отсутствуют работы по совмещению подходов аппарата механики гетерогенных сред и термодинамики необратимых процессов для определения:

- 1) термодинамических движущих сил и потоков процессов измельчения;
- 2) зависимости для размера частиц, устойчивых к дроблению;
- 3) кинетических параметров в популяционных уравнениях балансов числа частиц в процессах измельчения.

Работа выполнялась при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-07-00886, а также при поддержке «Фонда содействия инноваций» по программе «УМНИК-2023» по договору № 18696ГУ/2023.

**Цель работы.** Создание математической модели процесса измельчения, отражающей совокупность физико-химических явлений, протекающих в планетарной мельнице; создание программного обеспечения и цифрового двойника для оптимизации процесса и обучения.

**Задачи работы.** Для достижения поставленной цели необходимо было выполнить следующие задачи:

1. Проведение экспериментальных исследований процесса измельчения в планетарной мельнице для получения данных по изменению размеров частиц и их распределению по радиусам.
2. На основе совмещения аппаратов механики гетерогенных сред и термодинамики необратимых процессов определить структуру движущих сил и потоков дробления.
3. Применив методы термодинамики необратимых процессов (принцип минимального производства энтропии), установить зависимость для диаметра частиц устойчивых к

процессу дробления.

4. Используя соотношения Онзагера, получить структуру потока дробления и определить функциональную зависимость для констант дробления.
5. Построение математической модели кинетики процесса дробления с учётом экспериментальных данных и полученных зависимостей.
6. Разработка численного метода для решения интегро-дифференциального уравнения плотности распределения частиц по размерам (объёмам).
7. Разработка программного обеспечения для моделирования процесса дробления.
8. Создание цифрового двойника мельницы, способного не только симулировать процесс измельчения, но и служить инструментом для обучения операторов.

### **Научная новизна.**

Получены структуры термодинамических потока и движущей силы измельчения, отличающиеся применением термодинамического подхода.

Предложена методика определения функциональной зависимости диаметра частиц, отличающаяся применением вариационного принципа минимума производства энтропии в качестве критерия термодинамической устойчивости гетерогенных систем, что позволяет определить диаметр частиц, устойчивых к дроблению, от режимных параметров.

Найдена функциональная зависимость «константы» дробления, отличающаяся применением термодинамического подхода, что позволяет отказаться от эмпирических зависимостей.

Разработана оригинальная разностная схема решения интегро-дифференциального уравнения баланса числа частиц с учётом явления дробления отличающаяся применением метода дробных шагов, что позволяет описывать процесс с высокой степенью аппроксимации.

Разработан цифровой двойник планетарной мельницы, отличающийся встроенной математической моделью кинетики измельчения, что обеспечивает возможность обучения и проведения вычислительных экспериментов в виртуальной реальности.

**Практическая и теоретическая значимость работы.** На основании экспериментальных исследований процессов измельчения оксида алюминия определены ключевые кинетические параметры, характеризующие кинетику разрушения частиц в планетарной мельнице. Получены количественные данные о

влиянии начального размера частиц, соотношения массы шаров к массе порошка и диаметра мелющих тел на скорость достижения устойчивого размера.

На основе разработанной математической модели, включающей уравнение баланса числа частиц с физически обоснованными функциями разрушения и распределения дочерних фрагментов, сформулированы критерии выбора оптимальных режимов измельчения для достижения заданных характеристик порошка.

На основе полученной функциональной зависимости для диаметра частиц, устойчивых к дроблению определены режимы процесса измельчения для получения частиц с заданными размерами (от 0,8 до 2 мкм).

Так для получения порошка оксида алюминия (для керамоматричных композитов) с предельным размером 1,5 мкм, режимы измельчения, следующие: размер мелющих шаров – 1 мм, соотношение масс мелющих тел к измельчаемому порошку 3:1.

Реализован программный комплекс для решения уравнений математической модели процесса измельчения на языке Python с возможностью интеграции машинного обучения для уточнения энергетических характеристик измельчения. Построен цифровой двойник процесса, реализованный в среде Unreal Engine 5, обеспечивающий визуализацию кинетики измельчения в реальном времени и использование модели в формате виртуального обучающего модуля. Практическое значение работы заключается в возможности применения разработанной модели и программного комплекса как в промышленной оптимизации режимов измельчения, так и в образовательной подготовке специалистов в области процессов и аппаратов химических технологий (акт о внедрении программного обеспечения в приложении диссертации).

**Методология и методы исследования.** Методологическая основа исследования базировалась на комплексном применении инструментов математического моделирования, методов механики гетерогенных сред и неравновесной термодинамики, численных методов решения интегро-дифференциальных уравнений, а также алгоритмов машинного обучения. Ключевым элементом стало использование уравнения баланса числа частиц, с помощью которого построена динамическая модель эволюции распределения частиц по размерам. Функция разрушения частиц описана на основе физико-химической сущности с последующей адаптацией под конкретные материалы.

Для численного решения использовались схемы расщепления и предиктор-корректор, обеспечивающие устойчивость и точность расчётов на длительных

временных интервалах. Расчёты реализованы на языке Python с использованием библиотеки NumPy, алгоритмов интеграции по трапециевидной формуле и кэширования вычислений для повышения эффективности.

В рамках определения критерия устойчивого размера применён вариационный подход к выводу соотношения для экстремума энтропийного функционала. Энергетические параметры процесса рассчитывались на основе эмпирически установленных зависимостей мощности на измельчение, дополнительно уточнённых с помощью обучаемых моделей (KNN, SVR, Random Forest, MLP) на реальных данных.

