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

На правах рукописи

adrum

Бабкин Михаил Андреевич

Разработка математической модели и цифрового двойника процессов измельчения в планетарной мельнице

1.2.2. Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

ДИССЕРТАЦИЯ на соискание ученой степени кандидата технических наук

> Научный руководитель: доктор технических наук, профессор Кольцова Элеонора Моисеевна

ОГЛАВЛЕНИЕ

 1.3 Анализ влияния конструкционных параметров мельницы на

 эффективность измельчения
 31

 Анализ современных математических моделей процесса измельчения 32

2 ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЦЕССА ИЗМЕЛЬЧЕНИЯ КАК ОБЪЕКТА МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ. 51

3 МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВИЖУЩЕЙ СИЛЫ ДРОБЛЕНИЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДОВ НЕРАВНОВЕСНОЙ

ТЕРМОДИНАМИКИ	И	ОПРЕДЕЛЕНИЕ	ЗАВИСИМОСТИ	ДИАМЕТРА	
ЧАСТИЦ А12O3, УСТОЙЧИВЫХ К ДРОБЛЕНИЮ62					

3.6 Результаты расчета значений диаметров частиц оксида алюминия, устойчивых к дроблению при различных режимных параметрах планетарной мельницы 79

4.4 Разработка алгоритма определения феноменологического коэффициента потока дробления частиц оксида алюминия в планетарной мельнице 96

4.6 Выводы по главе 4..... 106

5.1 Разработка методики для создания цифрового двойника 108

5.2 Разработка комплекса программ цифрового двойника планетарной мельницы процесса измельчения частиц оксида алюминия...... 110

5.3 Комплекс программ расчёта процесса измельчения...... 117

5.3.1 Программный модуль моделирования кинетики процесса измельчения 117

5.3.2 Программный модуль поиска коэффициентов математическоймодели 120

5.5 Выводы по главе 5..... 125

Заключение 127

Список сокращений и условных обозначений 129

	Список литературы 130
	Приложение 1. Свидетельство государственной регистрации программы для
ЭВМ	141
	Приложение 2. Свидетельство государственной регистрации программы для
ЭВМ	142
	Приложение 3. Акты о внедрении результатов диссертационной работы 143
	Приложение 4. Диплом победителя программы «УМНИК» 146
	Приложение 5. Листинг программного кода

введение

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:

Проведение экспериментальных исследований процесса измельчения в планетарной мельнице для получения данных по изменению размеров частиц и их распределению по радиусам.

На основе совмещения аппаратов механики гетерогенных сред и термодинамики необратимых процессов определить структуру движущих сил и потоков дробления.

Применив методы термодинамики необратимых процессов (принцип минимального производства энтропии), установить зависимость для диаметра частиц устойчивых к процессу дробления.

Используя соотношения Онзагера, получить структуру потока дробления и определить функциональную зависимость для констант дробления.

Построение математической модели кинетики процесса дробления с учётом экспериментальных данных и полученных зависимостей.

Разработка численного метода для решения интегро-дифференциального уравнения плотности распределения частиц по размерам (объёмам).

Разработка программного обеспечения для моделирования процесса дробления.

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 интегродифференциального 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 промышленной программного комплекса как В 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 базировалась исследования комплексном применении инструментов на математического моделирования, методов механики гетерогенных сред и неравновесной термодинамики, численных методов решения интегродифференциальных 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 физикохимической сущности с последующей адаптацией под конкретные материалы.

Для численного решения использовались схемы расщепления и предикторкорректор, 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

11

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:

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.

Структура термодинамических движущих сил и потоков для процессов измельчения.

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.

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).

Численный метод решения уравнений математической модели процесса измельчения.

Программный комплекс для моделирования процессов измельчения в планетарной мельнице.

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 планетарных НИЦ процессов измельчения порошков В мельницах В "Курчатовский институт", результатов диссертационной работы в учебном процессе программам бакалавриата «Химическая ПО 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.

принимал участие в Автор 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, методы обучения использовал машинного 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.

Благодарности. Автор выражает глубокую благодарность научному руководителю заведующему кафедрой ИКТ РХТУ им. Д.И. Менделеева, профессору, д.т.н. Кольцовой Элеоноре Моисеевне, а также доценту кафедры химической технологии керамики и огнеупоров Поповой Нелли Александровне за помощь и поддержку на всех этапах подготовки диссертации, а также за помощь в подготовке и проведении лабораторных экспериментальных исследований.

1 СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ ИССЛЕДОВАНИЙ ПО АНАЛИЗУ ПРОЦЕССОВ ИЗМЕЛЬЧЕНИЯ КАК ОБЪЕКТОВ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

1.1 Общая характеристика методов измельчения и их применение в промышленности

Мельничные процессы играют важную роль в тяжелой промышленности, обеспечивая измельчение различных материалов до требуемого уровня. Эти процессы включают в себя множество методов и технологий, разработанных для различных целей и материалов. В зависимости от типа материала, его свойств и конечного назначения продукции, выбирается соответствующий метод измельчения.

Тяжелая промышленность включает в себя секторы, такие как горнодобывающая, цементная, металлургическая, химическая и другие отрасли, где требуется обработка больших объемов материалов с высокой энергоемкостью. В этих отраслях технология измельчения часто применяется для получения сырья, подготовки сырья перед последующими технологическими этапами, производства строительных материалов, химических продуктов и другой продукции [1].

Основные характеристики технологии измельчения в тяжелой промышленности включают:

- 1. Энергоемкость: это характеристика процесса, означающая количество энергии, требуемое для выполнения определенной работы. В контексте мельничных процессов, энергоемкость указывает на количество энергии, которое необходимо для измельчения материала до желаемого размера частиц.
- 2. Износостойкость оборудования: это свойство материалов или оборудования, которое определяет их способность сопротивляться износу при эксплуатации. В случае мельничных процессов, где материалы подвергаются сильному абразивному воздействию, износостойкость оборудования является ключевым параметром для обеспечения длительного

срока службы оборудования и снижения затрат на его обслуживание и замену.

- 3. Контроль размера частиц: это процесс мониторинга и регулирования процессе размера частиц В измельчения. Важно поддерживать определенный диапазон размеров частиц в конечном продукте зависимости от его назначения. Контроль размера частиц обеспечивает требуемым соответствие продукции стандартам качества И характеристикам.
- 4. Автоматизация и мониторинг: это применение автоматических систем и средств мониторинга для контроля и управления процессом измельчения. Автоматизация позволяет оптимизировать производственные процессы, снизить вероятность человеческих ошибок и повысить эффективность работы оборудования. Мониторинг позволяет непрерывно отслеживать параметры процесса и оперативно реагировать на любые отклонения или проблемы.

Технология измельчения в тяжелой промышленности постоянно совершенствуется и развивается. Новые методы и оборудование постоянно внедряются для повышения эффективности процесса, снижения энергозатрат и улучшения качества конечной продукции. Это включает в себя разработку новых типов мельниц, улучшение систем управления и контроля, а также внедрение новых материалов для изготовления износостойких деталей оборудования.

Ознакомление с общим обзором технологии измельчения в тяжелой промышленности поможет вам лучше понять контекст вашего исследования и значимость применения математического моделирования для оптимизации этого процесса.

Основные методы измельчения и их применение

При измельчении происходит разрушение частиц за счёт достижения критических напряжений, вызванных воздействием различных внешних сил [2]. Эти воздействия могут включать в себя изменения температуры, ультразвук или

механические воздействия. Механическое воздействие является наиболее распространённым в производственных процессах [3].

Различные типы оборудования могут применяться для обработки частиц, включая их сжатие, разрушение, удары или износ. Выбор конкретного метода зависит от свойств материала, его размеров и других характеристик. Например, материал объемом около двух кубических метров требует специального оборудования, отличного от того, которое используется для обработки частиц размером менее одного микрометра.

Степень измельчения определяется как отношение диаметра самых крупных частиц до измельчения (dH) к диаметру самых крупных частиц после измельчения (dK), обозначаемое как i = dH / dK. При рассмотрении различных значений степеней измельчения можно выделить основные виды процессов измельчения, которые представлены в таблице 1.1 [4].

Вид измельчения	dH, мм	dК, мм
Крупное (дробление)	1500 - 150	250 - 40
Среднее (дробление)	250 - 40	40 - 6
Мелкое (дробление)	25-3	6 – 1
Тонкое (размол)	10 - 1	1 - 75x10 ⁻³
Сверхтонкое (размол)	12 - 0.1	75x10 ⁻³ - 1x10 ⁻⁴

Таблица 1.1 – Вид измельчения в зависимости от размера частиц

Для повышения эффективности процесса измельчения на предприятиях применяется стадийное дробление с последующей передачей раздробленного материала в установку, способную более эффективно обрабатывать материал нужного размера. Таким образом, каждая установка выполняет свою индивидуальную стадию дробления, что определяет ее роль в общем процессе измельчения.

Свойство твердого материала противостоять внутренним напряжениям при нагружении, не разрушаясь, обычно называется прочностью материала, и часто оценивается через предел прочности при сжатии, обозначаемый как ос.

Исходя из значений предела прочности σ_c , измельчаемые материалы классифицируются как мягкие ($\sigma_c < 80$ МПа), материалы средней прочности ($\sigma_c = 80...150$ МПа), прочные ($\sigma_c = 150...250$ МПа) и очень прочные ($\sigma_c > 250$ МПа).

Хрупкость определяется как способность твердого материала разрушаться без заметных пластических деформаций и измеряется числом ударов на специальной платформе с мерным весом. Материал считается очень хрупким, если он выдерживает менее двух ударов, хрупким - от двух до пяти ударов, вязким - от пяти до десяти ударов, и очень вязким - более десяти ударов.

Абразивность измеряется в граммах износа эталонных бил, отнесенных к одной тонне измельченного материала, и отражает степень износа оборудования в процессе обработки материала.

Существуют различные виды мелющих устройств. Мельницы классифицируются по устройству мелющей части. В основном при мелком, тонком и сверхтонком измельчении используют шары из более прочного материала, чем измельчаемый.

Шаровые мельницы работают на основе принципа вращения металлических или керамических шаров внутри цилиндрического барабана, в результате чего происходит разрушение материала. Этот процесс позволяет достичь высокой степени измельчения и контролируемого размера частиц в конечном продукте [5-7].



Рисунок 1.1 – Схема мельницы барабанного типа. а) – барабан устройства; б) – измельчающие сферы внутри устройства

Шаровые мельницы находят широкое применение в различных отраслях промышленности. В горнодобывающей промышленности они используются для измельчения руды перед дальнейшей обработкой. В цементной промышленности шаровые мельницы применяются для помола клинкера и других компонентов цемента перед их смешиванием. Кроме того, они находят применение в производстве керамических изделий, пигментов, красителей и многих других продуктов [8-10].

Основными преимуществами шаровых мельниц являются их высокая производительность и возможность получения продукта с желаемым размером частиц. Однако стоит отметить, что использование шаровых мельниц сопряжено с высокими энергозатратами из-за трения шаров о материал, что может привести к значительным эксплуатационным расходам. Кроме того, для поддержания оптимальной производительности требуется регулярное обслуживание и замена изношенных шаров, что также увеличивает операционные издержки.

Вибрационные мельницы представляют собой тип мельниц, которые используются для измельчения материалов путем применения вибраций. Они состоят из контейнера, в котором помещается материал, и вибрирующей системы, которая создает колебания, приводящие к измельчению материала. Этот процесс позволяет получить продукт с требуемой фракцией и размером частиц.

Вибрационные мельницы широко используются в промышленности благодаря их низкой энергоемкости и способности обеспечивать равномерное измельчение материалов. Они особенно эффективны для измельчения мягких и хрупких материалов, таких как стекло, керамика, полимеры и продукты питания [11-13].



Рисунок 1.2 – Схема вибрационной мельницы. 1- электродвигатель, 2 – эластичная муфта, 3- корпус, 4 – вал вибратора, 5 – дебаланс, 6 – подшипники, 7 – пружины

Применение вибрационных мельниц может быть в различных отраслях промышленности. В фармацевтической промышленности они используются для измельчения твердых лекарственных веществ до порошкообразной формы. В пищевой промышленности они могут применяться для измельчения продуктов, таких как специи и зерновые культуры.

Одним из главных преимуществ вибрационных мельниц является их низкая энергоемкость по сравнению с другими методами измельчения [14,15]. Это позволяет снизить эксплуатационные расходы и сделать процесс более экономически эффективным. Кроме того, вибрационные мельницы создают минимальное количество пыли, что делает их более безопасными для использования и обеспечивает чистую рабочую среду.

Однако стоит отметить, что производительность вибрационных мельниц может быть ограничена по сравнению с другими методами измельчения, и для достижения желаемого размера частиц может потребоваться проведение частых регулировок. Это может привести к увеличению времени настройки и снижению общей производительности процесса.

Роликовые мельницы представляют собой тип мельниц, в которых измельчение материала происходит за счет сжатия и сдавливания его между двумя вращающимися роликами. Этот процесс позволяет добиться высокой степени

измельчения и равномерного распределения размеров частиц в конечном продукте. [16-18]



Рисунок 1.3 – Схема валковой дробилки

Применение роликовых мельниц может быть обнаружено в различных отраслях промышленности. В горнодобывающей промышленности они используются для измельчения руды и угля перед дальнейшей обработкой. В цементной промышленности роликовые мельницы применяются для помола клинкера и других компонентов цемента перед смешиванием. Кроме того, они находят применение В производстве керамических изделий, пигментов, красителей и других продуктов [19,20].

Основным преимуществом роликовых мельниц является их высокая степень измельчения и равномерное распределение размеров частиц в конечном продукте. Это делает их подходящим выбором для многих производственных процессов, где требуется получение продукта определенной фракции.

Кроме того, роликовые мельницы имеют меньшие энергозатраты по сравнению с некоторыми другими методами измельчения, что может снизить эксплуатационные расходы и сделать процесс более экономически эффективным. Они также обычно не создают большого количества пыли, что делает их более безопасными для использования и обеспечивает чистую рабочую среду. Однако следует учитывать, что применение роликовых мельниц ограничено для материалов с низкой влажностью, и для поддержания оптимальной производительности требуется регулярное обслуживание и замена изношенных роликов, что также может увеличить операционные издержки.

Планетарные мельницы представляют собой специальный тип мельниц, где процесс измельчения осуществляется за счет вращения контейнера с материалом вокруг своей оси и одновременного вращения этого контейнера вокруг оси мельницы. Этот двойной вращательный процесс создает высокую интенсивность измельчения и позволяет получать продукт с высокой степенью измельчения и контролируемым размером частиц [21-23].

Планетарные мельницы широко применяются в научных исследованиях, производстве наноматериалов, керамической промышленности, фармацевтике и других отраслях. Они позволяют получить продукт с желаемыми свойствами, такими как узкий размер частиц, высокая дисперсия и хорошая равномерность.

Одним из основных преимуществ планетарных мельниц является их способность обрабатывать различные типы материалов, включая твердые и хрупкие материалы. Они также позволяют проводить процесс под защитной атмосферой, что особенно важно для материалов, чувствительных к окислению или реактивных [24-26].

Кроме того, планетарные мельницы обычно обладают высокой производительностью и могут обрабатывать большие объемы материала за короткое время. Это делает их эффективным инструментом для промышленного производства и исследовательских лабораторий [27,28].

Однако следует отметить, что планетарные мельницы обычно имеют более высокую стоимость оборудования по сравнению с некоторыми другими методами измельчения. Кроме того, их производительность может быть ограничена для больших объемов материала.

Помимо шаровых, вибрационных, роликовых и планетарных мельниц, существует ряд других типов оборудования, используемого для измельчения материалов в различных отраслях промышленности. Среди них можно выделить

молотковые мельницы, дисковые мельницы, молотковые дробилки, шредеры и дробилки с валом.

Молотковые мельницы работают по принципу ударного измельчения, где материал размалывается под действием ударов молотков, вращающихся на высокой скорости. Дисковые мельницы используются для измельчения материалов путем сжатия и измельчения их между двумя вращающимися дисками. Молотковые дробилки также используются для измельчения материалов, применяя механическое давление и ударные силы.

Шредеры и дробилки с валом используются для измельчения более крупных и твердых материалов, таких как металлолом, пластик и дерево. Они оснащены роторами с острыми лезвиями или зубьями, которые режут и дробят материал на более мелкие частицы.

Каждый из этих типов оборудования имеет свои уникальные особенности и преимущества, и выбор конкретного метода зависит от характеристик материалов, требований производства и конечных целей обработки. Важно выбирать оборудование, которое наилучшим образом соответствует специфике задачи и обеспечивает необходимую степень измельчения и качество конечного продукта.

Планетарные мельницы: структура и принцип действия

Планетарные мельницы представляют собой тип оборудования, который нашёл широкое применение в научных исследованиях, лабораторных испытаниях, промышленном производстве и разработке новых материалов. Они отличаются своей специфической конструкцией, которая включает в себя контейнер с материалом, который вращается вокруг своей оси и одновременно вращается вокруг общей оси мельницы. Этот двойной вращательный процесс создает интенсивные условия измельчения, обеспечивая высокую степень дисперсии и контроль размера частиц в конечном продукте.