Визуализация и VR-интеграция были реализованы в движке Unreal Engine 5, где расчётная часть модели взаимодействует с визуальной в режиме реального времени. Такой подход обеспечил адаптивную обратную связь в процессе обучения и анализа.

Экспериментальные исследования были проведены на оборудовании кафедры химической технологии керамики и огнеупоров РХТУ им. Д.И. Менделеева под руководством доцента Н.А. Поповой, измерения по распределению частиц по размерам методом лазерной дифракции выполнено на факультете ИМСЭН-ИФХ.

#### **Положения, выносимые на защиту:**

1. Результаты экспериментальных исследований кинетических закономерностей процесса измельчения оксида алюминия при различных управляющих параметрах, таких как размер мелющих шаров и соотношение масс мелющих тел к массе измельчаемого материала, подтверждающие достижение конечного постоянного размера частиц при длительном измельчении.
2. Структура термодинамических движущих сил и потоков для процессов измельчения.
3. Математическая модель, основанная на принципе минимума производства энтропии позволяющая определить конечный устойчивый к измельчению размер частиц на основе физико-химических свойств материалов, а также режимов измельчения.
4. Математическая модель кинетики измельчения твёрдых тел в планетарной мельнице, основанная на уравнении баланса с функциями А и В, учитывающими реальную динамику разрушения частиц (построенную на фундаментальных физико-химических принципах).
5. Численный метод решения уравнений математической модели процесса измельчения.

6. Программный комплекс для моделирования процессов измельчения в планетарной мельнице.

7. Цифровой двойник планетарной мельницы, использующий математическую модель в качестве источника данных о кинетике процесса измельчения для обучения и проведения вычислительных экспериментов в виртуальной среде.

**Степень достоверности результатов.** Достоверность обеспечивается большим объемом экспериментальных данных, корректным использованием методов математического моделирования, проверкой адекватности разработанных математических моделей на результатах экспериментальных исследований.

**Апробация.** Результаты диссертационной работы были представлены на международных и всероссийских конференциях, в том числе на: XXXVI Международной научно-практической конференции «Актуальные вопросы современной науки и образования» (г. Пенза, 2024 г.); Международных конгрессах молодых ученых по химии и химической технологии (г. Москва, 2018 г., 2019 г., 2020 г., 2023 г.).

Получены акты о внедрении: программного обеспечения для моделирования процессов измельчения порошков в планетарных мельницах в НИЦ "Курчатовский институт", результатов диссертационной работы в учебном процессе по программам бакалавриата «Химическая технология» и «Технологические машины и оборудование» на кафедре химической технологии керамики и огнеупоров РХТУ им. Д.И. Менделеева.

**Личный вклад автора.** Автор провел исследования по изучению экспериментальных зависимостей процесса измельчения порошка оксида алюминия в планетарной мельнице.

Автор принимал участие в выводе структуры термодинамических движущих сил и потоков. Автор принимал участие в выводе зависимости для частиц устойчивых к дроблению на основе вариационного принципа минимума производства энтропии. Автор разработал математическую модель кинетики измельчения с кинетическими параметрами, основанных на фундаментальных физических принципах, использовал методы машинного обучения для идентификации мощности на измельчение частиц, разработал программное обеспечение для моделирования процесса измельчения в планетарной мельнице, создал цифровой двойник планетарной мельницы (на примере измельчения порошка оксида алюминия) для обучения и проведения вычислительных

экспериментов в виртуальной среде.

**Публикации.** По теме диссертационной работы опубликовано 8 работ, из них 3 статьи в изданиях, индексируемых в международных реферативных базах данных и системах цитирования Web of Sciences и Scopus. Получено 2 свидетельства о государственной регистрации программы для ЭВМ.

**Объем и структура работы.** Диссертационная работа состоит из введения, 5 глав, заключения, списка литературы из 110 наименования и 5 приложений. Общий объем составляет 188 страницы печатного текста, включая 7 таблицы и 32 рисунка.

### **ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ**

**Во введении** отражены и обоснованы актуальность, научная новизна и практическая значимость работы. Сформулирована цель работы и основные задачи для достижения поставленной цели.

**В первой главе** выполнен анализ научно-технической литературы, посвящённой вопросам моделирования процессов измельчения твёрдых материалов. Рассмотрены существующие подходы, включая метод моментов, уравнения баланса числа частиц и методы дискретных элементов, выявлены их сильные и слабые стороны применительно к задачам количественного предсказания кинетики разрушения. Особое внимание уделено физическим и термодинамическим основам процессов измельчения. На основании обзора обоснована необходимость создания модели процесса измельчения, кинетические параметры которой бы отражали физико-химическую сущность протекающих явлений при измельчении и были основаны на фундаментальных принципах термодинамики необратимых процессов.

**Во второй главе** приведены результаты экспериментальных исследований по измельчению оксида алюминия в планетарной мельнице. Описана методика проведения опытов, выбор режимов измельчения и методы фиксации изменения распределения размеров частиц во времени. Показано влияние начального размера частиц, массы и диаметра мелющих тел на кинетику процесса. Полученные данные использованы для параметризации и верификации разработанной математической модели.

Проведение эксперимента осуществлялось на планетарной мельнице М36 ВНИИНСМ 1971г. Семплирование образцов осуществлялось с периодичностью в 15 минут. Анализ проб проводился на лазерном дифракционном микроанализаторе FRITSCH Analysette 22.

В качестве измельчаемого материала использовался оксид алюминия со средними начальными размерами частиц 35 мкм. Измельчение проводилось в этанольной среде с использованием шаров из диоксида циркония ( $ZrO_2$ ) диаметром 2 мм и 5 мм. Параметры измельчения варьировались по соотношению массы шаров к массе порошка (3:1 и 5:1). Эксперименты проводились в планетарной мельнице М36 при постоянной скорости вращения 200 об/мин. Размер частиц определяли методом лазерной дифракции. Результаты четырех экспериментов с разными параметрами приведены в таблице 1.

Таблица 1 – Экспериментальные данные по измельчению в конечный момент времени

| № опыта | Размер шаров, мм | Соотношение масс шаров/порошка | Средний размер частиц через 90 мин, мкм |
|---------|------------------|--------------------------------|-----------------------------------------|
| 1       | 5                | 3:1                            | 3,42                                    |
| 2       | 5                | 5:1                            | 2,97                                    |
| 3       | 2                | 3:1                            | 2,04                                    |
| 4       | 2                | 5:1                            | 1,83                                    |

Наибольшая степень измельчения достигнута при использовании шаров диаметром 2 мм и соотношении масс 5:1, при этом средний размер частиц снизился до 1,83 мкм за 90 минут измельчения.

Изучено влияние диаметра шаров и массы шаров на динамику процесса измельчения. При меньшем размере шаров и увеличенном количестве шаров наблюдается более быстрое уменьшение размера частиц, а также достижение стационарного размера частиц.

На рисунке 1 представлены кинетические кривые измельчения для различных условий эксперимента. Видно, что процесс измельчения замедляется по мере приближения частиц к устойчивому минимальному размеру.

Экспериментальные данные подтвердили, что после определённого времени измельчения средний размер частиц стабилизируется, указывая на установление стационарного состояния системы.

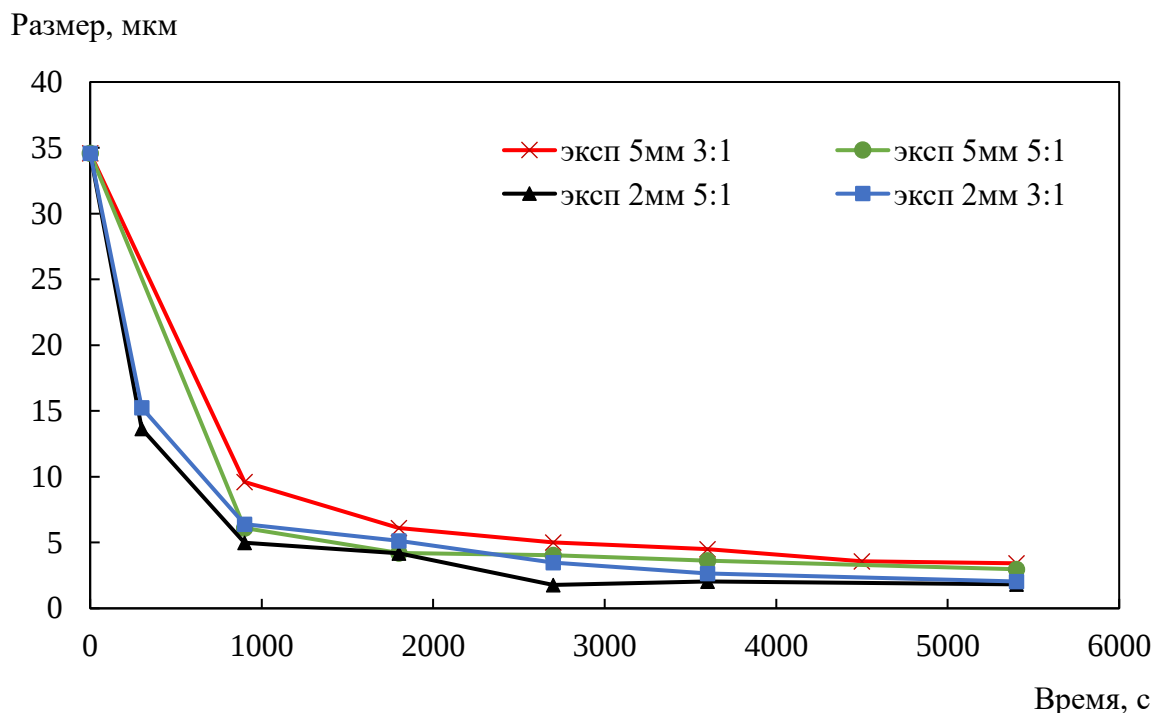


Рисунок 1 – Зависимость среднего размера частиц от времени дробления для четырёх экспериментов

В третьей главе на основе аппарата механики гетерогенных сред приведены уравнения сохранения масс, импульса и энергии для гетерогенной системы, в которой происходит процесс дробления частиц. Так уравнение баланса числа частиц имеет вид

$$\frac{\partial}{\partial t} f(r) + \text{div}[f(r)\vec{v}_2(r)] = -f(r)A(r) + \int_r^{r_{\max}} f(\gamma)A(\gamma)B(r/\gamma)d\gamma, \quad (1)$$

где  $f(r)$  – плотность распределения частиц по размерам (объемам),  $\vec{v}_2$  – скорость частиц,  $A(r)$  – функция определяющая вероятность дробления частиц размером  $r$ ,  $B(r/\gamma)$  – плотность распределения, определяющая вероятность образования частиц объёма  $r$  из частицы объёма  $\gamma$ .