Одним из ключевых преимуществ планетарных мельниц является их способность обрабатывать различные типы материалов, включая твердые и хрупкие. Это делает их идеальным инструментом для производства наноматериалов, керамических порошков, фармацевтических препаратов и других продуктов, где требуется высокая степень измельчения и контролируемый размер частиц.

На рисунке 1.4 изображена планетарная мельница. Данный тип устройства способен работать как в сухом, так и в мокром режиме.



Рисунок 1.4 – Схема планетарной мельницы

Структура планетарной мельницы включает в себя несколько основных компонентов:

- 1. Основной корпус: это основная рама мельницы, которая обычно изготавливается из прочных металлических сплавов. В этом корпусе располагаются двигатель, передачи и другие механизмы управления вращением.
- 2. Контейнеры с материалом: это специальный контейнер, в котором помещается материал для измельчения. Он обычно имеет форму цилиндрическую форму и может вращаться вокруг своей оси и вокруг общей оси мельницы.
- 3. Планетарный редуктор: это механизм, который обеспечивает вращение контейнера вокруг его собственной оси и вокруг общей оси мельницы. Редуктор состоит из зубчатых колес и зубчатых передач, которые передают вращение от основного двигателя к контейнерам.

Принцип действия планетарной мельницы основан на создании движения контейнера с материалом по двум осям одновременно: вращение вокруг своей оси и вращение вокруг общей оси мельницы. Этот двойной вращательный процесс создает интенсивные условия измельчения, так как материал подвергается силам центробежного и центростремительного воздействия.

Когда контейнер вращается вокруг своей оси, материал внутри него подвергается интенсивному смешиванию и перемешиванию, что способствует равномерному измельчению и дисперсии. В то же время вращение контейнера вокруг общей оси мельницы создает дополнительное воздействие центробежных сил, которые усиливают измельчающий эффект.

Таким образом, благодаря комбинации движения по двум осям, планетарная мельница обеспечивает высокую степень дисперсии и контроль размера частиц в конечном продукте. Этот принцип действия делает её эффективным инструментом для производства наноматериалов, керамических порошков, фармацевтических препаратов и других продуктов, где требуется высокая степень измельчения и контролируемый размер частиц.

Основные характеристики планетарной мельницы включают в себя следующие аспекты:

- 1. Высокая Планетарные мельницы способны степень измельчения: обеспечить высокую степень измельчения материалов благодаря интенсивным условиям перемешивания, создаваемым движением контейнера по двум осям. Это позволяет получать продукт с желаемым размером частиц, включая наноматериалы и мельчайшие порошки.
- Широкий спектр материалов: Планетарные мельницы могут обрабатывать различные типы материалов, включая твердые и хрупкие материалы. Это делает их универсальным инструментом для производства разнообразных продуктов, от керамических порошков до фармацевтических препаратов.
- 3. Контроль размера частиц: Планетарные мельницы обеспечивают высокую степень контроля над размером частиц в конечном продукте. Это позволяет

получать продукт с желаемыми свойствами, такими как узкое распределение размеров частиц и однородность состава.

- 4. Эффективность и производительность: Планетарные мельницы обладают высокой эффективностью работы и способностью обрабатывать большие объемы материала за короткое время. Это делает их подходящими для промышленного производства и исследовательских лабораторий, где требуется высокая производительность и скорость обработки.
- 5. Контроль процесса: Планетарные мельницы обычно оснащены специальными системами управления, которые позволяют контролировать различные параметры процесса, такие как скорость вращения контейнера, время измельчения и температура. Это обеспечивает более точное выполнение технологических операций и повышает качество конечного продукта.

Планетарные мельницы представляют собой разнообразные и гибкие системы, которые могут быть модифицированы и настроены под различные требования и задачи. Вот некоторые основные разновидности и модификации планетарных мельниц:

- 1. Лабораторные планетарные мельницы: Эти модели предназначены для использования в научных исследованиях и лабораторных испытаниях. Они обычно компактны и имеют небольшой рабочий объем, что делает их идеальным выбором для изучения малых объемов материала и проведения экспериментов.
- Промышленные планетарные мельницы: Эти модели предназначены для использования в промышленном производстве и обрабатывают большие объемы материала. Они обычно имеют больший рабочий объем и более мощные двигатели для обеспечения высокой производительности и эффективности работы.
- Планетарные мельницы с вакуумным или инертным атмосферным окружением: Эти модели обеспечивают возможность работы под контролем вакуума или инертного газа. Это позволяет избегать окисления

или реакций материалов с атмосферными газами и обеспечивает чистоту и качество конечного продукта.

- 4. Многобарабанные планетарные мельницы: Эти модели оснащены несколькими контейнерами, которые могут вращаться независимо друг от друга. Это позволяет одновременно обрабатывать несколько образцов или материалов с разными характеристиками, что повышает производительность и гибкость работы.
- 5. Планетарные мельницы с различными типами контейнеров: Некоторые модели планетарных мельниц могут быть оснащены специальными контейнерами различных форм и размеров, а также с различными материалами покрытия внутренней поверхности. Это позволяет оптимизировать процесс измельчения для конкретных типов материалов и требований производства.
- 6. Планетарные мельницы с различными типами приводов: Некоторые модели мельниц могут иметь различные типы приводов, такие как электрические, гидравлические или пневматические приводы. Это обеспечивает большую гибкость и адаптивность в выборе наилучшего режима работы в зависимости от конкретных потребностей процесса.

1.2 Результат физико-химического анализа свойств диоксида циркония и оксида алюминия для моделирования измельчения

Диоксид циркония, также известный как двуокись циркония (ZrO₂), представляет собой неорганическое соединение, являющееся оксидом циркония. В природе он встречается в виде минерала бадделеита, но чаще всего добывается и синтезируется искусственно.

Этот материал обладает целым рядом уникальных свойств, делающих его востребованным в различных областях.

Прочность и стойкость:

Диоксид циркония чрезвычайно прочен, по шкале Мооса его твердость составляет 6,5, что сравнимо с твердостью кварца. Он обладает высокой устойчивостью к царапинам, истиранию и механическим повреждениям. Благодаря своей термостойкости диоксид циркония способен выдерживать экстремальные температуры до 2200°С, не деформируясь и не плавясь. Химическая стойкость материала также на высоте – он не вступает в реакции с кислотами, щелочами и другими агрессивными средами.

В стоматологии диоксид циркония используется для создания коронок, мостов, виниров и имплантов [29]. Благодаря своей биосовместимости он не вызывает аллергических реакций и хорошо приживается в организме. В ювелирном деле из диоксида циркония изготавливают фианиты – искусственные бриллианты, которые не уступают по красоте и блеску своим природным аналогам. В химической промышленности он применяется для производства керамических емкостей, фильтров и катализаторов. В строительстве диоксид циркония используется для изготовления облицовочной плитки и огнеупорных медицине из него делают керамические имплантаты материалов. В И хирургические инструменты. Оптические элементы, высокотемпературные покрытия и электроды – это лишь некоторые другие области применения этого уникального материала.

Исследования в области высокотемпературных материалов ведутся с использованием диоксида циркония. Его способность выдерживать экстремальные условия делает его перспективным материалом для создания термостойких деталей покрытий, космических аппаратов И других высокотехнологичных продуктов. Разработка керамических имплантатов – еще одно направление, где диоксид циркония играет важную роль.

Его биосовместимость и прочность позволяют создавать надежные и долговечные импланты, которые успешно заменяют собой поврежденные части скелета. Изучение каталитических свойств диоксида циркония открывает новые возможности для химической промышленности.

28

Оксид алюминия, также известный как глинозем, представляет собой неорганическое соединение с химической формулой Al_2O_3 . Он является одним из наиболее распространенных оксидов в земной коре и встречается в природе в виде минерала корунда, а также в составе различных бокситов и глинистых минералов. Оксид алюминия обладает уникальным набором физико-химических свойств, обуславливающих его широкое применение в различных областях науки и техники [30].

Оксид алюминия имеет кристаллическую структуру, в которой атомы алюминия окружены шестью атомами кислорода. Существует несколько кристаллических модификаций оксида алюминия, наиболее распространенными из которых являются α- Al₂O₃ (корунд) и γ- Al₂O₃.

• α - Al₂O₃:

- Наиболее стабильная модификация
- Тригональная кристаллическая система
- о Высокая твердость (9 по шкале Mooca)
- Высокая термостойкость (температура плавления 2050 °C)
- Химическая стойкость
- о Плотность 3,98 г/см³
- γ -Al₂O₃:
 - Метастабильная модификация
 - Кубическая кристаллическая система
 - о Более низкая твердость и термостойкость по сравнению с α-Al₂O₃
 - Более высокая химическая активность
 - Плотность 3,67 г/см³

Оксид алюминия обладает высокой температурой плавления (2050 °C) и теплопроводностью (30-35 Вт/(м·К)). Он является огнеупорным материалом и способен выдерживать высокие температурные нагрузки без деформации и разрушения.

Оксид алюминия является амфотерным оксидом, то есть он может реагировать как с кислотами, так и с щелочами. Однако его амфотерные свойства

выражены слабо. Он не растворяется в воде и устойчив к действию большинства кислот (за исключением плавиковой).

Оксид алюминия является бесцветным или белым веществом в чистом виде. Однако он может приобретать различные окраски в зависимости от присутствующих примесей. Например, рубин имеет красный цвет из-за примеси хрома, а сапфир – синий из-за примеси титана.

Благодаря своей твердости, оксид алюминия является одним из самых эффективных абразивных материалов [31]. Он применяется для шлифования различных материалов, таких как металлы, дерево, стекло, камень и т.д. Оксид алюминия используется в качестве полировального материала для придания глянцевой поверхности различным изделиям. Его высокая твердость позволяет использовать его для резания различных материалов, таких как металлы, стекло, керамика и т.д.

Оксид алюминия обладает очень высокой термостойкостью (температура плавления 2050 °C). Благодаря своей термостойкости он используется в производстве огнеупорных материалов, таких как кирпичи, тигли и футеровка печей.

Огнеупорные материалы из оксида алюминия используются в различных отраслях промышленности, таких как металлургия, стекольная промышленность и химическая промышленность. Тигли из оксида алюминия используются для плавки металлов и других материалов при высоких температурах. Футеровка печей из оксида алюминия используется для защиты стен печей от разрушения при высоких температурах [32].

Оксид алюминия обладает высокой химической стойкостью и не растворяется в воде и большинстве кислот и щелочей. Благодаря своей химической стойкости он используется в химической промышленности для производства различных химических продуктов [33]. В нефтехимической промышленности оксид алюминия используется в качестве катализатора и адсорбента. В пищевой промышленности оксид алюминия используется в качестве добавки в пищевые продукты и в качестве упаковочного материала.

Благодаря своим электроизоляционным свойствам оксид алюминия используется в электронике в качестве изоляторов и подложек для интегральных схем. Оксид алюминия используется в качестве изоляторов В кабелях, конденсаторах и других электронных компонентах. Оксид алюминия используется качестве подложек для интегральных схем благодаря своей высокой В теплопроводности и способности отводить тепло от кристалла микросхемы [34,35].

Оксид алюминия является уникальным материалом с широким спектром применения. Его ценные свойства, такие как твердость, термостойкость, химическая стойкость и электроизоляционные свойства, делают его незаменимым в различных областях

1.3 Анализ влияния конструкционных параметров мельницы на эффективность измельчения

Эффективность измельчения в планетарной мельнице зависит от множества факторов, среди которых особое значение имеют параметры, непосредственно связанные с конструкцией и режимом работы мельницы. В данном разделе мы подробно рассмотрим влияние таких параметров, как скорость вращения, частота вращения, соотношение размеров мелющих тел, загрузка мельницы, материал мелющих тел, добавки, продолжительность измельчения, атмосфера измельчения, температура измельчения и конструкция мельницы [36].

Скорость вращения является одним из ключевых параметров, влияющих на эффективность измельчения в планетарной мельнице. Увеличение скорости вращения приводит к повышению энергии удара, следовательно мелющие тела, вращающиеся с большой скоростью, при ударе о материал передают ему больше энергии. За счет более интенсивного воздействия размер частиц материала уменьшается быстрее.

Однако при слишком высокой скорости вращения материал может перегреваться. Это может привести к его разрушению и снижению качества.

Высокая скорость вращения приводит к более интенсивному истиранию мелющих тел и мельницы.

Оптимальная скорость вращения зависит от многих факторов, таких как свойства материала, размер мелющих тел, мощность мельницы и желаемый размер частиц.

Частота вращения планетарного механизма также оказывает влияние на процесс измельчения. Повышение частоты вращения увеличивает количество ударов в единицу времени, и мелющие тела наносят больше ударов по материалу, что способствует более однородному измельчению за счет более частого воздействия размер частиц материала становится более однородным.

Однако при слишком высокой частоте вращения может происходить слипание мелких частиц друг с другом, что негативно влияет на эффективность измельчения. Оптимальная частота вращения подбирается с учетом свойств материала, размера мелющих тел, скорости вращения и желаемого результата.

Использование мелющих тел разных размеров позволяет повысить эффективность Применение измельчения. мелющих тел разных размеров обеспечивает более комплексное воздействие на материал. Крупные мелющие тела дробят крупные куски, а мелкие измельчают их до желаемого размера. Мелющие тела определенной формы могут улучшить эффективность измельчения. Например, шаровые мелющие тела хорошо подходят ДЛЯ измельчения хрупких материалов.

1.4 Анализ современных математических моделей процесса измельчения

Процесс измельчения материалов играет критическую роль в различных отраслях промышленности, таких как химическая, горнодобывающая, фармацевтическая, пищевая и многие другие. Эффективность измельчения напрямую влияет на качество продукции, производительность и энергозатраты.

В связи с этим, возрастает потребность в разработке методов оптимизации процесса измельчения. Одним из наиболее эффективных инструментов для этого является математическое моделирование. Математические модели позволяют предсказать влияние различных параметров на эффективность измельчения, таких как размер и форма мелющих тел, скорость вращения мельницы, загрузка мельницы, свойства материала и другие.

Модели также могут быть использованы для разработки новых технологий измельчения и оптимизации существующих.

Существует несколько типов математических моделей процесса измельчения, каждая из которых имеет свои преимущества и недостатки.

Модели, основанные на законах механики. Они описывают измельчение как результат механического воздействия (удары, сжатие). Используют законы механики для расчета сил, действующих на измельчаемый материал. Область применения таких моделей – это расчет энергоемкости процесса измельчения и определение оптимальных размеров и формы, мелющих тел. Такие модели просты в использовании, а также хорошо описывают процесс измельчения хрупких материалов. Из недостатков таких моделей то, что они не учитывают влияние многих факторов, влияющих на процесс измельчения. Не всегда точны при измельчении вязких и пластичных материалов. Например, модель Бонда описывает измельчение как дробление кусков под действием ударных нагрузок. Используется для расчета энергоемкости процесса измельчения и определения оптимальных размеров, мелющих тел.

Модели, основанные на законах термодинамики учитывают влияние температурных факторов на процесс измельчения. Используют законы для тепловыделения измельчении. Область термодинамики расчета при применения направлена на расчет тепловыделения при измельчении. Определение оптимальных режимов охлаждения мельницы. Такие модели учитывают влияние Могут быть температуры процесс измельчения. использованы на ДЛЯ моделирования измельчения термочувствительных материалов. Недостатками таких моделей то, что они сложны в использовании. Не всегда точны при измельчении материалов с низкой теплопроводностью. Пример - модель

Риттингера, учитывает влияние температуры на вязкость материала и скорость измельчения. Используется для расчета энергоемкости процесса измельчения

Модели, основанные на статистических методах, используют статистические методы для обработки экспериментальных данных и определения зависимостей между параметрами процесса измельчения. Позволяют определять зависимостей между параметрами процесса измельчения и размером продукта и прогнозировать результатов измельчения при различных исходных параметрах. Просты в использовании и не требуют знания фундаментальных законов механики и термодинамики. Не всегда точны и не могут быть использованы для проектирования новых мельниц. К примеру, в основе таких методов использую регрессионный анализ. Используется для подбора уравнения регрессии, связывающее размер частиц продукта измельчения с параметрами процесса.

Модели, основанные на уравнениях баланса числа частиц, описывают изменение количества частиц разных размеров в процессе измельчения. Используют уравнения баланса массы и числа частиц [37]. Позволяют моделировать динамику измельчения и добиться оптимизации режимов работы мельницы. Хорошо описывают динамику измельчения. Могут быть использованы для оптимизации режимов работы мельницы. Такие модели сложны в использовании и требуют знания фундаментальных законов механики и термодинамики.

Модель учитывает два основных механизма измельчения: дробление и агломерацию частиц. Дробление – это процесс разделения крупных частиц на более мелкие который описывается функцией распределения вероятности дробления. Агломерация – это процесс слипания мелких частиц в более крупные. Описывается функцией распределения вероятности агломерации.