В третьей главе приведено уравнение изменения энтропии гетерогенной системы, состоящее из двух слагаемых: изменение энтропии за счёт обмена теплом и массой с окружающей средой, изменение энтропии (производство энтропии) за счёт внутренних необратимых процессов.

Производство энтропии представляет из себя сумму произведений термодинамических потоков на движущие термодинамические силы. Производство энтропии для частиц с размерами (объемами) из интервала  $[r, r+dr]$  за счёт явления дробления частиц имеет вид:

$$\sigma = A(r)f(r)Xdr, \quad (2)$$

где  $X$  – движущая сила дробления, представленная в виде:

$$X = \frac{-\pi d^2 \Sigma}{2} + \frac{\pi \rho_2^0 d^3 (d\varepsilon)^{2/3}}{12} \quad (3)$$

где  $\rho_2^0, d, \Sigma$  – плотность, диаметр и поверхностная энергия соответственно;  $\varepsilon$  – удельная мощность на измельчение;

$$J = A(r)f(r)dr, \quad (4)$$

где  $J$  – термодинамический поток дробления частиц из интервала  $[r, r+dr]$ ;  $f(r)dr$  – число частиц с размером (объёмом)  $[r, r+dr]$ .

Таким образом, производство энтропии для частиц имеет вид  $\sigma = JX$  где

$$A(r) = L \cdot X, \quad (5)$$

где  $L$  – феноменологический коэффициент.

Соотношение Онзагера (5) определяет физико-химическую сущность «константы» дробления, вероятность разрушения частицы от удельной мощности на измельчении, физико-химических свойств материала, размера частиц.

В главе 3 на основании теоремы И. Пригожина (состояние линейной системы, характеризующееся минимумом производства энтропии стационарно и устойчиво), то есть из уравнения

$$\frac{d\sigma}{dd} = 0; \quad (6)$$

получена функциональная зависимость для определения диаметра частицы, устойчивой к дроблению (т.е. предельного минимального размера частицы при заданных условия).

$$d = \left( \frac{6\Sigma}{\rho_2^0} \right)^{3/5} \frac{1}{\varepsilon^{2/5}} \quad (7)$$

Для применения зависимости (7) к условиям планетарной мельницы, рассматриваемых в главе 2, мощность на измельчение была представлена в виде регрессионной зависимости:

$$\varepsilon(z_1, z_2) = a_0 + a_1 z_1 + a_2 z_2 + a_{12} z_1 z_2, \quad (8)$$

где  $z_1$  характеризует соотношение массы дробящих шаров к массе порошка,  $z_2$  отражает геометрическое соотношение характеристического размера к размеру используемых шаров.

Параметры регрессии определены из критерия минимума

$$\sum_{i=0}^N \left( d_{i,уст}^{экс} - d_{i,уст}^{расч} \right)^2 / N = \min \quad (9)$$

При условиях экспериментов, представленных в таблице 1.

В таблице 2 приведены результаты сравнения расчётных и экспериментальных значений диаметров частиц, устойчивых к дроблению в условиях эксперимента, которые не использовались для нахождения параметров регрессии (8).

Таблица 2 – Сравнение размеров частиц устойчивых к дроблению (расчёт и эксперимент)

| Управляющие параметры |                                | Размер частиц, мкм |             | Ошибка, % |
|-----------------------|--------------------------------|--------------------|-------------|-----------|
| Размер шаров, мм      | Соотношение масс шаров/порошка | Расчёт             | Эксперимент |           |
| 3                     | 3:1                            | 2,51               | 2,59        | 3,2       |
| 3                     | 5:1                            | 2,23               | 2,31        | 3,7       |

Из данных приведённых в таблице 2, видно хорошее соответствие расчётных и экспериментальных данных, что свидетельствует о применимости соотношения (7) к определению размера устойчивых к дроблению частиц в планетарной мельнице.

В 3-ей главе также разработаны алгоритмы расчёта диаметра устойчивых к дроблению частиц методами машинного обучения: случайный лес, метод k-ближайших соседей. Лучшую точность показал метод случайного леса.

На основе разработанной математической модели (7), основанной на принципе минимума производства энтропии определён оптимальный режим работы планетарной мельницы для измельчения оксида алюминия: размер шаров 1 мм, соотношение масс шаров к порошку 3:1. Размер частиц оксида алюминия ~1,5 мкм.

**В четвёртой главе** представлена математическая модель процесса измельчения в планетарной мельнице на основе уравнения (1) в условиях идеального перемешивания частиц. Движущую силу дробления (3), полученную в третьей главе, представили в виде критерия Вебера:

$$We = \frac{\rho_2^0 d^{5/3} \varepsilon^{2/3}}{2\Sigma_{r1} - \Sigma_{rr}} \quad (10)$$

Следовательно, вероятность разрушения  $A(r)$  (5) имеет вид:

$$A(r) = L \cdot We \quad (11)$$

Функция распределения дочерних частиц размера  $r$  при разрушении частиц

размером  $\gamma$  (взята на основании литературных данных):

$$B(r, \gamma) = \left[ 30P_B \left( \frac{r}{\gamma} \right)^2 \left( 1 - \frac{r}{\gamma} \right)^2 \right] \quad (12)$$

Уравнение баланса числа частиц для планетарной мельницы имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} f(r) &= -f(r)A(r) + \int_r^{r_{max}} f(\gamma)A(\gamma)B(r/\gamma)d\gamma \\ f(t=0, r) &= \varphi(r) \end{aligned} \quad (13)$$

Уравнение (13) было приведено к безразмерному виду.

Для решения уравнения баланса числа частиц разработаны разностные схемы: схема расщепления, схема предиктор-корректор, аппроксимирующие уравнение (13) со вторым порядком аппроксимации по времени и размеру  $O(\Delta t^2, \Delta r^2)$ . Схема расщепления имеет вид:

Первая подсхема:

$$\frac{f_j^{n+1/2} - f_j^n}{\Delta t} = -f_j^{n+1/2} A_j; \quad (14)$$

Вторая подсхема:

$$\frac{f_j^{n+1} - f_j^{n+1/2}}{\Delta t} = \sum_{k=j}^{Nr} f_k^{n+1/2} A_k B_{jk} \Delta r; \quad (15)$$

Выразив из первой подсхемы  $f_j^{n+1/2}$ , получим выражение, которое используется для расчёта значения функции на шаге  $n+1/2$ :

$$f_j^{n+1/2} = \frac{f_j^n}{1 + \Delta t A_j}, \quad (16)$$

а из второй подсхемы получим

$$f_j^{n+1} = f_j^{n+1/2} + \Delta t \sum_{k=j}^{Nr} A_k f_k^{n+1/2} B_{jk} \Delta r \quad (17)$$

где  $n$  – номер шага по времени,  $n+1/2$  – дробный шаг по времени,  $n+1$  – следующий шаг по времени,  $\Delta t$  – интервал времени, индексы  $k, j$  относятся к размеру частиц.

Блок схема алгоритма решения уравнения математической модели представлена на рисунке 2.

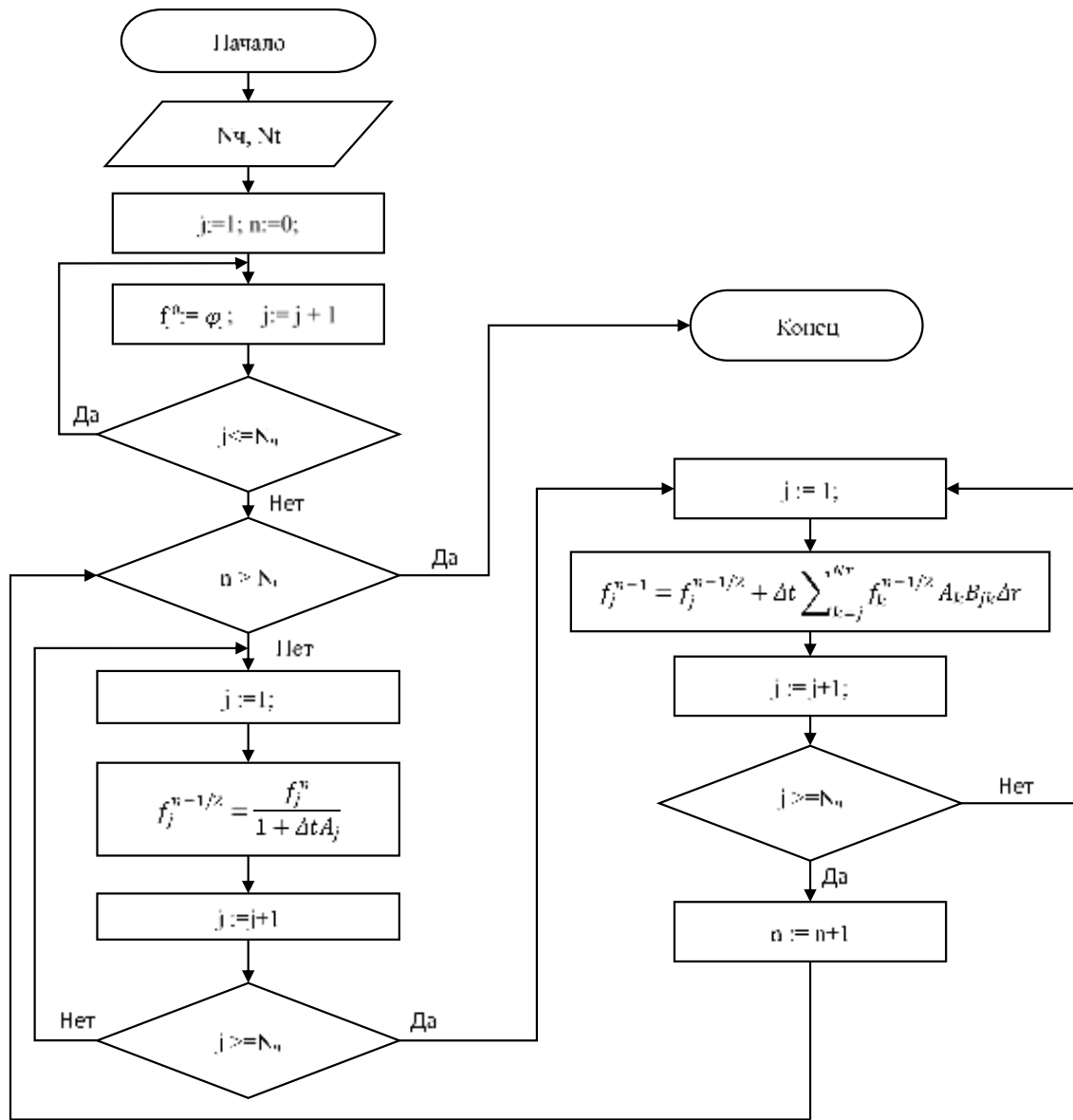


Рисунок 2 – Блок-схема алгоритма расчёта

Для определения  $A(r)$  по соотношению (11) произведён подбор феноменологических коэффициентов, что позволило достичь согласования расчетов с экспериментами (см. таблица 3). Для определения значений коэффициентов  $L$  и  $P_B$  использовался алгоритм градиентного спуска, на основе которого были определены значения:

$$L = 0,169c^{-1}; P_B = 0,018 \quad (18)$$

Феноменологический коэффициент  $L$  для определения  $A(r)$  – движущей силы дробления и поправочный коэффициент  $P_B$  условной вероятности  $B(r, \gamma)$  для данной конкретной планетарной мельницы подбирались из критерия минимума расхождения