Уравнения баланса описывают изменение концентрации частиц разных размеров во времени. В перечень параметров модели входят функция распределения вероятности дробления, функция распределения вероятности

34

агломерации, начальный гранулометрический состав материала и параметры мельницы.

Ограничениями модели является то, что модель не учитывает влияние температурных факторов. Модель не всегда точна при измельчении вязких и пластичных материалов.

Обзор существующих математических моделей измельчения

В современной науке и практике обработки твердых материалов большое уделяется моделированию процессов измельчения. внимание Существует обширная литература, в которой рассматриваются как фундаментальные подходы к описанию динамики распределения частиц, так и практические аспекты оптимизации технологических установок. Авторы различных исследований используют модели баланса частиц для описания процессов разрушения, в которых ключевыми элементами являются функции, определяющие скорость разрушения частиц и распределение дочерних фрагментов [38-58]. При этом применяются как непрерывные, так и дискретные подходы, что позволяет адаптировать модели под специфические условия процесса. Особое внимание уделяется методам аппроксимации, таким как метод моментов (QMOM, DQMOM), которые существенно снижают вычислительную сложность задачи. Кроме того, современные исследования стремятся расширить классический подход, включая дополнительные параметры, например, энергию разрушения и морфологические характеристики частиц, что особенно актуально для процессов измельчения и оптимизации работы мельниц. Эти работы не только улучшают теоретическую базу, но и способствуют практическому применению моделей для повышения эффективности И снижения энергозатрат В промышленных установках.

Моновариантная модель, подразумевающая учёт только размера в статьях [38-43] это уравнение баланса описывает изменение распределения частиц по размеру f(r, t). В чистом процессе разрушения уравнение имеет вид:

$$\frac{\partial f(r,t)}{\partial t} = -A(r)f(r,t) + \int_{r}^{r_{\max}} A(\gamma) B(r;\gamma)f(\gamma,t) d\gamma$$
(1.1)

где A(r) – вероятность разрушения, f(r,t) – функция распределения частиц в момент времени, B($r; \gamma$) – распределение частиц при разрушении более крупной частицы.

Здесь учитывается уменьшение числа крупных частиц (член с A(r)) и образование новых фрагментов (интегральный член с $B(r; \gamma)$).

Статьи [44] и [45] расширяют модель, вводя вторую переменную – энергию разрушения *e*. Функция распределения теперь имеет вид f(r, e, t), а уравнение баланса записывается с учетом зависимости от обеих переменных:

$$\frac{\partial f(r,e,t)}{\partial t} = -A(r,e) f(r,e,t) + \int_{r}^{\infty} \int A(\gamma,e_{0}) B(r,e;\gamma,e_{0}) f(\gamma,e_{0},t) d\gamma de_{0}$$
(1.2)

Это позволяет учесть влияние механической прочности частиц (разбиваемость) на процесс измельчения.

В статьях [48] и [49], процесс описывается в дискретном виде. Материал разделяют на размерные интервалы, и для каждого интервала записывается баланс весовых долей $l_i(t)$:

$$\frac{dl_i(t)}{dt} = -K_i \, l_i(t) + \sum_{j=i+1}^{n_s} b_{i,j} \, K_j \, l_j(t). \tag{1.3}$$

где *K_i* – вероятность разрушения, *b_{i,j}* – распределение частиц при разрушении более крупной частицы.

Функция вероятности разрушения

Функция *A*() описывает скорость или вероятность разрушения частицы определённого размера (или с определёнными свойствами).

В ряде исследований (например, в моновариантном подходе [45, 49]) функция задаётся через экспериментально измеренные константы разрушения *K*(*r*). Для самой крупной группы наблюдается экспоненциальное затухание:

$$l_1(t) = \exp(-K_1 t)$$
 (1.4)
В бивариантном моделировании (где учитывается также энергия разрушения) A(r, e) включает дополнительное экспоненциальное затухание по энергии, отражая влияние механической прочности частиц [45].

$$A(r,e) = A_0 \left(\frac{r}{r_{\max}}\right)^{a_0} \exp\left(-\frac{e}{e^*}\right), \qquad (1.5)$$

где параметры задаются экспериментально (например, $A_0 = 0.5 \text{ мин}^{-1}$, $a_0 = 2$, $r_{\text{max}} = 6 \text{ мм}$; e^* – характерная энергия).

В работах [46,47] скорость разрушения частиц массой m, пропорциональна произведению масс частиц на (*m*-*s*, *s*), на которые она разрушается.

В модели [48] скорость разрушения частиц S_i определяется эмпирически посредством экспоненциальной зависимости от приведённого размера. При переходе к непрерывному виду функция A(r) (вероятность разрушения) записывается как:

$$A(r) = \exp(a_0 + a_1 \tilde{r} + a_2 \tilde{r}^2 + a_3 \tilde{r}^3), \qquad (1.6)$$

где приведённый (нормированный) размер r определяется по формуле

$$\tilde{r} = \frac{\ln\left(\frac{r}{\bar{r}_{\min}}\right)}{\ln\left(\frac{\bar{r}_{\max}}{\bar{r}_{\min}}\right)},\tag{1.7}$$

при этом \bar{r}_{min} и \bar{r}_{max} – геометрические средние значения для нижнего и верхнего пределов размерной шкалы.

В исследованиях по нелинейному поведению (сухого измельчения) наблюдаются изменения скорости разрушения, которая, может сначала возрастать, а затем снижаться в зависимости от конкретного распределения размеров и энергии [44].

Функция распределения дочерних частиц

Функция *B*() описывает, как при разрушении родительской частицы образуются дочерние фрагменты разного размера. Это ключевой параметр, влияющий на форму конечного распределения частиц.

Классический метод – использование ядра Austin [8], где кумулятивное распределение фрагментов записывается как

$$B(r,\gamma) = U\left(\frac{r}{\gamma}\right)^{a} + (1-U)\left(\frac{r}{\gamma}\right)^{c},$$
(1.8)

где *U*, *a*, *c* – коэффициаенты описывающие форму распределения.

Дифференциальное распределение получается путём вычитания значений кумулятивной функции для соседних интервалов [53].

При моделировании множественного разрушения с учётом морфологии частиц (работа Priscilla J. Hill [41]) вводится совместное распределение по размеру и по форме. Такой подход позволяет учесть, что кроме размера важны и геометрические параметры (например, коэффициент формы), влияющие на качество продукта.

В некоторых исследованиях, например, в работе про зубчатое колесо [42], распределение дочерних частиц используется вместе с оценкой влияния параметров оборудования на кинетику. Распределение *B*() сочетается с экспериментальными данными для калибровки модели.

Функция $B(r, e; \gamma, e_0)$ задаёт распределение дочерних частиц (с радиусом r и энергетической характеристикой e), полученных при разрушении родительской частицы (радиус γ , энергия e₀). Её принято представлять в виде разложения на две части:

$$B(r, e; \gamma, e_0) = B_r(r; \gamma) B_e(e)$$
(1.9)

Где распределение по размеру (радиусу):

$$B_r(r;\gamma) = \frac{a_0}{\gamma} \left(\frac{r}{\gamma}\right)^{\frac{5a_0}{6}-1}$$
(1.10)

При $a_0 = 2$ получается степень $\frac{5 \cdot 2}{6} - 1 = \frac{10}{6} - 1 = \frac{2}{3}$, то есть

$$B_r(r;\gamma) = \frac{2}{\gamma} \left(\frac{r}{\gamma}\right)^{\frac{2}{3}}.$$
(1.11)

Распределение по энергетической характеристике использует логнормальное распределение:

$$B_e(e) = \frac{1}{e\sqrt{2\pi\sigma_E^2}} \exp\left[-\frac{\left(\ln\frac{e}{e_{50}}\right)^2}{2\sigma_E^2}\right]$$
(1.12)

где e_{50} – медиана, а σ_E – геометрическая дисперсия энергии разрушения.

В работах [59-61] Hsia и Tavlarides анализируют процесс разрушения капель в жидкостных системах. При разрушении капли предполагается, что каждая родительская капля распадается на две дочерние, и их размер распределяется согласно условной функции плотности, которая задаёт вероятность получения дочерней капли с определённым диаметром при известном размере родительской капли.

$$B(r,\gamma) = \frac{{}^{30P_B}}{\gamma} \left(\frac{r}{\gamma}\right)^2 \left(1 - \frac{r}{\gamma}\right)^2.$$
(1.13)

Эта функция подбирается таким образом, чтобы гарантировать сохранение массы (то есть суммарный объём дочерних капель равен объёму родительской) и учитывает статистическую природу разрушения в турбулентном потоке. Авторы отмечают, что традиционные формулы для частоты разрушения и коалесценции иногда оказываются недостаточно точными, поэтому в их модели предложены модифицированные подходы, позволяющие лучше описывать экспериментально наблюдаемые распределения по размеру и концентрации капель.

Таким образом, распределение дочерних капель играет ключевую роль в прогнозировании динамики дисперсии, поскольку оно напрямую влияет на итоговую размерную и концентрационную структуру системы.

Модели с учётом влияния поверхностных свойств

В работе [62] продемонстрировано, что прочность агломератов определяется множеством факторов, при этом одним из ключевых является сила межчастичного соединения. В зависимости от метода агломерации эта прочность может обеспечиваться как наличием связующего вещества, так и чисто межчастичным сцеплением. Существуют две широко цитируемые модели – одна разработана Rumpf H. [63], другая – Kendall K.J. [64]. Первая трактует прочность агломерата как силу, необходимую для одновременного разрыва всех контактов на определённой плоскости отрыва, а вторая рассматривает её как сопротивление распространению трещины согласно линейной упругости механики разрушения. Эти модели особенно применимы к случаям, когда разрушение происходит за

счёт фрагментации поверхности агломерата. Однако агломераты могут разрушаться и посредством отрыва мелких частиц, что требует иных подходов. Более того, применение моделей Kendall K.J. и Rumpf H. к ударам осложняется тем, что механизмы разрушения зависят от скорости удара и физических свойств агломерата [64]. Для систем, способных аккумулировать энергию упругой деформации, модель Kendall K.J. согласуется с критерием Гриффита для распространения трещины, в то время как модель Rumpf H. может быть более релевантной для случаев с пластической деформацией, поскольку основана на простом силовом балансе.

Экспериментальные данные в литературе подтверждают, что обе модели результаты, могут давать согласованные хотя детального анализа ИХ применимости пока нет. Тем не менее, Subero J. [65] показал, что при различном уплотнении фракции обе модели предсказывают сходные числовые значения, несмотря на различие функциональных зависимостей. Анализ прочности агломератов с точки зрения сплошной среды до сих пор затруднён из-за сложности их структуры, но значительный прогресс достигнут с использованием метода дискретных элементов (DEM) [66]. Одним из основных преимуществ DEM является его универсальность – он позволяет независимо варьировать любые материальные свойства, а также количественно оценивать влияние удара на разрыв межчастичных контактов, что сложно получить экспериментально.

В работе [62] основное внимание уделяется изучению влияния межчастичного сцепления на разрушение агломератов при ударе. Первая работа, использующая DEM для анализа влияния прочности связей на разрушение, была проведена Kafui K.D. [66]. Они исследовали, как поверхностная энергия влияет на прочность регулярно уплотненных агломератов с гранецентрированной кубической структурой, где число Вебера определяется с учетом плотности, диаметра первичной частицы, скорости удара и энергии взаимодействия, рассчитываемой по уравнению Дюпре [67]. Для материалов с одинаковой поверхностью энергия взаимодействия равна удвоенной поверхностной энергии.

KafuiK.D. совместно с ThorntonC. [66] смоделировали разрушение агломератов с использованием двумерного движения частиц, определив коэффициент повреждения как отношение числа нарушенных контактов к исходному числу связей и выразив его как функцию числа Вебера. Они установили, что кривые для поверхностных энергий от 0,1 до 1,0 Дж/м² объединяются при использовании числа Вебера. Однако Thornton C. [68] в более поздней работе предложил корректировку, вводя нижний предел скорости удара, при котором связи остаются неразрушенными. Аналогичный анализ был выполнен двумерно ДЛЯ упорядоченных систем с поверхностной энергией от 0,3 до 3,0 Дж/м², а затем Subero J. [68] применил трехмерное моделирование для случайно упакованных агломератов с поверхностной энергией в диапазоне 0,5–5,0 Дж/м², что привело к результатам, схожим с работой Thornton C. [69]. При этом использованный диапазон поверхностной энергии охватывал лишь один порядок изменений, тогда как в работе Moreno R. [70] изменение энергии увеличили до двух порядков, и модифицированное число Вебера перестало объединять данные.

Исходя из этого, в работе [62] предлагается альтернативный анализ, в котором повреждения, нанесённые агломератам при ударе, рассматриваются как функция не только числа Вебера, но и падающей кинетической энергии, а также физических и механических свойств агломерата. Авторы представляют простую механистическую модель, связывающую число разрушенных связей в агломерате с параметрами удара, энергией агрегации и характеристиками отдельных частиц. Согласно модели, энергия, затрачиваемая на разрыв связей, пропорциональна кинетической энергии коэффициент удара, что позволяет определить повреждения как отношение числа разрушенных связей к исходному количеству контактов. Этот коэффициент зависит от безразмерной группы, включающей скорость удара, модуль упругости, диаметр частицы, плотность и энергию взаимодействия. Модель демонстрирует, что влияние поверхностной энергии на разрушение агломератов лучше описывается предложенным подходом, чем использование только числа Вебера.

Методы решения уравнения баланса

Метод моментов сводит высокоразмерное уравнение к системе уравнений для моментов распределения, что значительно снижает вычислительную сложность.

Применяются методы прямой квадратурной аппроксимации (DQMOM, QMOM) для аппроксимации распределения через набор узлов (абсцисс) и весов. Работа Лауры Мюллер и соавторов [38] сравнивает различные замыкания (полиномиальное, метод минимальной энтропии, замыкание Кершоу) с точки зрения точности и затрат времени.

Выбор замыкания влияет на гарантирование неотрицательности распределения (реализуемость моментов), что особенно важно для физических моделей.

Дискретные модели используются для прямого решения модели в виде системы ОДУ для весовых долей по размерным классам. Этот подход удобен для калибровки по экспериментальным данным, как показано в работах [48, 49] и исследованиях по измельчению [50].

Калибровка моделей и согласование с экспериментальными данными

Некоторые работы (например, статья по калибровке модели [48]) предлагают метод, позволяющий одновременно корректировать параметры модели и оценивать исходное распределение материала, минимизируя критерий ошибок с учётом измерительных стандартных отклонений. Параметры функций A() и B() (например, коэффициенты U, a, c в основе модели Austin) определяются на основе экспериментальных данных. Важным является обеспечение сохранения массы дочерних частиц при разбиении.

Нелинейное поведение движущей силы дробления

Исследования, посвящённые влажному помолу, например, работа [43], выявляют, что в условиях влажного измельчения наблюдаются нелинейные зависимости скорости разрушения от распределения размеров – при увеличении количества fines breakage rate может сначала расти, а затем снижаться. Это связано с изменением распределения контактов между частицами и особенностями передачи энергии.

Учет морфологии частиц (форма и размер)

Работа Priscilla J. Hill [41] подчёркивает важность учета не только размера, но и формы частиц. Разработка совместных распределений по размеру и коэффициенту формы позволяет точнее моделировать изменения свойств при разрушении, что критично для процессов, где качество конечного продукта зависит от формы частиц.

Влияние параметров оборудования: подъёмники и геометрия мельницы

Исследование лифтеров в барабанной мельнице [42] демонстрирует, что геометрия подъемников (лиферов) существенно влияет на динамику процесса измельчения. Измерения износа лифтеров, зависимость мощности, крутящего момента и скорости вращения мельницы позволяют связать конструктивные параметры с эффективностью разрушения. Более оптимальные геометрии (например, лифтер с меньшим износом и оптимальной угловой конфигурацией) способствуют увеличению скорости разрушения и генерации мелких фрагментов при сниженных затратах энергии.

Агрегация и коалесценция в жидкостных системах

Работа Coulaloglou и Tavlarides [40] рассматривает модели для описания распределения размеров капель и частот коалесценции в жидкостных дисперсиях. Хотя эта область отличается от измельчения твердых частиц, базовые принципы (баланс массы, обменимость, сохранение массы при разбиении) схожи. Эти методы дают полезные идеи для разработки универсальных моделей взаимодействия частиц в дисперсных системах.

Работа Лауры Мюллер и соавторов [38] сравнивает численные методы решения РВЕ с использованием различных замыканий – полиномиального, минимальной энтропии и замыкания Кершоу. Это исследование демонстрирует компромисс между точностью, гарантией неотрицательности (реализуемости) и вычислительными затратами, что особенно важно при моделировании сложных процессов, таких как агрегация, разрушение и транспорт в многомерных системах.

Таким образом, современные модели строятся на комплексном учёте динамики разрушения частиц, учитывая как физико-химические свойства материала, так и параметры технологического оборудования, что позволяет оптимизировать процессы измельчения и снизить энергозатраты в промышленном производстве.