расчётных и экспериментальных значений диаметров частиц на конечном времени процесса измельчения при условии соблюдения материального баланса на всем протяжении процесса измельчения.

Таблица 3 – Соотношение конечных средних размеров в момент времени 90 мин.

| Размер шаров, мкм | Соотношение масс | $\langle r_{\text{расчет}} \rangle$ , мкм | $\langle r_{\text{эксп}} \rangle$ , мкм | Относительная ошибка, % |
|-------------------|------------------|-------------------------------------------|-----------------------------------------|-------------------------|
| 2                 | 5:1              | 2,19                                      | 1,83                                    | 16                      |
| 2                 | 3:1              | 2,36                                      | 2,04                                    | 13                      |
| 5                 | 5:1              | 2,87                                      | 2,97                                    | 3                       |
| 5                 | 3:1              | 3,07                                      | 3,42                                    | 10                      |

Проверка адекватности математической модели (10)-(13) проводилась по 20 экспериментальным точкам. Во второй главе (рис. 1) представлены 4 кинетические кривые. На каждой кривой 6 экспериментальных точек. Конечные точки участвовали в поиске феноменологического коэффициента  $L$  для потока дробления. Из рисунка 3 видно хорошее соответствие данных кинетической модели и экспериментальных данных.

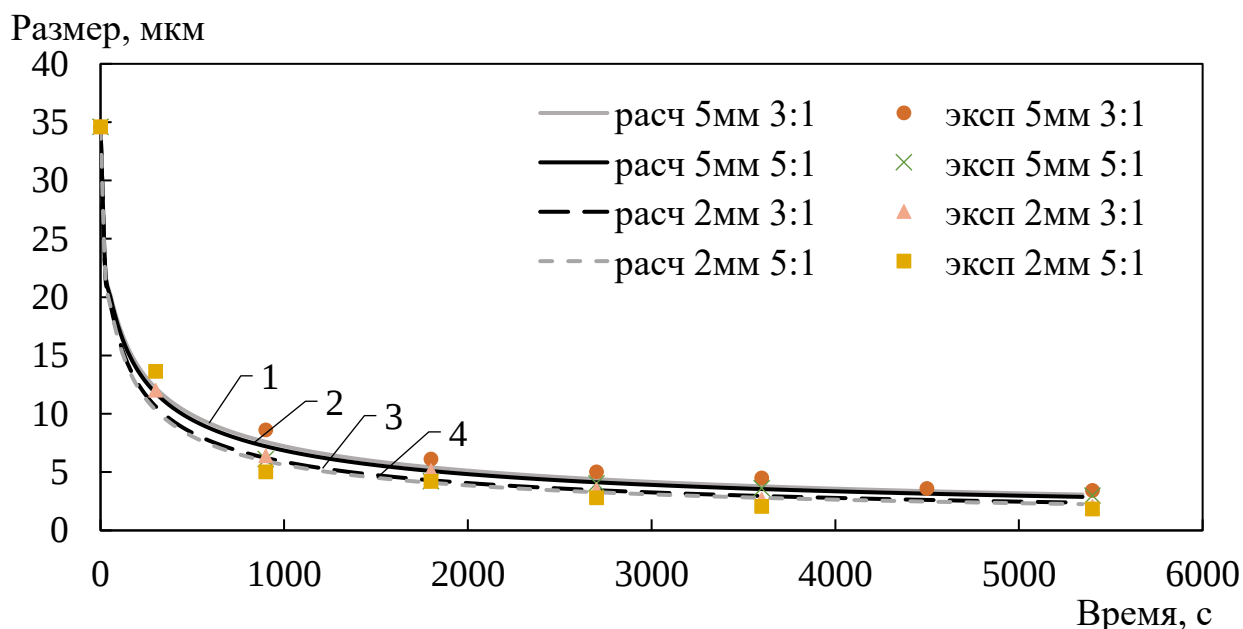


Рисунок 3 – Зависимость среднего размера частиц от времени дробления

На рисунке 4 приведены кривые плотности распределения частиц по размерам в различные моменты времени при установленных размерах шара 3 мм, соотношении масс 3:1.

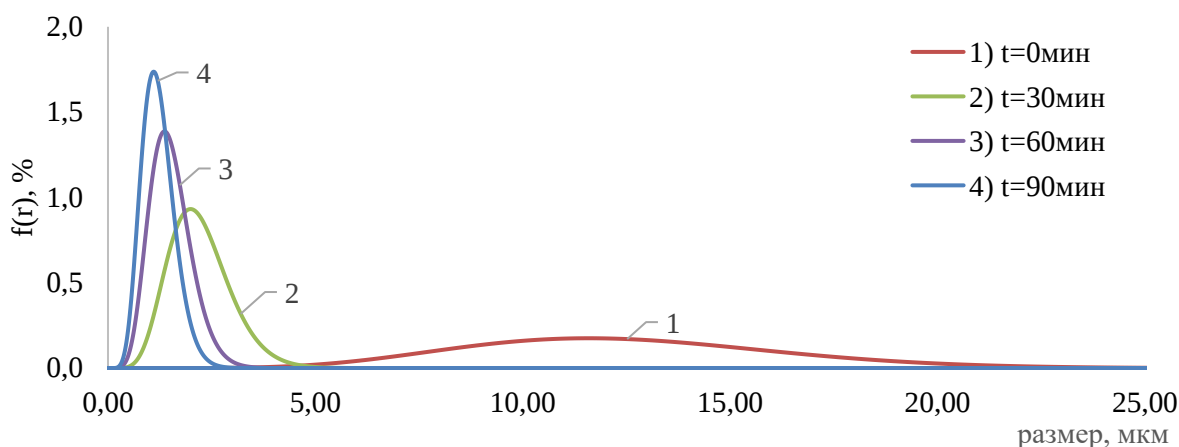


Рисунок 4 – Плотность распределения частиц  $\text{Al}_2\text{O}_3$  по размерам при режимных параметрах размер шара 3мм и соотношением масс 3:1. 1 – начальное распределение частиц, 2 – распределение на 30 минуте измельчения, 3 – распределение на 60 минуте, 4 – распределение на 90 минуте

В таблице 4 представлены средние размеры частиц, устойчивых к дроблению, полученные при расчётах по кинетической модели (10)-(13), на основе вариационного принципа минимума производства энтропии по соотношению (7) и в результате проведения эксперимента, и отклонения значений диаметров относительно результатов эксперимента.

Таблица 4 – Средние размеры частиц (при условиях: размер шара 3 мм, соотношение масс 3:1)

| $d_{\text{кинетика}}$ , МКМ | Отклонение,<br>% | $d_{\text{принцип min } \sigma}$ ,<br>МКМ | Отклонение, % | $d_{\text{эксперимент}}$ ,<br>МКМ |
|-----------------------------|------------------|-------------------------------------------|---------------|-----------------------------------|
| 2,65                        | 2,3              | 2,51                                      | 3             | 2,59                              |

Из таблицы 4 видно, что отклонение расчётных значений диаметров частиц, устойчивых к дроблению полученных из двух математических моделей: из решения уравнения баланса числа частиц, из соотношения (полученного на основе вариационного принципа минимума производства энтропии) от диаметра частицы (полученной в результате эксперимента) не превышает 3 %. Этот результат свидетельствует об адекватности двух математических моделей для определения размера частиц, устойчивых к дроблению. Но математическая модель, основанная на уравнениях (10)-(13) описывает ещё и эволюцию гетерогенной системы, в которой происходит процесс измельчения частиц во времени.

Для получения частиц  $\text{Al}_2\text{O}_3$  с заданными средними размерами в интервале [0,8-2

мкм] (обеспечивающих наилучшие свойства керамоматричных композитов на основе  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ) были произведены расчеты по уравнениям (10)-(13) и определены режимы планетарной мельницы, обеспечивающие попадание размеров частиц в данный интервал. Режимы планетарной мельницы: размер шара 1 мм, соотношение масс в диапазоне [10:1-2:1]; размер шара 2 мм, соотношение масс – [10:1-3:1]; размер шара 3 мм, соотношение масс – [10:1-7:1].

В четвёртой главе на основе полученных результатов описывается методика расчёта процесса измельчения в планетарной мельнице.

**В пятой главе рассмотрены** возможности применения цифрового двойника в образовательной деятельности. Описана структура обучающего VR-модуля, примеры сценариев практических занятий, возможности адаптации модели под разные условия измельчения. Выделены перспективы дальнейшего использования цифрового двойника в промышленной оптимизации технологических процессов.

В пятой главе представлена методика создания цифрового двойника лабораторной планетарной мельницы для моделирования процесса измельчения частиц оксида алюминия. Разработка цифрового двойника была выполнена на платформе Unreal Engine 5 с использованием технологий виртуальной реальности (VR).

В качестве базовой модели мельницы использовалась планетарная мельница, для подробного воссоздания внутренних механических компонентов. Для 3D-моделирования мельницы использовалось программное обеспечение Blender, а окружение лаборатории формировалось с применением ассетов Epic Marketplace.

Особенности цифрового двойника:

- *интеграция математической модели*: виртуальный двойник включает в себя математическую модель кинетики измельчения частиц, которая действует как виртуальный сенсор, отображающий в реальном времени средний размер частиц и скорость процесса;

- *визуализация процесса*: над мельницей в VR-сцене расположена динамическая текстовая панель, отображающая текущий размер частиц, время измельчения и состояние оборудования;

- *интерактивность*: пользователь может свободно перемещаться в лабораторном помещении, взаимодействовать с элементами установки — например, открывать крышку барабана или запускать процесс с панели управления;

– *реалистичность*: благодаря возможностям графического движка проработаны материалы поверхностей, динамические тени и отражения, анимация работы индикаторных ламп и элементов управления.



Рисунок 5 – Отображение результата работы математической модели

На рисунке 5 представлена сцена виртуальной лаборатории, где визуализирован процесс измельчения: на экране над мельницей показано изменение среднего размера частиц по мере работы оборудования.