1.5 Анализ процедур при разработке цифровых двойников с использованием технологий виртуальной реальности

Лабораторные работы часто рассматриваются как неотъемлемая часть обучения химии. Рид и Шах представили четыре важных навыка, которые студенты приобретают во время практических лабораторных занятий [71]:

- навыки, связанные с изучением химии
- практические навыки
- научные навыки
- общие навыки

Так же уточняется, что лабораторная работа отличается от остальной части учебной программы тем, что лаборатория представляет собой "сложную среду обучения, в которой учащимся необходимо объединить составляющие навыки, включая овладение необходимыми практическими навыками и знаниями, и применять их для решения научной задачи" [72, 73]. Он заявил, что лаборатория – "место, где можно научиться заниматься химией". Однако занятия в ЭТО физических лабораториях отнимают много труда и времени у задействованного персонала, лабораторная инфраструктура обходится a очень дорого [71,74]. Поэтому сделать эти практические занятия доступными иногда бывает непростой задачей, особенно во время пандемии карантина, когда эти помещения недоступны. Цифровые онлайн-инструменты, такие как приложения ДЛЯ проведения видеоконференций, платформы электронного обучения и онлайнвидео, использовались в качестве альтернативы преподаванию химической теории, лежащей в основе лабораторных экспериментов, но по-прежнему существует серьезная проблема адаптации практических упражнений.

Виртуальные лаборатории – это один из цифровых инструментов, который можно использовать для обеспечения дистанционного обучения на лабораторных занятиях. Эти виртуальные лаборатории представляют собой моделируемые компьютером учебные среды, которые могут варьироваться от простых 2Dвизуализаций лабораторных экспериментов до продвинутых 3D-симуляций, которые пытаются воспроизвести реальные лабораторные условия [75]. Благодаря новейшей технологии виртуальной реальности (VR) можно даже полностью погрузиться в виртуальную лабораторную среду, выполняя реалистичные лабораторные манипуляции [73,76,77]. Вот некоторые преимущества, которые могут предложить виртуальные лаборатории по сравнению с традиционными практическими лабораториями [78-80]: снижение стоимости, большая гибкость доступность, экономия времени, безопасные условия И саморегулируемого обучения [73]. Однако, в зависимости ОТ того, как используется виртуальная лаборатория, отсутствие других студентов ИЛИ ощущения преподавателей И отсутствие реальной лаборатории могут представлять недостатки этих виртуальных приложений [81].

В связи с тем, что дистанционное обучение становится все более популярным в настоящее время, в ближайшем будущем можно ожидать большего разнообразия виртуальных лабораторий [82]. Однако спроектировать И разработать такую сложную виртуальную среду обучения не всегда так просто. Для эффективного учебного процесса часто создания требуется многопрофильная команда с разным уровнем знаний (например, специалисты по информатике, образовательные технологи и учителя химии). Кроме того, исследования показали, что технологический аспект - не единственный фактор, эффективных способствующий созданию виртуальных учебных сред. В случаях технологический дизайн может некоторых даже препятствовать обучения, если когнитивным процессам OH не разработан оптимально

[83,84]. Требуется тщательный дизайн учебных материалов, использующий устоявшиеся теории обучения и методическую поддержку, чтобы оптимизировать эффективность работы виртуальной лаборатории.

Исследования области В виртуальных лабораторий тема не новая. Фактически, было опубликовано несколько обзоров, сравнивающих виртуальные и удаленные лаборатории с традиционными практическими лабораториями [80,81,85,86]. Однако эти обзоры включают лабораторные практики по многим другим дисциплинам (например, биологии, физике, инженерным наукам) и упоминаются лишь немногие виртуальные лаборатории по химии. Было обнаружено только четыре других обзора, в которых виртуальные химические лаборатории обсуждаются более подробно [78,87,88,89].

Татли и Айас опубликовали первый обзор по этому вопросу и рассмотрели 13 статей, в которых сообщается о виртуальных химических лабораториях, основанных на конструктивистском подходе к обучению, с целью анализа их преимуществ и недостатков [89]. Они изучили цель исследований, размер выборки, инструменты сбора данных и результаты исследования. В ходе этого исследования был сделан вывод, что эти лаборатории позволяют студентам сосредоточиться на процессе, а не на оборудовании, способствуют активному участию с минимальной потерей времени и позволяют повторять эксперименты в безопасной среде. Основным недостатком было то, что студенты, использующие виртуальные лаборатории, не могли чувствовать, обонять или прикасаться, как в реальной лаборатории.

Сайпсас и Каллес проанализировали 29 рецензируемых статей о виртуальных лабораториях в области биологии, биотехнологии и химии [88]. Они были сосредоточены на его эффективности как дополнительного инструмента и используемых образовательных подходах. В этом исследовании сделан вывод, что виртуальные лаборатории показывают аналогичные или лучшие результаты, чем традиционные методы для среднего образования и что они наиболее эффективны в сочетании с реальной лабораторией для получения после среднего образования. Смешанное обучение и исследовательское обучение были наиболее используемыми образовательными подходами. Они также упоминают, что из их обзора могло быть исключено множество исследовательских работ, и они рекомендуют часто обновлять такие обзоры по мере быстрого развития технологий.

Беллу и др. [87] проанализировали 43 исследования технологий цифрового обучения в начальном и среднем химическом образовании. В первую очередь они изучали технологии обучения, педагогические подходы, методы исследования и результаты обучения. Из проанализированных ими технических подходов семь из них были виртуальными лабораториями, тогда как наиболее используемыми технологическими подходами были мультимедиа и симуляции. Результаты их обзора свидетельствуют о том, что большинство исследований связаны со средним образованием; охватывают в основном дисперсную природу вещества в качестве темы; И используют В основном конструктивистские теории обучения. Кроме того, исследовательский метод большинства исследований оценивал знания учащихся по экспериментальному и квази-экспериментальному плану, при этом большинство сообщало 0 положительных результатах обучения. Однако авторы отметили, что материалы конференций и главы книг не были включены, и предложили предпринять более систематические усилия с большим количеством метаанализов эмпирических исследований.

Али и Улла провели обзор литературы, собрав 42 различных виртуальных химических лаборатории. Они предложили классификацию типов графических интерфейсов, используемых в этих виртуальных лабораториях [78]. Авторы провели различие между виртуальной химической лабораторией 2D, 3D и видеометафорой с дальнейшим разделением виртуальных лабораторий на офлайн и онлайн. В этой подборке было проведено сравнение виртуальных химических лабораторий 2D и 3D, чтобы выявить их сходства и различия. Али и Улла отметили, что виртуальным лабораториям 2D не хватает реалистичности и они обеспечивают лабораториями, низкое погружение сравнению ПО с использующими графический интерфейс 3D. Кроме того, они обнаружили, что

большинство виртуальных лабораторий не давали никаких указаний по процедуре проведения эксперимента.

Исследование включает новые виртуальные технологии, такие как иммерсивная виртуальная реальность (VR). Али и Улла кратко упомянули этот технологии, но он был классифицирован как 3D тип виртуальные лаборатории. Во-вторых, это исследование предоставляет целостный обзор ранее использовавшихся виртуальных химических лабораторий в исследовательской литературе. Это означает, что в него также включены материалы конференций и виртуальные лаборатории университетского уровня, которые не были включены в исследования Sypsas [88] и Беллу с соавторами [87] соответственно. В-третьих, в этом исследовании рассматриваются особенности дизайна учебных пособий, которые были взяты за основу при проектировании виртуальных химических лабораторий.

1.6 Постановка задачи исследования

Обзор литературы процессам измельчения позволяет ПО выделить современные подходы к экспериментальному изучению и математическому моделированию данного явления. Проанализированы работы, посвящённые описанию динамики дробления материалов в мельницах, а также исследования, направленные на выявление закономерностей распределения частиц по размерам. Несмотря успехи, большинство существующих на достигнутые моделей характеризуются рядом недостатков: они не отражают в полной мере физическую суть процессов, не учитывают кинетические параметры, определяющие физикохимические явления, протекающие в процессе измельчения, и, как следствие, не позволяют точно определить устойчивый размер частиц. Таким образом, в мировой практике отсутствует комплексный подход, способный описать потоки дробления с учётом всех динамических и структурных особенностей процесса.

Актуальность исследования определяется необходимостью разработки математической модели процесса измельчения, которая бы отражала всю совокупность протекающих в мельнице явлений, а также созданием цифрового

48

двойника мельницы для оптимизации процесса и обучения операторов. В ряде работ применялись методы механики гетерогенных сред, что позволило получить представление о структурных закономерностях движущих сил и потоков дробления. Однако до настоящего времени не найдено универсальное решение для определения устойчивого размера частиц, что является ключевым параметром в оценке эффективности процесса измельчения.

Кроме того, применение методов термодинамики необратимых процессов, в частности принципа минимального произведения энтропии, открывает перспективы для установления зависимости устойчивости частиц к дроблению. Использование соотношений Онзагера даёт возможность не только выявить структуру потока дробления, но и определить константу дробления, являющуюся основополагающим параметром для построения математической модели кинетики процесса измельчения.

Таким образом, целью настоящей диссертационной работы является:

• Разработка математической модели процесса измельчения, отражающей всю совокупность протекающих явлений в мельнице, и создание цифрового двойника для оптимизации процесса и обучения.

Для достижения поставленной цели необходимо решить следующие задачи:

• Проведение экспериментальных исследований процесса измельчения для получения данных по изменению размеров частиц и их распределению.

• На основе аппарата механики гетерогенных сред определить структуру движущих сил и потоков дробления.

• Применив методы термодинамики необратимых процессов (принцип минимального произведения энтропии), установить зависимость устойчивости частиц к процессу дробления.

• Используя соотношения Онзагера, получить структуру потока дробления и определить константу дробления.

• Построение математической модели кинетики процесса дробления с учётом экспериментальных данных и структурных зависимостей.

• Разработка программного обеспечения для моделирования процесса дробления.

• Создание цифрового двойника мельницы, способного не только симулировать процесс измельчения, но и служить инструментом для обучения операторов.

Данная работа направлена на восполнение существующих пробелов в мировой практике моделирования процессов измельчения, позволяя не только углубленно изучить физико-химические аспекты дробления, но и создать практический инструмент для оптимизации технологических процессов в данной области.

2 ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЦЕССА ИЗМЕЛЬЧЕНИЯ КАК ОБЪЕКТА МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

2.1 Обоснование выбора технологического оборудования и контрольноизмерительных приборов для исследования процесса измельчения

Изучение эффективности измельчения в планетарной мельнице невозможно без применения различных методов исследования. Ключевым является гранулометрический анализ, позволяющий определить распределение размеров частиц измельченного материала. Для этого используются методы ситового анализа, лазерной дифракции или седиментационного анализа.

Микроскопический анализ с помощью оптической или электронной микроскопии даёт ценную информацию о морфологии частиц, позволяя оценить форму, структуру и дефекты поверхности.

Определение удельной поверхности материала, например, методом БЭТ или адсорбции газов, помогает понять, как измельчение влияет на площадь поверхности, что важно для многих химических и физических процессов.

Рентгенофазовый анализ применяется для изучения фазового состава измельченного материала, а дифференциальная сканирующая калориметрия – для оценки его термодинамических характеристик.

Лазерная дифракция – это метод, который используется для определения размеров частиц в дисперсных системах. Он основан на анализе углового распределения света, рассеянного частицами.

Принцип работы:

1. Лазерный луч фокусируется на дисперсии частиц. Частицы рассеивают лазерный свет под разными углами.

2. Угловое распределение рассеянного света регистрируется детектором.

3. Полученные данные анализируются с помощью специального программного обеспечения, которое позволяет рассчитать распределение частиц по размерам.

Преимуществами этого метода является быстрый и точный анализ, а именно измерение занимает всего несколько секунд, а результаты отличаются высокой точностью. Лазерные дифракциометры могут измерять размеры частиц в диапазоне от нескольких нанометров до нескольких миллиметров. Анализ не повреждает частицы, что позволяет проводить многократные измерения. Приборы просты в эксплуатации и не требуют специальной подготовки.

Лазерные дифракциометры используются для контроля качества продукции в различных отраслях промышленности, таких как производство фармацевтических препаратов, продуктов питания, строительных материалов и др. В научных исследованиях лазерные дифракциометры используются для изучения дисперсных систем, таких как коллоиды, эмульсии, суспензии и др. Помимо этого лазерные дифракциометры используются для контроля качества воды и воздуха.

Характеристика применяемого оборудования

Весы используются для точного измерения массы измельчаемого материала, мелющих шаров и массы поверхностно Так активного вещества. как несоблюдение соотношения масс этих ключевых компонентов может сильно исказить результаты экспериментов. Ha рисунке 2.1изображены стандартизированные аналитические весы, используемые в подавляющем большинстве лабораторий.



Рисунок 2.1 – Аналитические лабораторные весы

Лабораторная планетарная мельница выполняет главную роль в рамках эксперимента по измельчению. Измельчение исходного материала в течении заданного времени. Важно чтобы используемое оборудование позволяло прервать процесс измельчения для взятия проб и продолжения дальнейшего эксперимента. Планетарная мельница использует мелющие тела (шары или стержни) для измельчения материала. Регулировка скорости вращения мельницы влияет на степень измельчения материала. Время измельчения также влияет на степень измельчения материала.

Лазерный дифракциометр используется для определения распределения числа частиц измельченного материала в экспериментальных пробах. Для измерения углового распределения рассеянного лазерного света, лазерный дифракциометр измеряет угловое распределение лазерного света, рассеянного частицами измельченного материала. Программное обеспечение, используемое для обработки полученных данных, позволяет провести расчет распределения частиц по размерам на основе данных об угловом распределении рассеянного света программное обеспечение рассчитывает распределение частиц по размерам [3]. Определение среднего размера частиц происходит на основе полученных данных о распределении, помимо различных видов среднего значения (геометрическое, арифметическое, тангенциальное и т.д.) программа рассчитывает размерные фракции частиц.

Оборудование для взятия и хранения экспериментальных проб выполняет функции, упрощающие отбор репрезентативной пробы измельченного материала. Важно отобрать репрезентативную пробу измельченного материала, чтобы получить точные результаты анализа. А также хранение пробы в герметичной емкости, так как пробу необходимо хранить в герметичной емкости, чтобы предотвратить испарение спирта и изменение концентрации суспензии.

В рамках исследования была проведена серия экспериментов, направленных на определение некоторых неизвестных параметров и сопоставления результатов работы математической модели с реальными данными. Процесс дробления оксида алюминия осуществлялся с использованием планетарной мельницы M36, выпущенной ВНИИНСМ в 1971 году. На рисунке 2.2 представлено изображение данной мельницы.

Необходимо учитывать, что на данной модели отсутствует возможность регулировки скорости вращения барабанов. Все эксперименты проводились при постоянной скорости вращения, составляющей 200 оборотов в минуту.

Кроме того, для дробления оксида алюминия использовалась жидкая среда – этанол. Этот выбор обусловлен тем, что этанол является поверхностно-активным (ПAB), дробления веществом оказывающим влияние на процесс И увеличивающим его эффективность. Следует отметить, что ПАВ изменяет поверхностную энергию дисперсной среды, что представляет собой существенный аспект для данного исследования.



Рисунок 2.2 – Планетарная мельница М36 ВНИИНСМ 1971 г. Конструкция и устройство планетарной мельницы

При рассмотрении устройства планетарной мельницы следует обратить внимание на процесс загрузки материала в её барабаны, который должен соответствовать определённым правилам, включая общие технические меры безопасности. Объем барабана должен быть заполнен на 80% для максимальной эффективности дробления. Это оптимальное значение с точки зрения коэффициента полезного действия (КПД) установки; превышение или недостаток этого критерия приведет к снижению КПД и искажению полученных результатов. Кроме того, при изменении пропорций между дробящимся материалом и дробящими телами, следует учитывать, что примерно 25% от общего объема материала должно быть поверхностно-активным веществом (ПАВ), чтобы обеспечить однородный режим дробления при различных условиях.

Загружаемый материал, помимо ПАВ, состоит из дробящегося материала, который представляет собой порошок среднего размера частиц, не превышающего 35 микрон. Процесс дробления осуществляется за счет взаимодействия дробящегося материала с мелющими элементами, стенками барабана и столкновений между собой.

2.2 Планирование эксперимента по определению частиц устойчивых к дроблению

Процедура проведения эксперимента включала в себя следующие этапы: в барабаны мельницы были помещены мелющие шары (см. рисунок 2.3), изготовленные из диоксида циркония ZrO_2 . Размер этих шаров составлял либо 2 мм, либо 5 мм, в зависимости от конкретных параметров эксперимента [3]. После того как в барабан была помещена определенная масса мелющих шаров, в него добавлялся порошок Al_2O_3 в соответствии с заданным соотношением массы мелющих шаров (см. рисунок 2.4). Это соотношение составляло либо 3:1, либо 5:1.

В качестве завершающего компонента в эксперименте использовалось поверхностно-активное вещество (ПАВ) – 98% этанол. Таким образом, было проведено четыре эксперимента. В течение каждого эксперимента были отобраны пробы через разные временные интервалы для последующего анализа с использованием лазерного дифракциометра.



Рисунок 2.3 – Мелющие тела (ZrO₂)



Рисунок 2.4 – Оксид алюминия (Al₂O₃)

2.3 Разработка научно-обоснованной методики и результаты экспериментальных исследований распределения частиц

Для определения баланса числа частиц в полученных образцах применяется метод лазерной дифракции. Этот метод основан на явлении рассеяния света частицами в дисперсной среде. Анализ проводится с использованием специального оборудования, которое доступно Международному Научно-Техническому Центру.

В частности, для данного исследования использовалась модель «Лазерный дифракционный микроанализатор FRITSCH Analysette 22 «Economy» 22 905/666Z», установленная на кафедре ИФХ в Тушинском комплексе. Этот анализатор обеспечивает высокую точность и надежность при определении размеров и распределения частиц в образцах. Изображение данного оборудования представлено на рисунке 2.5.



Рисунок 2.5 – Лазерный дифракционный микроанализатор FRITSCH Analysette 22

Лазерное излучение представляет собой высокофокусированный световой поток, характеризующийся монохроматичностью, поляризацией и узконаправленностью электромагнитного излучения.

Лазерная дифракция – это явление, при котором свет рассеивается твердотельной или жидкой частицей под воздействием лазерного излучения. Этот процесс является ключевым в методе анализа дисперсных систем наночастиц и их агломератов в жидкой среде с использованием лазерной дифракции. Он основан на зависимости угла рассеяния света от размеров частиц. Применение данного метода позволяет определить полидисперсность образца путем построения кривой распределения размеров для частиц размера 10 нм и больше.

Этот метод широко используется для анализа распределения твердых наночастиц в жидкой среде, особенно в гидросфере. Однако, проведение анализа многофазных частиц с помощью этого метода затруднено.

Результаты экспериментальных исследований по измельчению частиц оксида алюминия

В процессе выполнения эксперимента были собраны и систематизированы данные о средних размерах частиц, их среднеквадратичном отклонении и

распределении числа частиц по размерам. Эти данные внесены в таблицу 2.1, где они представлены для последующего анализа и интерпретации.

Таблица 2.1 – Экспериментальные да	нные
------------------------------------	------

№ эксп	Размер мелющих тел, мм	Соотношение масс	Время взятия пробы, мин	Средний размер, мкм	Среднее квадратичное отклонение
1	5	3:1	15	9.600	6.216
			30	6.115	3.083
			45	5.017	2.686
			60	4.490	2.337
			75	3.578	1.876
			90	3.424	1.790
2 5		5:1	15	6.097	3.682
			30	4.204	2.244
	5		45	4.028	2.205
			60	3.617	1.941
			75	3.294	1.742
		90		90	2.972
3		2 3:1	5	15.252	4.916
			15	6.387	3.987
	2		30	5.125	3.003
	2		45	3.486	1.930
			60	2.645	1.447
			90	2.043	1.032
4	2	2 5:1	5	13.636	4.818
			15	4.996	2.887
			30	4.189	2.266
			45	1.780	0.727
			60	2.044	1.061
			90	1.831	0.923

Далее, на основе полученных данных был построен график (см. рисунок 2.6), который позволил отследить изменение среднего размера частиц в течение эксперимента. На графике можно заметить, что происходит прекращение изменения среднего размера частиц, что указывает на завершение процесса дробления. Кроме того, график позволяет увидеть, что в каждом эксперименте интенсивность дробления зависит от размера мелющих шаров и их общей массы. Эти наблюдения играют важную роль в понимании влияния различных параметров эксперимента на процессы дробления.



Рисунок 2.6 – Зависимость среднего размера частиц от времени дробления для четырёх экспериментов

2.4 Выводы

В ходе экспериментальных исследований было проведено измельчение оксида алюминия с целью оценки влияния различных параметров на процесс и характеристики полученного материала [90]. В результате была собрана выборка данных из 24 проб, которая была подвергнута анализу и интерпретации.

Одним из ключевых результатов исследования является обнаружение того, что при длительном измельчении размер частиц выходит на стационарное

значение, которое зависит от параметров измельчения, таких как соотношение массы шаров к массе измельчаемому материалу, размер мелющих шаров и время измельчения. Этот факт подтверждает наличие определенных ограничений в процессе измельчения, связанных с физическими и химическими характеристиками материала и условиями его обработки.

Также было выявлено, что при оптимальном соотношении шаров к мелющему материалу и при использовании минимального размера мелющих шаров, достигается максимальная степень измельчения оксида алюминия. Это указывает на важность правильного выбора режимов измельчения для достижения желаемого эффекта и оптимизации процесса.

В целом, результаты экспериментальных исследований подтверждают значимость выбранных параметров и методов измельчения, а также указывают на необходимость дальнейшего изучения степени влияния различных факторов на процесс измельчения с целью его оптимизации и повышения эффективности.

3 МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВИЖУЩЕЙ СИЛЫ ДРОБЛЕНИЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДОВ НЕРАВНОВЕСНОЙ ТЕРМОДИНАМИКИ И ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЗАВИСИМОСТИ ДИАМЕТРА ЧАСТИЦ АІ2О3, УСТОЙЧИВЫХ К ДРОБЛЕНИЮ

3.1 Законы сохранения многофазной гетерогенной системы с учетом дробления частиц

Рассматривается двухфазная система: сплошная и дисперсная фазы. В гетерогенной системе происходит процесс дробления частиц при столкновении с перемешивающим устройством. Рассматриваются допущения, принятые в работах [91,92].

Характерные расстояния, на которых существенно варьируются параметры течения (если не учитывать поверхности разрыва), значительно превосходят габариты дисперсных включений и промежутков между ними [91, 92]. Для корректного описания пространственного распределения фаз в каждой точке пространства, занятой смесью, рассматривают усреднённые значения плотности:

$$\rho = \rho_1 + \int_0^R \rho_2^0 f(r) r \, dr;$$

$$\alpha = \alpha_1 + \int_0^R r f(r) \, dr;$$

$$\rho_1 = \rho_1^0 \alpha_1;$$

$$\alpha_2 = \int_0^R r f(r) \, dr$$
(3.1)

Здесь α_i обозначает долю объёма каждой фазы; ρ_i^0 и ρ_i указывают соответственно истинные и усреднённые значения плотности фаз; R – наибольший характерный размер (или объём) включения. Индекс i = 1 соответствует несущей фазе, а i = 2 – всем дисперсным фазам.

Необходимость введения усреднённых плотностей связана с тем, что в гомогенных смесях каждую компоненту можно считать равномерно распределённой по всему объёму, тогда как в гетерогенных системах каждая фаза фактически занимает лишь часть общего пространства. Дисперсионные свойства второй фазы задаются функцией f(r), причём f(r) dr представляет собой число включений, находящихся в единице объёма смеси, и имеющих размер (или объём) от r до r + dr. При этом в каждой из r-фаз величины отдельных включений не изменяются, трансформируется лишь их количество.

На основании исходных допущений можно считать, что несущая фаза и все r-фазы формируют совокупность континуумов, которые занимают один и тот же объём, имея при этом собственные значения плотности, массы, скорости и температуры. Многоскоростная модель континуума необходима, поскольку относительные скорости фаз в смеси могут по порядку величины совпадать с их абсолютными скоростями. Для описания несущей фазы будем использовать модель вязкой жидкости. В качестве тензоров поверхностных сил σ_1^{ij} , σ_2^{ij} и тензоров вязких напряжений τ^{ij} принимаем выражения, предложенные в работе [93]:

$$\sigma_{1}^{kl} = -P_{1}\delta^{kl} + \tau_{1}^{kl};$$

$$\sigma_{1}^{kl} = 0;$$

$$\tau_{1}^{kl} = \lambda_{1}\nabla u_{1} + 2\mu_{1}\varepsilon_{1}^{kl}$$
(3.2)

 δ^{ij} здесь является символом Кронекера, P_1 обозначает давление, а ε^{ij} – тензор, отражающий скорость деформации в несущей фазе.

При принятых допущениях система уравнений сохранения, представленная в дифференциальной форме и учитывающая процесс дробления включений (частиц) [91]:

$$\frac{\partial}{\partial r}(\rho_1 v_1) + div(\rho_1 \overrightarrow{v_1}) = 0;$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} + div(f \overrightarrow{v_2}(r)) = -f(r)A(r) + \int_r^R f(\gamma)A(\gamma)B(r/\gamma) d\gamma;$$

$$\rho_1 \frac{d_1 \overrightarrow{v_1}}{dt} = -\alpha_1 \nabla P - \int_0^R \rho_2^0 f r \vec{f}_{(12)} dr + \rho_1 \vec{F}_1 + \vec{I}_1;$$

$$\rho_{2}^{0}fr\frac{d_{2}\overline{v_{2}}(r)}{dt} = -rf\nabla P + \rho_{2}^{0}frf_{(12)} + \rho_{2}^{0}fr\vec{F}_{2} + \rho_{2}^{0}r\int_{r}^{R}f(\gamma)A(\gamma)B(r/\gamma)[\vec{v}_{2}^{*}(r/\gamma) - \vec{v}_{2}(r)]d\gamma$$

$$\rho_{1}\frac{d_{1}u_{1}}{dt} = \alpha_{1}\frac{\rho}{\rho_{1}^{0}}\frac{d\rho_{1}^{0}}{dt} + -\nabla q_{1} + \int_{0}^{R}\rho_{2}^{0}rfq_{(21)}(r)dr + \int_{0}^{R}\chi_{1}\rho_{2}^{0}rff_{(12)}[\vec{v}_{1} - \vec{v}_{2}]dr + \int_{0}^{R}\rho_{2}^{0}rfA(r)\frac{[\vec{v}_{2}(r) - \vec{v}_{1}]^{2}}{2}dr; \qquad (3.3)$$

$$\rho_{2}^{0}rf(r)\frac{d_{2}u_{2}}{dt} = f(r)rP\frac{d\rho_{2}^{0}}{dt} - \rho_{2}^{0}frq_{(21)}(r) + \chi_{2}\rho_{2}^{0}rf(r)\vec{f}_{(12)}[\vec{v}_{1} - \vec{v}_{2}] + \rho_{2}^{0}r\int_{r}^{R}f(\gamma)A(\gamma)B(r/\gamma)[u_{2}(\gamma) - u_{2}(r)]d\gamma + \rho_{2}^{0}r\int_{r}^{R}f(\gamma)A(\gamma)B(r/\gamma)\times\left\{\frac{\left[\vec{v}_{2}^{*}(r/\gamma) - \vec{v}_{2}(r)\right]^{2}}{2} - \frac{\left[\vec{v}_{2}^{*}(r/\gamma) - \vec{v}_{1}\right]^{2}}{2}\right\}d\gamma$$

где ρ_1 – плотность сплошной фазы, f – плотность распределения частиц по радиусам (объемам); \vec{v}_1, \vec{v}_2 - скорость движения сплошных фаз и г-фазы соответственно; $\vec{v}_2^*(r/\gamma)$ – скорость движения частиц размера r, образовавшихся из частицы размера γ ; P – давление; $\vec{f}_{(12)}$ – сила взаимодействия между сплошной и дисперсной фазой (частицей); \vec{F}_i – массовая сила; A(r) – вероятность дробления частицы размерами r; $B(r/\gamma)$ – плотность распределения, отражающая вероятность формирования частиц размером (объёмом) r при дроблении частицы объёмом γ в момент времени t; q_1 - теплоперенос в сплошной фазе, q_{12} – теплообмен между сплошной фазой и частицей; \vec{I}_1 – вектор, характеризующий перераспределение импульса при дроблении включений; u_i – внутренняя энергия i-ой фазы (i=1,2) [90].

Первое уравнение из системы (3.3) представлено в виде уравнения неразрывности несущей фазы. Второе уравнение описывает баланс числа включений с учётом их дробления [90]. Термины в правой части этого уравнения связаны с процессом дробления включений:

Первый член в правой части уравнения указывает на уменьшение общего числа включений размера (объёма) *r* вследствие их разрушения.

Второй член характеризует рост числа включений с габаритами (объёмом) *r* за счёт разрушения включений, имеющих размеры (объёмы) от *r* до *R*.

Третье и четвёртое уравнения отвечают за движение несущей фазы и *r*-фазы соответственно [90]. Первые, вторые и третьи составляющие в правых частях этих уравнений описывают внешние поверхностные силы, взаимодействие между несущей фазой и включениями, а также массовые силы, которые задаются тензорами σ_1^{ij} , $\sigma_2^{ij} = 0$ и векторами \vec{f}_{12} , \vec{F}_i (i = 1,2). Заключительные слагаемые в уравнениях движения отвечают за изменение импульса фаз, вызванное процессами дробления.

Пятое и шестое уравнения отражают динамику удельных внутренних энергий в несущей фазе и *r*-фазе. В их правых частях:

Первые слагаемые учитывают вклад работы при сжатии материала фаз.

Вторые слагаемые описывают теплообмен между несущей фазой и включениями.

Следующие слагаемые связаны с тем, что часть кинетической энергии диссипирует во внутреннюю энергию вследствие вязкостного взаимодействия фаз и дробления включений.

Последнее слагаемое в правой части шестого уравнения характеризует диссипацию кинетической энергии и переход во внутреннюю энергию *r*-фазы за счёт дробления включений объёмом γ с образованием частиц объёмом *r*.

3.2 Производство энтропии гетерогенной системы с учетом дробления частиц и движущие силы процесса дробления

Допуская локальное равновесие внутри каждой фазы, было получено соотношение для субстанциональной производной энтропии системы с учётом работы перемешивающего устройства, инициирующего дробление частиц [37, 91]:

$$\rho \frac{Ds}{Dt} = \rho_1 \frac{ds_1}{dt} + \int_0^R \rho_2^0 fr \frac{d_1 s_2}{dt} dr + \\ + \int_0^R \frac{\rho_2^0 r}{T_2} \Big[\int_r^R f(\gamma) A(\gamma) B(r/\gamma) u_{(12)}(r/\gamma) d\gamma \Big] dr - \\ - \int_0^R \rho_2^0 fr A(r) s_2(r) dr + \int_0^R \rho_2^0 r \int_r^R f(\gamma) A(\gamma) B(r/\gamma) s_2(\gamma) d\gamma dr,$$
(3.4)

Где *s*, *s*₁, *s*₂ – энтропия гетерогенной системы, сплошной фазы, *r*-фазы соответственно. Подставим соотношение Гиббса (3.5) в (3.4).

$$\rho_i \frac{d_i s_i}{dt} = \frac{\rho_i d_i u_i}{T_i dt} - \rho_i \frac{P}{T_i dt} \frac{d_i}{dt} \left(\frac{1}{\rho_i^0}\right); \tag{3.5}$$

$$\int_0^R -\rho_2^0 fr\left[f(r)A(r)dr - \int_r^R f(\gamma)A(\gamma)B\left(\frac{r}{\gamma}\right)d\gamma\right]dr = 0;$$
(3.6)

$$\int_{0}^{R} \rho_{2}^{0} r \begin{bmatrix} u_{2}(r)f(r)A(r) - \int_{r}^{R} f(\gamma)A(\gamma)B\left(\frac{r}{\gamma}\right)u_{2}(\gamma)d\gamma - \\ -\int_{r}^{R} f(\gamma)A(\gamma)B\left(\frac{r}{\gamma}\right)u_{(12)}\left(\frac{r}{\gamma}\right)d\gamma \end{bmatrix} dr = 0$$
(3.7)

(Соотношения (3.4)–(3.7) представляют соответственно уравнение Гиббса для *i*-й фазы, закон сохранения массы дисперсной фазы при дроблении и закон сохранения энергии дисперсной фазы в процессе фрагментации).

На основе подстановки системы уравнений (3.5) в соотношение (3.4), используя (3.6-3.7) получено явное выражение субстанциональной производной энтропии для всей системы в виде [91]:

$$\rho \frac{Ds}{Dt} = \nabla \left(q_1 \frac{1}{T_1} \right) + \int_0^R \rho_2^0 fr f_{12} \left(\frac{x_2}{T_1} + \frac{x_2}{T_2} \right) [v_1 - v_2] dr + + \int_0^R \rho_2^0 r f(r) q_{(12)}(r) \left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right) dr + + \int_0^R \rho_2^0 r f(r) A(r) \left\{ \left[\frac{F_2(r)}{T_2} - \frac{F_1}{T_1} \right] + \frac{[v_2(r) - v_1]^2}{2T_1} \right\} dr - - \int_0^R \rho_2^0 fr \int_r^R f(\gamma) A(\gamma) B(r/\gamma) \left[\left(\frac{F_2(\gamma)}{T_2} - \frac{F_1}{T_1} \right) + \left(\frac{F_2(r)}{T_2} - \frac{F_2(\gamma)}{T_2} \right) + + \frac{(v_2^*(r/\gamma) - v_1)^2}{2T_2} - \frac{(v_2^*(r/\gamma) - v_2(r))^2}{2T_2} \right] d\gamma dr.$$
(3.8)

При этом термодинамический потенциал: $F_i = u_i - T_e s_i$

В уравнении (3.8) члены в правой части соотношения, начиная с второго слагаемого, относятся к производству энтропии системы за счёт проведения необратимых процессов. Второе слагаемое характеризует производство энтропии за счёт силы сопротивления, силовые взаимодействия между сплошной фазой и частицей. Третье слагаемое характеризует вклад в производство энтропии теплообмен между сплошной и дисперсной фазами [91].

Последние два слагаемых в уравнении (3.8) описывают вклад в производство энтропии составляющих, возникающих в результате дробления включений, и выражают произведение термодинамических сил, связанных с дроблением, на соответствующие термодинамические потоки дробления, обусловленные этим процессом.

Определение потоков включений:

f(r)A(r)dr — это поток включений объёма г, которые разрушаются под действием перемешивающего устройства;

 $-\int_{r}^{R} f(\gamma)A(\gamma)B\left(\frac{r}{\gamma}\right)d\gamma dr$ — поток характеризует образование включений

размера r, возникающих при дроблении включений большего размера ү [90].

Термодинамические силы при дроблении включений (при изотермическом условии T₁ = T₂):

Термодинамическая движущая сила дробления частиц размером (объёмом) *r*:

$$\rho_2^0 r \left[\frac{F_2(r)}{T} - \frac{F_1}{T} \right] + \rho_2^0 r \left[\frac{v_1 - v_2(r)}{2T} \right]^2$$
(3.9)

Термодинамическая движущая сила дробления частиц объёмом γ, образующих частицы размера *r*:

$$\rho_2^0 fr\left(\frac{F_2(\gamma)}{T} - \frac{F_1}{T}\right) + \rho_2^0 r \left[-\frac{(v_2^*\left(\frac{r}{\gamma}\right) - v_2(r))^2}{2T} + \frac{(v_2^*\left(\frac{r}{\gamma}\right) - v_1)^2}{2T} \right].$$
(3.10)

В составе движущих сил дробления, компонент $\rho_2^0[F_2(r) - F_1]/T$, может быть представлен через энергию взаимодействия включения с осколком следующим образом:

$$\rho_1^0 fr[F_2(r) - F_1] = S_k \int_h^\infty \Pi \, dh = S_k U = UI. \tag{3.11}$$

где *U* – энергия взаимодействия между поверхностями, участвующими в процессе дробления, а *h* – толщина трещины, *S_k* - площадь.

При выводе формулы (3.11) использована зависимость по Б. В. Дерягину [94]:

$$\frac{dF}{dh} = -\Pi(h). \tag{3.12}$$

Второе слагаемое в движущей силе дробления (3.9) представленная как

$$UII = \frac{\rho_2^0 r(\vec{v_1} - \vec{v_2})^2}{2T}$$
(3.13)

Второй член в структуре движущей силы дробления (ранее обозначенный как UII) отражает ту часть работы перемешивающего устройства, которая расходуется на придание осколку кинетической энергии. Таким образом, для формирования осколка необходимо выполнение следующего условия:

$$UII > -UI$$
 или $\frac{UII}{(-UI)} > 1.$ (3.14)

Для практического применения структуры движущей силы дробления вводится критерий разрушения, выраженный в форме UII/(–UI) = We. Известно [94], что геометрический коэффициент C, умноженный на (–UI), дает силу прилипания F_n , то есть C(–UI) = F_n . При этом выполняется соотношение

$$F_{\rm fl} \sim (2 \Sigma_{ri} - \Sigma_{rr}) \tag{3.15}$$

Тогда UI можно аппроксимировать выражением k·4 π ·a_r² (2 Σ (ri) – Σ (rr)), и критерий дробления принимает вид

$$We \sim \frac{\rho_2^0 d(v_1 - v_2(r))^2}{(2\Sigma_{r_1} - \Sigma_{r_r})}$$
(3.16)

Для случая дробления капель критерий (3.16) преобразуется к виду:

$$We \sim \frac{\rho_2^0 d(v_1 - v_2(r))^2}{\Sigma_{r_1}},$$
 (3.17)

где d – диаметр частицы.

Этот критерий (3.17) соответствует известному в механике гетерогенных сред критерию Вебера для дробления частиц. Следовательно, зависимость вероятности разрушения можно записать как

$$A(r) \sim LWe \tag{3.18}$$

где *L* – феноменологический коэффициент.

Таким образом, из анализа производства энтропии получено, что движущую силу дробления можно представить в виде критерия Вебера, а вероятность дробления можно представить по соотношению Онзагера – как произведение феноменологического коэффициента L на движущую силу дробления (3.18).

3.3 Определение зависимости для диаметра частицы, устойчивой к дроблению

При исследовании различной литературы, связанной с процессами дробления частиц, было обнаружено, что для различных типов дробильных установок существуют собственные математические модели. Однако, независимо от вида дробления, существует определенный размер частиц, который при продолжительном дроблении, перестает изменяться. Это явление указывает на достижение гетерогенной системой, где происходят процессы дробления, стационарного состояния.

Для формализации этого стационарного состояния можно обратиться к теореме И. Пригожина, изложенной в работах [4,95], которая утверждает, что состояние линейной системы, характеризующееся минимальным производством энтропии, является стационарным и устойчивым. Используя вариационный принцип минимума производства энтропии, можно найти размер частицы, который остается устойчивым в процессе дробления [96,97]. Это позволяет более глубоко понять и формализовать процессы дробления и стабильность гетерогенных систем в них.

Для частицы движущая сила дробления будет равна:

$$X = -\frac{\pi d^2 (2\Sigma_{r1} - \Sigma_{rr})}{2} + \frac{\pi \rho_2^0 d^3 \vec{v}^2}{12}$$
(3.19)

Где X –движущая сила дробления частицы, d–диаметр частицы, ρ_2^0 – истинная плотность дисперсной фазы, $2\Sigma_{r1} - \Sigma_{rr}$ – энергия взаимодействия; Σ_{r1} – поверхностная энергия частицы, Σ_{rr} – поверхностная энергия при взаимодействии частиц при разрушении [98].

Скорость в турбулентном режиме измельчения и смешения может быть описана как функция от удельной мощности на перемешивании (є) и диаметра включений [99].

$$\vec{v}^2 = (\varepsilon d)^{2/3},\tag{3.20}$$

Чтобы лучше понять эту зависимость, полезно рассмотреть конкретные аспекты упомянутых параметров. Удельная мощность на перемешивании представляет собой меру энергии, затраченной на перемешивание единицы вещества в системе. Она может зависеть от таких факторов, как скорость потока, форма мешалки и свойства жидкости или смеси.

Учитывая соотношение (3.20), получим выражение движущей силы, содержащей удельную мощность на перемешивании:

$$X = -\frac{\pi d^2 (2\Sigma_{r1} - \Sigma_{rr})}{2} + \frac{\pi \rho_2^0 d^3 (d\varepsilon)^{2/3}}{12};$$
(3.21)

Согласно принципу минимума производства энтропии, процесс измельчения будет продолжаться до тех пор, пока не достигнет стационарного значения [95,100]. Это означает, что в процессе дробления гетерогенной системы происходит постепенное изменение ее состава и структуры до тех пор, пока не установится стационарное состояние системы, при котором производство энтропии минимально [3].

Производство энтропии (σ) гетерогенной системы при дроблении можно представить в виде математической функции, которая описывает изменение энтропии системы во времени за счёт необратимых процессов дробления. Эта функция может зависеть от множества параметров, таких как величина процесса дробления, тип используемого оборудования, свойства материалов и другие. Изучение этой зависимости позволяет понять, какие факторы оказывают влияние на эффективность процесса измельчения и как можно оптимизировать его для получения требуемых результатов. Производство энтропии (σ) гетерогенной системы при дроблении, можно представить в виде:

$$\sigma = JX \tag{3.22}$$

где *J* – термодинамический поток дробления, *X* – термодинамическая сила дробления. Из соотношения Онзагера следует что поток связан с движущей силой [101]:

$$J = LX, \tag{3.23}$$

Для достижения минимума производства энтропии требуется наличие экстремума σ , то есть точки, в которой производство энтропии достигает своего наименьшего значения:

$$\frac{d\sigma}{dd} = 0; \tag{3.24}$$

Запишем условие экстремума *σ* с использованием ранее полученных выражений (3.19–3.23):

$$J\frac{dx}{dd} = 0; (3.25)$$

где поток дробления частиц определяется выражением:

$$J = L \left[-\frac{\pi d^2 (2\Sigma_{r1} - \Sigma_{rr})}{2} + \frac{\pi \rho_2^0 d^3 (d\varepsilon)^{2/3}}{12} \right];$$
(3.26)

Условие *min σ* (3.25) возможно в случае выполнения одного из ниже представленных условий:

$$J = 0, \frac{dx}{dd} \neq 0; \tag{3.27}$$

$$J > 0, \frac{dX}{dd} = 0;$$
 (3.28)

$$J = 0, \frac{dX}{dd} = 0, (3.29)$$

Критерий Вебера для частицы с учётом (3.20):

$$We = \frac{\rho_2^0 d^{5/3} \varepsilon^{2/3}}{2\Sigma_{r_1} - \Sigma_{r_r}}$$
(3.30)

Рассмотрев все три условия получим ряд значений функции Вебера:

 $We \neq 3.27, We = 6.$ Для выражения (3.27)

We = 3.27, *We* > 6 – для выражения (3.28), но это условие не имеет физического смысла.

We = 3.27, *We* = 6 Для выражения (3.29) но, это условие не имеет физического смысла.

Таким образом, остаётся только одно физически возможное значение критерия Вебера, которое будет удовлетворять принципу минимума производства энтропии:

$$We = 6 \tag{3.31}$$

Из этого следует, что зависимость для размера частиц устойчивых к дроблению можно получить из соотношения [37]:

$$d = \frac{[6(2\Sigma_{r1} - \Sigma_{rr})]^{3/5}}{\rho_2^{0^{3/5}} \varepsilon^{2/5}}$$
(3.32)

Полученное соотношение хорошо соответствует результатам исследования, проведенного в работе [102]. В этой работе исследовалась устойчивость межфазных границ при дроблении пузырьков из гелия, воздуха и водорода. В ходе исследования было установлено, что критическое число Вебера для этих рассматриваемых пузырьков составляло примерно 6.

Было также сделано заключение о том, что плотность и размер частицы влияют на интенсивность дробления. Это подтверждает влияние плотности включений на параметры процесса дробления, описанные в формуле (3.32). Эти выводы позволяют лучше понять физические процессы, происходящие при дроблении пузырьков, и их зависимость от различных параметров, таких как размер и плотность частиц. Рассмотрев работу [103], проделанную с большим количеством экспериментальных данных по измельчению капель, взвешенных в турбулентном потоке, было замечено, что данные описывались эмпирически выведенной формулой

$$d \sim \mathcal{C} \cdot \Sigma^{0,5 \pm 0,6},\tag{3.33}$$

где С –постоянная.

Такая зависимость хорошо согласуется с выведенным нами ранее соотношением (3.32), связанным с поверхностным натяжением.
3.4 Алгоритм определения мощности на измельчение частиц в планетарной мельнице (на основе представления мощности в виде регрессионной

зависимости)

В данной работе используется полученная зависимость (3.32) для определения диаметра устойчивых к дроблению частиц оксида алюминия, измельчаемых в планетарной мельнице в условиях экспериментов, проведённых в главе 2. Здесь мы сделаем предположение, что мощность «є» в формуле (3.32) является выражением для мощности на измельчение частиц оксида алюминия в рассматриваемой планетарной мельнице [3].

Для повышения точности последующих вычислений стало необходимым определение удельной мощности, затрачиваемой на измельчение материала. Этот показатель отражает энергоэффективность процесса, и рассчитывается с использованием специально разработанной регрессионной модели, описываемой уравнением:

$$\varepsilon(z_1, z_2) = a_0 + a_1 * z_1 + a_2 * z_2 + a_{12} * z_1 * z_2; \qquad (3.34)$$

где коэффициенты a₀, a₁, a₂ и a₁₂ определяются на основе экспериментальных исследований и учитывают влияние ряда ключевых факторов, таких как параметры дробления – размер дробящих шаров и отношение масс дробящего материала к измельчаемому [104].

В частности, переменные z1 и z2 вводятся следующим образом:

$$Z_1 = \frac{m_{\text{шаров}}}{m_{\text{порошка}}}; Z_2 = \frac{d_0}{d_{\text{шаров}}}$$
, (3.35)

где z1 характеризует соотношение массы дробящих шаров к массе порошка, а z2 отражает геометрическое соотношение базового размера к размеру используемых шаров. Это позволяет детально оценить, как массовые и размерные параметры влияют на процесс измельчения, используя полученную на основе принципа минимума производства энтропии формулу размера частиц устойчивых к дроблению:

$$d_{\rm ycr} = \left(\frac{6\Sigma}{\rho_2^0}\right)^{3/5} \frac{1}{\varepsilon^{2/5}} \tag{3.36}$$

Кроме того, для более глубокого анализа процесса учитывается устойчивость частиц к дроблению. На основании принципа минимизации производства энтропии была выведена формула, определяющая устойчивый размер шаров, способных противостоять механическим воздействиям, уравнение (3.36). Из этой зависимости выражается удельная энергия измельчения в виде:

$$\varepsilon = \sqrt{\left(\frac{\rho_2^0}{6\Sigma}\right)^3 d_{\rm ycr}^{-5}} \tag{3.37}$$

Используя данное выражение (3.37) и известные из эксперимента устойчивые к дроблению размеры частиц, была составлена и решена система из четырёх уравнений, решением которой были значения коэффициентов для регрессионной зависимости, представленные ниже.

Для решения системы уравнений использовался метод наименьших квадратов, по результату которого был получен следующий перечень коэффициентов для функции $\varepsilon(z_1, z_2)$:

$$a_0 = -33580791$$

$$a_1 = -2397174$$

$$a_2 = 281977735$$

$$a_{12} = 68962178$$
(3.38)

В таблице X приведены значения диаметров частиц, найденных по соотношению (3.32) с использованием для линейной регрессии полученных коэффициентов (3.38) и значения диаметров частиц, полученных в экспериментальных исследованиях (приведённых в главе 2).

Таблица 3.1 – Средние значения диаметров частиц

Управляющие параметры		Устойчивый к изм части	Отклонение,	
Мелющие	Соотношение	Росцёт Эксперимент		%
тела, мм	масс, m_{III}/m_{π}	1 de lei	Okenephinen	
2	3	2,04	2,04	0
5	3	3,42	3,42	0
2	5	1,83	1,83	0
5	5	2,97	2,97	0

Для проверки адекватности математической модели определения диаметра частицы, устойчивой к дроблению представленной соотношением (3.32) были проведены дополнительные экспериментальные исследования с другими режимными параметрами. Соотношение масс мелющих шаров к массе измельчаемого материала составляло 3:1. Измельчение проводили до тех пор, пока средний размер частиц не становился постоянным [3].

В таблице 3.2 приведены результаты сопоставления размеров. Параметры в формуле линейной регрессии (3.34) не менялись.

Управляющие параметры		Устойчивый к измельчению лиаметр частии, мкм		Отклонение	
Мелющие тела, мм	Соотношение масс, m _ш /m _п	Расчёт Эксперимент		%	
3	3	2,51	2,59	3,2	
3	5	2,23 2,31		3,7	

Таблица 3.2 – Средние значения диаметров частиц

Из данных, приведённых в таблицах 3.1 и 3.2, видно хорошее соответствие расчётных и экспериментальных данных, что свидетельствует о применимости соотношения 3.32 к определению размера устойчивых к дроблению частиц в планетарной мельнице.

Из соотношения (3.32) видно, что поверхностная энергия частицы и мощность, затрачиваемая на измельчение, влияют нелинейно. Чем меньше поверхностная энергия и чем больше затрачиваемая мощность, тем меньшего размера частицы можно достичь при измельчении.

3.5 Алгоритмы машинного обучения для определения мощности на перемешивание и их сравнение

В рамках проведённого исследования, базирующегося на принципе минимума производства энтропии, было выведено уравнение (3.37), которое выражает удельную мощность измельчения как функцию ключевых параметров процесса. Это уравнение связывает энергоэффективность с физическими характеристиками системы, позволяя оценить влияние различных режимных факторов на процесс измельчения.

Для формирования обучающей выборки использовались экспериментальные данные, в которых фиксировались управляющие параметры процесса измельчения, такие как соотношение масс дробящих шаров и порошка, а также размеры шаров. Особое внимание уделялось обязательному параметру – размеру частиц, устойчивых к дальнейшему измельчению (то есть такому размеру, при котором частицы перестают уменьшаться при продолжительном измельчении). Именно этот устойчивый размер служил основой для расчёта удельной мощности по уравнению (3.37). После вычисления мощности данные нормировались, что обеспечивало корректное масштабирование входных параметров для обучения моделей машинного обучения.

Сформированная выборка, где для каждого набора управляющих параметров процесса соотносились рассчитанные значения удельной мощности, стала базой для построения прогностических моделей. В исследовании были рассмотрены и обучены три различных алгоритма машинного обучения:

Линейная регрессия. Эта модель устанавливает прямую зависимость между входными параметрами и выходной величиной (удельной мощностью). Благодаря своей простоте и интерпретируемости она используется для первоначального анализа данных и создания базовой модели, позволяющей оценить влияние каждого параметра на результирующую мощность. Эта модель представлена в разделе 3.4.

Случайный лес. Являясь ансамблевым методом, случайный лес строит множество деревьев решений, каждое из которых обучается на случайно выбранных подвыборках данных и признаков. Итоговый прогноз получается усреднением результатов всех деревьев, что значительно повышает точность модели. В нашем случае этот метод показал высокую способность к описанию сложных нелинейных зависимостей между параметрами процесса и удельной мощностью на измельчение.

Метод k-ближайших соседей (k-NN). Данный алгоритм основывается на поиске k наиболее близких наблюдений в пространстве параметров и использовании их значений для предсказания мощности для нового объекта. Такой подход особенно

эффективен при наличии локальных закономерностей в данных и позволяет получать достаточно точные прогнозы.

После обучения моделей их качество оценивалось с использованием тестового набора данных и стандартных метрик, таких как средняя квадратичная ошибка (MSE) и коэффициент детерминации (R²). Результаты показали, что:

Модель линейной регрессии достигла R² = 0.7181, что свидетельствует о способности объяснять около 71.81% дисперсии данных, однако этот показатель указывает на ограниченную точность при описании сложных зависимостей.

Случайный лес продемонстрировал выдающуюся точность с R² = 0.9919, что означает, что модель способна объяснить около 99.19% вариаций в данных, что подтверждает её высокую эффективность для данной задачи.

Метод k-ближайших соседей показал промежуточный результат с R² = 0.9301, что также является хорошим показателем, однако уступает случайному лесу.

Для наглядного сравнения производительности моделей был построен график (рисунок 3.1), где отображены значения коэффициента детерминации для каждой из рассмотренных моделей. Из графика видно, что модель на основе случайного леса имеет наивысшую точность, за ней следует метод k-ближайших соседей, а линейная регрессия демонстрирует наименьшую эффективность в контексте данной задачи.



Рисунок 3.1 – Сравнение точности моделей машинного обучения

Этот график подчеркивает важность выбора подходящей модели для конкретной задачи машинного обучения и демонстрирует, как правильный выбор модели может существенно повлиять на ее способность к предсказанию и интерпретации данных.

Далее для более точного выбора модели, следует обратиться к гиперповерхности, описывающей входные данные и результат предсказания. На графиках (рисунок 3.2) ниже представлены поверхности для градиентного бустинга и многослойного перцептрона (рисунок 3.2). Для поверхности градиентного бустинга заметна сильная дифференцированность выходных данных. Что говорит нам о том, что в случае не значительного изменения входных параметров, результат работы модели не будет иметь качественных результатов. Для многослойного перцептрона наоборот, наблюдается плавное изменение поверхности.



Рисунок 3.2 – Сравнение предиктивных поверхностей моделей градиентного бустинга и многослойного перцептрона

Так как коэффициент детерминации для этих двух моделей достаточно высокий, ключевым показателем выбора модели будет её способность описывать промежуточные данные, а следовательно, будет выбран многослойный перцептрон.

3.6 Результаты расчета значений диаметров частиц оксида алюминия, устойчивых к дроблению при различных режимных параметрах планетарной мельницы

На основе коэффициентов, полученных для регрессионной зависимости (3.34), и результатов, достигнутых с помощью алгоритмов машинного обучения, были вычислены устойчивые к дроблению диаметры, представленные в таблице 3.3. Расчётные значения, полученные по регрессионной формуле, совпадают с экспериментальными данными, что подтверждается сведениями, приведёнными в таблице. Дополнительно, отдельная колонка демонстрирует размеры частиц, рассчитанные с использованием метода случайного леса для оценки устойчивости к измельчению.

Для количественной оценки качества модели использовались такие показатели, как коэффициент детерминации (R²) и среднеквадратичная ошибка (MSE). R² отражает долю общей дисперсии зависимой переменной, объясненную моделью, и вычисляется по следующей формуле:

$$R^{2} = 1 - \frac{\sum_{n} (d_{i} - \hat{d}_{i})^{2}}{\sum_{n} (d_{i} - \bar{d})^{2}}$$
(3.39)

где n – число наблюдений, d_i – фактическое значение для i-го наблюдения, \hat{d} – предсказанное значение, а \bar{d} – среднее значение по наблюдениям.

Показатель MSE характеризует среднее квадратичное отклонение между предсказанными и реальными значениями и определяется следующим образом:

$$MSE = \left(\frac{1}{n}\right) * \Sigma \left(d_i - \hat{d}_i\right)^2 \tag{3.40}$$

где, n - количество наблюдений, d_i - фактическое значение зависимой переменной для i-го наблюдения, \widehat{d}_i - предсказанное значение зависимой переменной для i-го наблюдения.

Точность модели случайных лес деревьев составляет R²=96.47% MSE=0.039 мкм

Управляющие		Устойчивый к измельчению диаметр		
пар	аметры	частиц, мкм		Отипонали
Мелющие	Соотношение	Расчёт на основе Расчёт на основе		
тела, мм	масс, m_{III}/m_{II}	регрессии	машинного	70
			обучения	
1	1	1,72	1,72	0,28%
2	1	2,38	2,37	0,50%
3	1	2,95	2,93	0,56%
4	1	3,53	3,49	1,08%
5	1	4,17	4,07	2,41%
6	1	4,93	4,80	2,71%
7	1	5,94	5,83	1,84%
1	2	1,59	1,59	0,03%
2	2	2,19	2,19	0,02%
3	2	2,7	2,70	0,02%
4	2	3,19	3,19	0,12%
5	2	3,72	3,70	0,46%
6	2	4,3	4,28	0,49%
7	2	5,01	5,14	2,50%
1	3	1,49	1,49	0,08%
2	3	2,04	2,04	0,19%
3	3	2,51	2,51	0,02%
4	3	2,95	2,96	0,26%
5	3	3,4	3,43	0,92%
6	3	3,89	3,92	0,66%
7	3	4,45	4,50	1,11%
1	4	1,41	1,41	0,09%
2	4	1,93	1,93	0,14%
3	4	2,35	2,36	0,37%
4	4	2,76	2,78	0,64%
5	4	3,16	3,22	1,85%
6	4	3,59	3,63	1,23%
7	4	4,06	4,07	0,36%
1	5	1,34	1,34	0,34%
2	5	1,83	1,83	0,06%
3	5	2,23	2,24	0,25%
4	5	2,6	2,63	1,20%
5	5	2,97	2,98	0,42%
6	5	3,36	3,38	0,54%
7	5	3,77	3,76	0,18%

Таблица 3.3 – Сравнение расчёта устойчивого размера частиц посредством регрессии и метода машинного обучения

Управляющие		Устойчивый к изм		
пар	аметры	частиц, мкм		Отитонациа
Мелющие	Соотношение	Расчёт на основе Расчёт на основе		
тела, мм	масс, m_{III}/m_{II}	регрессии	машинного	70
			обучения	
1	6	1,29	1,29	0,17%
2	6	1,75	1,75	0,01%
3	6	2,13	2,13	0,11%
4	6	2,48	2,50	0,74%
5	6	2,82	2,80	0,79%
6	6	3,17	3,18	0,18%
7	6	3,54	3,52	0,50%
1	7	1,24	1,24	0,11%
2	7	1,68	1,68	0,00%
3	7	2,04	2,04	0,09%
4	7	2,37	2,35	0,85%
5	7	2,69	2,65	1,58%
6	7	3,01	3,01	0,07%
7	7	3,36	3,33	0,96%
8	1	1,19	1,21	1,36%
8	2	1,62	1,64	1,17%
8	3	1,96	2,00	1,65%
8	4	2,27	2,29	0,58%
8	5	2,58	2,63	1,94%
8	6	2,88	2,91	1,07%
8	7	3,20	3,22	0,68%
9	1	1,15	1,16	0,58%
9	2	1,57	1,59	1,26%
9	3	1,90	1,90	0,29%
9	4	2,19	2,20	0,49%
9	5	2,48	2,52	1,46%
9	6	2,77	2,78	0,49%
9	7	3,07	3,11	1,36%
10	1	1,12	1,14	1,75%
10	2	1,52	1,52	0,29%
10	3	1,84	1,87	1,75%
10	4	2,12	2,13	0,39%
10	5	2,40	2,41	0,78%
10	6	2,67	2,70	1,26%
10	7	2,95	2,99	1.26%

Для наглядности по полученной таблице был построен график (рисунок 3.3), на котором хорошо просматривается зависимость того, что чем меньше диаметра шара и чем сильнее превосходит общая масса шаров массу дробящегося материала, тем интенсивнее идёт дробление и, следовательно, устойчивый к дроблению размер меньше [3]. Схожие выводы были получены в [105].



Рисунок 3.3 – Зависимость размера частиц устойчивых к дроблению при различном z₂. а) при соотношении массы мелющих тел к массе порошка 2:1;

б) соотношение масс 4:1; в) соотношение масс 6:1;

3.7 Определение оптимальных режимных параметров планетарной мельницы для получения частиц оксида алюминия заданного размера

Современные композитные материалы предъявляют высокие требования к качеству наполнителей, особенно к размеру и однородности частиц оксида алюминия (Al₂O₃). Мелкодисперсный порошок Al₂O₃ со средним размером частиц из интервала [0.8 – 2.0 мкм] необходим для обеспечения однородного распределения в матрице композита и повышения его эксплуатационных свойств (отсутствие пористости, высокой прочности на изгибе и высокой микротвёрдости). Исследования показывают, что характеристики композитов

существенно зависят от размера частиц наполнителя. Например, в металломатричном композите на основе сплава *Al-2014* уменьшение среднего размера частиц оксида алюминия с десятков до единиц микрометров ведёт к более равномерному распределению без агломерации и к улучшению механической прочности и износостойкости материала [106].

Аналогично, в полимерных композитах (эпоксидных теплопроводных адгезивах) снижение размера порошка Al₂O₃ увеличивает теплопроводность и эффективность теплоотвода. При одинаковом содержании наполнителя меньшие частицы оксида алюминия дают более высокую теплопроводность композита [107]. В частности, добавление порошка Al₂O₃ со средним размером ~5мкм в эпоксидную матрицу обеспечило наименьшую рабочую температуру LED-модуля по сравнению с более крупным заполнителем, то есть достигнуто лучшее рассеяние тепла [107]. Эти примеры подтверждают необходимость получения высококачественного порошка оксида алюминия с мелкими частицами для использования в композиционных материалах нового поколения.

Для достижения требуемого среднего размера частиц [0.8 – 2.0 мкм] была разработана методология, объединяющая экспериментальное моделирование процесса измельчения и методы машинного обучения. Сначала были проведены эксперименты по помолу оксида алюминия с варьированием ключевых управляющих параметров процесса. В их числе:

- Время измельчения продолжительность помола в шаровой мельнице;
- Размер мелющих тел диаметр шариков (истирающей среды);
- Соотношение масс шаров к порошку относительное количество измельчающих тел и материала.

На основе полученных экспериментальных данных строились модели для предсказания результатов измельчения. Первый подход использует алгоритм *k*-ближайших соседей (k-NN) для прогноза конечного размера частиц. Данный алгоритм относит новый набор параметров процесса к случаям с известными результатами. По сути, k-NN ищет в базе экспериментов наиболее близкие (по параметрам помола) случаи и оценивает по ним размер частиц, который будет

получен. Это позволяет на ранних этапах предсказать, приведёт ли выбранный режим помола к достижению требуемого результата или потребуется корректировка параметров.

По экспериментальным данным была построена эмпирическая регрессия, связывающая величину удельной мощности с временем помола, размером шаров и их массой относительно массы порошка. Таким образом, полученная регрессионная модель позволяет рассчитать ожидаемый средний размер частиц в зависимости от режима помола. Более того, её можно использовать в обратном направлении: задав целевой размер, например ~1,5мкм и определить, какие значения параметров (например, время измельчения) минимально необходимы для его достижения.

Чтобы достичь среднего размера частиц около 1,5 мкм, рекомендуется применять шары диаметром 1 мм и соблюдать массовое соотношение между мелющими телами и обрабатываемым материалом на уровне 3:1.

Применение описанных моделей показало высокую эффективность в оптимизации процесса измельчения оксида алюминия. Алгоритм k-NN успешно предсказал исход помола для различных комбинаций параметров, совпадая с экспериментальными данными по размеру частиц. Это позволило сузить область поиска оптимальных условий: модель сразу указывает на режимы, близкие к требуемому результату, заведомо неэффективные комбинации. исключая Регрессионная модель на основе принципа минимального производства энтропии дала ценное теоретическое обоснование предельного размера и помогла количественно определить оптимальный режим. Используя полученную зависимость, были выбраны условия, при которых порошок Al₂O₃ стабильно достигает среднего размера ~1,5мкм без значительных фракций выше этого порога. Например, модель предсказала, что увеличение времени помола сверх определённого значения уже не даёт ощутимого уменьшения размеров частиц (достигается предел измельчения), что совпадает с экспериментальными наблюдениями. Таким образом, сочетание методов машинного обучения и

термодинамически обоснованной регрессии позволило точно предсказать и реализовать оптимальные параметры помола.

В результате процесса получения порошка заданной дисперсности было экспериментально получено распределение частиц со средним размером 1.63 микрон. Полученный порошок оксида алюминия соответствует критериям высококачественного компонента композитов – частицы имеют требуемый средний размер и распределение. Благодаря этому снижается потребность в повторном дроблении или просеивании, снижается энергозатратность процесса и обеспечивается стабильное повышение характеристик конечных композиционных материалов. Это подтверждает эффективность предложенного подхода в решении задачи получения мелкодисперсного порошка оксида алюминия для современных высокотехнологичных композитов.

3.8 Выводы по главе 3

Проведены исследования по применению методов неравновесной динамики и искусственного интеллекта для определения диаметра частиц оксида алюминия, устойчивых к дроблению в планетарной мельнице. Разработана математическая модель, учитывающая многокомпонентную динамику полидисперсной среды, процессы дробления включений и производство энтропии, что позволило вывести критерий устойчивости частиц на основе критического числа Вебера.

На основе термодинамического анализа найдена структура движущей силы процесса дробления, отражающая физикохимическую сущность процесса дробления.

На основе соотношения Онзагера в явном виде получена зависимость вероятности дробления частицы объёма r в виде A(r)=LWe(r), где We – критерий Вебера.

На основании принципа минимума производства энтропии получено аналитическое выражение для зависимости диаметра частицы, устойчивой к дроблению, которое подтверждено экспериментальными данными и согласовано с существующими эмпирическими зависимостями. Проведено моделирование процесса измельчения с использованием алгоритмов машинного обучения (линейной регрессии, метода случайного леса и k-ближайших соседей), где наивысшую точность показала модель случайного леса ($R^2 = 96,47\%$, MSE = 0,039 мкм), а выбор оптимальной модели обоснован анализом предиктивных поверхностей.

На основе экспериментальных и расчетных данных предложены оптимальные режимные параметры планетарной мельницы (подбор размеров мелющих шаров, соотношение масс дробящих тел и измельчаемого материала, время измельчения), позволяющие получать порошок оксида алюминия с заданным средним размером (1,5 мкм) и высокой энергоэффективностью процесса. Описаны все стадии разработки модели, от теоретического обоснования до практической реализации, что свидетельствует о перспективности данного подхода для оптимизации технологических процессов получения композитных материалов. Модель балансового распределения частиц является широко распространенной и основывается на уравнениях материального баланса для фракций различного размера. Эта модель представляет собой важный инструмент для анализа и прогнозирования процессов, связанных с дроблением и сортировкой материалов. Она позволяет оценить, как распределяются частицы различного размера в системе в результате проведенных операций дробления и сортировки. Используя уравнения материального баланса, модель позволяет определить доли и распределение частиц по размерам в исследуемой системе в зависимости от характеристик процесса и свойств материала.

В главе 3 представлено уравнение баланса числа частиц с учётом измельчения частиц. Второе уравнение в системе (3.3) имеет вид:

$$\frac{\partial}{\partial t}f(r) + div[f(r)\overline{U_2}(r)] = -f(r)A(r) + \int_r^{r_{max}} f(\gamma)A(\gamma)B(r/\gamma)d\gamma \quad (4.1)$$

где A(r) – вероятность дробления частицы объёмом r, $B(r/\gamma)$ – условная вероятность дробления частицы объёмом γ с образованием частицы объёма *r*. Причём:

$$\int_{0}^{\gamma} \frac{1}{\gamma} B(r/\gamma) dr = 1$$
(4.2)

Полагаем, что для планетарной мельницы, выполнены условия идеального смешения, то есть $div(f\vec{v}_2) = 0$.

Тогда уравнение баланса числа частиц приводится к виду:

$$\frac{\partial}{\partial t}f(r) = -f(r)A(r) + \int_{\gamma}^{R_{max}} f(\gamma)A(\gamma)B(r/\gamma)d\gamma$$
(4.3)

Начальное условие для уравнения (4.3) будет $f(t=0, r) = \varphi(r)$.

В главе 3 получено, что A(r) можно представить соотношением

$$A = L \cdot We \tag{4.4}$$

$$We = \frac{\rho_2^0 d^{5/3} \varepsilon^{2/3}}{2\Sigma_{r_1} - \Sigma_{rr}}$$
(4.5)

где *d* – диаметр частицы объёма *r*.

Функцию распределения дочерних частиц $B(r/\gamma)$ представим на основе данных приведённых в [59], в виде

$$B(r,\gamma) = 30 \left(\frac{r}{\gamma}\right)^2 \left(1 - \frac{r}{\gamma}\right)^2.$$
(4.6)

Легко видеть, выполнение условия (4.2)

$$\int_{0}^{\gamma} \frac{30}{\gamma} \left(\frac{r}{\gamma}\right)^{2} \left(1 - \frac{r}{\gamma}\right)^{2} dr =$$

$$= \frac{30}{\gamma} \left[\int_{0}^{\gamma} \frac{\gamma^{3}}{3} d\left(\frac{r}{\gamma}\right)^{3} - 2 \int_{0}^{\gamma} \frac{\gamma^{4}}{5} d\left(\frac{r}{\gamma}\right)^{5} + \int_{0}^{\gamma} d\left(\frac{r}{\gamma}\right)^{5} \right] =$$

$$= \frac{30}{\gamma} \left[\frac{\gamma}{3} - \frac{\gamma}{2} + \frac{\gamma}{5} \right] = \frac{30\gamma}{30\gamma} = 1$$
(4.7)

4.1 Приведение математической модели кинетики измельчения к безразмерному виду

Для сокращения объема памяти, требуемого для расчетов, а также улучшения точности вычислений, мы применяем метод обезразмеривания. Обезразмеривание позволяет преобразовать размерные переменные в безразмерные путем деления их на характерные величины.

Определение характерных величин происходит на основе известных данных, полученных экспериментально, или на основе предельных значений исследуемых величин. Когда мы разделим размерные величины на характерные величины, мы получим безразмерные соотношения, которые позволят нам работать с величинами в более компактной и удобной форме. Получим такие соотношения:

$$\begin{cases} f' = {}^{f} / {}_{f_0}; \\ A' = {}^{A} / {}_{A_0}; \\ B' = {}^{B} / {}_{B_0}; \\ l' = {}^{l} / {}_{l_0}; \\ M' = {}^{M} / {}_{M_0}; \\ t' = {}^{t} / {}_{t_0}; \\ N' = {}^{N} / {}_{N_0}; \\ r' = {}^{r} / {}_{r_0}; \\ \gamma' = {}^{\gamma} / {}_{r_0}; \end{cases}$$
(4.8)

В нашем случае нам неизвестны характерные значения A₀ и B₀, поэтому для дальнейших расчетов их необходимо найти и выразить через известные величины. Это можно сделать, используя известные данные и условия задачи. Подставив данные выражения (4.8) в исходную модель (4.3), получим выражение:

$$\frac{d}{dt'}f' = -t_0A_0 * f'A' + A_0B_0r_0t_0 * \int_{r'}^{R'_{max}} f'A'B'd\gamma'$$
(4.9)

Из данного выражения следует, что чтобы выполнялось обезразмеривание, множитель перед первым слагаемым и множитель перед вторым слагаемым должен быть равен единице, в таком случае получим равенства:

$$t_0 A_0 = 1 \tag{4.10}$$

$$A_0 B_0 l_0^3 t_0 = 1 \tag{4.11}$$

Так как t₀ нам известно получим что,

$$A_0 = \frac{1}{t_0}$$
(4.12)

Тогда подставив уравнение (4.12) в соотношение (4.11), получим значение В₀:

$$B_0 = \frac{1}{r_0} \tag{4.13}$$

Таким образом были получены обезразмеривающие величины для ранее неизвестных переменных. Также следует определить характерные значения для обезразмеривания функции распределения числа частиц по объёмам.

Интеграл от функции плотности числа частиц по радиусам позволит получить начальное число частиц:

$$\int_0^{R_{max}} f(r)dr = N \tag{4.14}$$

Тогда, подставив в него выражения для обезразмеривания, получим:

$$f_0 r_0 \int_0^{R'} f' dr' = N' N_0 \tag{4.15}$$

Получим из этого выражения $f_{0,}$

$$f_0 r_0 = N_0$$

$$f_0 = \frac{N_0}{r_0}$$
(4.16)

Характерное число частиц N₀ можно найти через выражение расчёта массы измельчаемого материала:

$$M = N_{\rm H} \langle r \rangle \rho_2^0 \tag{4.17}$$

где $\langle r \rangle$ - средний объём частиц в начальный момент времени, N_{μ} – число частиц в начальный момент времени.

Для определения характерного числа частиц выразим его из формулы (4.13):

$$N_0 = \frac{M}{\rho_2^0 \langle r \rangle} \tag{4.18}$$

Характерные величины приведены в таблице 4.1.

Таблица 4.1 – Характеристические величины

Переменная	Значение	Размерность
d ₀	10-4	М
\mathbf{r}_0	4.18*10 ⁻¹²	M ³
t_0	3600	с
M_0	0,1	КГ
N ₀	5×10 ⁴	КОЛ-ВО
A_0	1/3600	c ⁻¹
B ₀	108	M ⁻³
\mathbf{f}_0	5*10 ¹²	M ⁻³

Полученные значения в дальнейшем будут использоваться для снижения размерности задачи при расчётах.

Для решения уравнения баланса числа частиц (4.3) рассматривались две схемы.

Первая схема.

Схема расщепления основана на методе дробных шагов.

Первая подсхема:

$$\frac{f_j^{n+1/2} - f_j^n}{\Delta t} = -A_j f_j^{n+1/2}; \qquad (4.19)$$

Вторая подсхема:

$$\frac{f_j^{n+1} - f_j^{n+1/2}}{\Delta t} = \sum_{k=j}^{Nr} f_k^{n+1/2} A_k B_{jk} \Delta r$$
(4.20)

Просуммируем (4.19) и (4.20) получим

$$\frac{f_j^{n+1} - f_j^n}{\Delta t} = -A_j f_j^{n+1/2} + \sum_{k=j}^{Nr} f_k^{n+1/2} A_k B_{jk} \Delta r$$
(4.21)

Из соотношения (4.21) следует, что результирующая схема (4.21) аппроксимирует интегро-дифференциальное уравнение (4.3) с 2-ым порядком по переменным t и r, то есть $O(\Delta t^2, \Delta r^2)$. Интеграл аппроксимировали формулой трапеций.

Метод решения схемы расщепления

Из подсхемы (4.19) определяется значение на половинном шаге по времени $f_j^{n+1/2}$ в виде

$$f_j^{n+1/2} = \frac{f_j^n}{1 + \Delta t A_j} \tag{4.22}$$

Подставив $f_j^{n+1/2}$ во вторую подсхему (4.20), получим f_j^{n+1} в виде:

$$f_j^{n+1} = f_j^{n+1/2} + \Delta t \sum_{k=j}^{Nr} f_k^{n+1/2} A_k B_{jk} \Delta r$$
(4.23)

Также для решения интегро-дифференциального уравнения (4.3) рассмотрим схему предиктор-корректор.

Предиктор состоит из двух подсхем:

Первая подсхема:

$$\frac{f_j^{n+1/4} - f_j^n}{\Delta t/2} = -f_j^{n+1/4} A_j \tag{4.24}$$

Вторая подсхема:

$$\frac{f_j^{n+1/2} - f_j^{n+1/4}}{\Delta t/2} = \sum_{k=j}^{N_{\rm q}} f_k^{n+1/4} A_k B_{jk} \Delta r \tag{4.25}$$

Корректор:

$$\frac{f_j^{n+1} - f_j^n}{\Delta t} = -f_j^{n+1/2} A_j + \sum_{k=j}^{N_{\rm q}} f_k^{n+1/2} A_k B_{jk} \Delta r$$
(4.26)

Схема предиктор-корректор так же, как и схема расщепления аппроксимирует исходное интегро-дифференциальное уравнение с порядком аппроксимации по переменным *t*, *r* как $O(\Delta t^2, \Delta r^2)$.

Метод решения схемы предиктор-корректор

Из подсхемы (4.24) определяем

$$f_j^{n+1/4} = \frac{f_j^n}{1 + \frac{\Delta t}{2^{A_j}}}$$
(4.27)

Из подсхемы (4.25) определяем

$$f_j^{n+1/2} = f_j^{n+1/4} + \frac{\Delta t}{2} \sum_{k=j}^{Nr} f_k^{n+1/4} A_k B_{jk} \Delta r$$
(4.28)

Подставляем $f_j^{n+1/2}$ в (4.26) и получаем

$$f_j^{n+1} = f_j^n + \Delta t \left[-A_j f_j^{n+1/2} + \sum_{k=j}^{Nr} f_k^{n+1/2} A_k B_{jk} \Delta r \right]$$
(4.29)

Для примера рассмотрим следующую схему для решения интегродифференциального уравнения (4.3)

$$\frac{f_j^{n+1} - f_j^n}{\Delta t} = -f_j^{n+1} A_j + \sum_{k=j}^{N_{\rm q}} f_k^{n+1} A_k B_{jk} \Delta r$$
(4.30)

Схема (4.30) аппроксимирует исходные уравнения (4.3) с порядком аппроксимации $O(\Delta t, \Delta r^2)$.

Таким образом, для решения интегродифференциального уравнения более предпочтительными являются схема расщепления (4.19)-(4.20) и схема предиктор-корректор (4.24)-(4.26). Далее будут представлены результаты сравнения этих двух схем.

4.3 Разработка алгоритма расчёта конечной разностной схемы уравнения баланса числа частиц

Используя выведенные формулы, приведённые в разделе 4.2, для расчёта значений функции плотности распределения на различных шагах по времени, были составлены блок-схемы алгоритмов для решения интегродифференциального уравнения баланса числа частиц.

На рисунке 4.1 приведена блок-схема алгоритма расчёта уравнения (4.3) по схеме расщепления (4.19), (4.20), (4.22), (4.23).



Рисунок 4.1 Блок-схема алгоритма расчёта по схеме расщепления

На рисунке 4.2 приведена блок-схема алгоритма для решения уравнения (4.3) с применением разностной схемы предиктор-корректор с использованием полученных формул и соотношений (4.24)-(4.29).



Рисунок 4.2 Блок-схема алгоритма расчёта по схеме предиктор-корректор

Для расчёта уравнения (4.3) требуется начальные значения плотности распределения частиц по объёмам.

$$f(t=0, r) = \varphi(r) \tag{4.31}$$

В результате проведения экспериментальных исследований, приведённых в главе 2, получено начальное распределение частиц по линейным размерам (диаметрам).

Получим взаимосвязь между плотностями распределения частиц по объёмам и линейным размерам.

$$f(r)dr = \psi(l)dl \tag{4.32}$$

f(r) – плотность распределения по объёмам;

 $\psi(l)$ – плотность распределения по линейным размерам (диаметрам).

Имеет место равенство:

$$r = \frac{\pi l^3}{6} \tag{4.33}$$

Подставляя (4.32) в соотношение (4.31), получим:

$$f(r) = \frac{\psi(l)}{\frac{\pi}{2}l^2}$$
 (4.34)

И

$$\psi(l) = \frac{\pi}{2} l^2 f(r)$$
 (4.35)

Формула (4.33) и (4.34) – формулы для пересчёта между плотностями распределения, выраженными относительно объёма и линейного размера.

Причём $\psi_0 = N_0/l_0$, где l_0 – характерное значение диаметра частиц, объёма r_0 .

Для расчёта требуется начальное распределение частиц, которое вносится в программу в виде сдвинутого нормального распределения, где значение функции плотности для минимального размера l_{min} вычитается из плотности для l_i . Такая модификация позволяет задать нулевое значение функции на нижнем пределе, что удобно при моделировании распределения частиц с заданным минимальным размером.

$$\varphi_{i} = m_{c} \left[\frac{\exp\left(-\frac{\left(l_{i}-\langle l \rangle\right)^{2}}{2\sigma^{2}}\right)}{\sigma\sqrt{2\pi}} - \frac{\exp\left(-\frac{\left(l_{\min}-\langle l \rangle\right)^{2}}{2\sigma^{2}}\right)}{\sigma\sqrt{2\pi}} \right], \tag{4.36}$$

где m_c – корректирующий коэффициент для привидения плотности распределения к нормальному виду, *σ* – стандартное отклонение, *l_{min}* – минимальный размер частиц, *⟨l⟩* – средний исходный размер частиц. Значения констант и параметров начального распределения приведены в таблице 4.2

Параметр	Значение
m _c	0.1
σ	10.0 мкм
$\langle l \rangle$	34.6 мкм

Таблица 4.2 – Значения для начального распределения частиц.

4.4 Разработка алгоритма определения феноменологического коэффициента потока дробления частиц оксида алюминия в планетарной мельнице

Таким образом, математическая модель кинетики измельчения частиц оксид алюминия в планетарной мельнице имеет вид:

$$\frac{\partial}{\partial t}f(r) = -LWe(r)f(r) + \int_{r}^{R} f(\gamma)LWe(\gamma)PB(r/\gamma)d\gamma \qquad (4.37)$$

$$f(t=0,r) = \varphi(r) \tag{4.38}$$

$$We(r) = \frac{\rho_2^0 d^{5/3} \varepsilon^{2/3}}{\Sigma}$$
(4.39)

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

$$B(r,\gamma) = 30 \left(\frac{r}{\gamma}\right)^2 \left(1 - \frac{r}{\gamma}\right)^2 \tag{4.40}$$

$$\langle l \rangle = \frac{\int_0^L l\psi(l)dl}{\int_0^L \psi(l)dl}$$
(4.41)

где z_1 – отношение масс дробящих шаров к массе порошка оксида алюминия, z_2 – отношение характерного размера шара (1мм) к размеру используемых шаров.

В расчёте принималось $\rho_2^0 = 3900$ кг/м³, $\Sigma = 0.15$ кг/с². Начальное распределение было взято из экспериментальных исследований.

Неизвестными параметрами в уравнении (4.35) являются феноменологический коэффициент *L* и поправочный коэффициент *P*. Феноменологический коэффициент *L* отражает общую интенсивность процесса измельчения, поправочный коэффициент P характеризует особенности распределения образующихся при разрушении частиц фрагментов в данной планетарной мельнице.

Методика определения параметров модели

В настоящей работе определение указанных коэффициентов осуществлялось посредством численной процедуры оптимизации, направленной на минимизацию отклонения между расчётными и экспериментальными значениями конечного среднего размера частиц. В качестве метода оптимизации был выбран градиентный спуск, что обосновано рядом его преимуществ.

Чувствительность модели к параметрам. Даже незначительные изменения коэффициентов существенно влияют на поведение модели, что требует применения метода, способного эффективно уточнять значения параметров на каждом шаге расчёта.

Гладкость функции отклика. Целевая функция, отражающая расхождение модели с экспериментом, является непрерывной и дифференцируемой, что делает метод градиентного спуска особенно эффективным в данной задаче.

Сходимость при большом числе итераций. Процесс подбора параметров требует многократных повторных расчётов кинетики измельчения, и метод градиентного спуска обеспечивает приемлемую скорость сходимости при разумных вычислительных затратах.

Повышение эффективности численных расчётов

Одной особенностей выбранного ИЗ подхода является высокая вычислительная стоимость одного шага оптимизации, связанная С необходимостью повторного решения уравнений измельчения. В связи с этим была реализована система предварительного вычисления и хранения ключевых функциональных зависимостей:

• Массива интенсивности дробления частиц, зависящего от физических параметров процесса и размеров частиц;

• Массива, описывающего распределение фрагментов при дроблении частиц различных размеров.

Поскольку указанные массивы не изменяются в процессе оптимизации, они были заранее вычислены и сохранены в памяти. Это позволило избежать их

повторного формирования на каждом шаге расчёта, что в совокупности обеспечило существенное сокращение общего времени подбора параметров и повышение стабильности модели.

Критерии оценки параметров

Подбор параметров осуществлялся с ориентацией на достижение значений минимального отклонения расчётных ОТ экспериментально зафиксированных конечных размеров частиц. Дополнительно, для повышения модели, проверка численной устойчивости достоверности производилась материального баланса в пределах системы. Несмотря на то, что величина баланса не входила в состав экспериментальных данных, его соблюдение в расчётах являлось важным критерием физической достоверности решения.

Результаты параметризации

Результаты подбора параметров представлены в таблице 4.3. В ней указаны значения феноменологического коэффициента L и параметра распределения P, соответствующие различным степеням отклонения расчётных данных от экспериментальных, по среднему размеру частиц.

Отклонение, %	L (безразмерное значение)	Р
83,40%	400,0	40,0
65,60%	361,52	35,515
57,99%	329,85	21,729
50,38%	298,18	7,942
48.02%	307.73	16.838
47,68%