На основе цифрового двойника была разработана методика проведения учебного процесса:

*Обучение работе с оборудованием*: Студенты проходят процедуру подготовки, загрузки материала, запуска и контроля работы мельницы.

*Виртуальные аварийные ситуации*: Реализована имитация неисправностей, требующая принятия оперативных решений.

*Контроль процесса*: Отображение времени и состояния процесса в реальном времени позволяет анализировать ход измельчения.

*Безопасность и многократность испытаний*: Работа в VR обеспечивает безопасность студентов и позволяет многократно повторять эксперимент с разными параметрами без затрат на реальное оборудование.

Созданный цифровой двойник позволил достичь высокой степени достоверности моделирования измельчения за счёт интегрированной математической модели в качестве виртуального датчика процесса. Отклонение между моделью и реальными экспериментальными данными по конечному размеру частиц в среднем составило 10 %. Это подтверждает эффективность интеграции математического моделирования и технологий VR в учебный процесс.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

По результатам проведенных исследований сформулированы следующие **выводы**:

1. Проведённые в планетарной мельнице экспериментальные исследования по измельчению частиц  $\text{Al}_2\text{O}_3$  обеспечили необходимые данные для построения, верификации математической модели процесса измельчения и проверки адекватности модели.
2. На основе термодинамического подхода определены: структура движущей силы дробления и функциональная зависимость для вероятности дробления.
3. На основе принципа минимума производства энтропии получена зависимость для определения размера частиц, устойчивых к дроблению.
4. Построена математическая модель кинетики процесса дробления частиц в планетарной мельнице.
5. Разработаны разностные схемы для решения интегро-дифференциального уравнения баланса числа частиц, аппроксимирующие данные уравнения со вторым порядком аппроксимации по времени и размеру.
6. Создано программное обеспечение для моделирования процесса дробления.
7. Определены оптимальные условия проведения процесса дробления частиц  $\text{Al}_2\text{O}_3$  в планетарной мельнице для получения частиц со средними размерами в диаметре [1,2-2 мкм], обеспечивающие высокие физико-механические свойства керамоматричных композитов на основе  $\text{Al}_2\text{O}_3$ .
8. Создан цифровой двойник планетарной мельницы, способный не только моделировать процесс измельчения, но и служить инструментом для обучения операторов.
9. Получены 2 авторских свидетельства на программное обеспечение для моделирования процесса измельчения и получен акт внедрения на программный продукт.

## СПИСОК РАБОТ, ОПУБЛИКОВАННЫХ АВТОРОМ

1. Koltsova E., **Babkin M.A.**, Popova N.A., Zhensa A.V. Mathematical modeling of the process of grinding materials // Theoretical Foundations of Chemical Engineering. 2024. Vol. 58. No. 4. P. 1055-1063. (**Web of Science, Scopus**)
2. Koltsova E., **Babkin M.A.**, Mamonova N., Shaneva A., Popova N., Zharikov E. Modeling and optimization of the fabrication of  $\text{Al}_2\text{O}_3$ -based ceramocomposites reinforced with carbon nanotubes // Materials Science Forum. 2020. Vol. 995. P. 27-33. (**Scopus**)

3. Koltsova E.M., **Babkin M.A.**, Shaneva A.S., Popova N.A., Zharikov E.V. To the question of determining the limiting particle size of corundum during grinding // International Journal of Mechanical Engineering and Robotics Research. 2020. Vol. 9. No. 2. P. 207-211. (Scopus)
4. Бабкин М.А. Применение математической модели кинетики процесса измельчения в цифровом двойнике планетарной мельницы / **М.А. Бабкин**, О.В. Валиева // Актуальные вопросы современной науки и образования: сборник статей XXXVI Международной научно-практической конференции, Пенза, 15 марта 2024 года. – Пенза: Наука и просвещение (ИП Гуляев Г.Ю.), 2024. – С. 11-16.
5. Бабкин М.А. Применение технологий виртуальной реальности для работы с цифровым двойником планетарной мельницы / **М.А. Бабкин**, Э.М. Кольцова, В.Н. Приходько // Успехи в химии и химической технологии. – 2023. – Т. 37, № 11 (273). – С. 57-59.
6. Бабкин М.А. Обобщение моделей измельчения оксида алюминия и карбида кремния методами машинного обучения / **М.А. Бабкин**, Э.М. Кольцова // Успехи в химии и химической технологии. – 2020. – Т. 34, № 6 (229). – С. 91-93.
7. Бабкин М.А. Моделирование кинетики процесса измельчения оксида алюминия / **М.А. Бабкин**, Н.А. Попова, Э.М. Кольцова // Успехи в химии и химической технологии. 2019. – Т. 33, № 11 (221). – С. 18-19.
8. Бабкин М.А. Разработка кинетической модели процесса дробления в планетарной мельнице / **М.А. Бабкин**, Ю.В. Терехова, Н.А. Попова, Э.М. Кольцова // Успехи в химии и химической технологии. – 2018. – Т. 32, № 11 (207). – С. 78-80.
9. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2024680829 Российская Федерация. Программный модуль цифрового двойника планетарной мельницы: № 2024669787: заявл. 21.08.2024 : опубл. 03.09.2024 / **М.А. Бабкин**.
10. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2018663724 Российская Федерация. Программный модуль расчёта процесса измельчения оксида алюминия в планетарной мельнице : № 2018660789 : заявл. 08.10.2018 : опубл. 02.11.2018 / Э.М. Кольцова, **М.А. Бабкин** ; заявитель Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева».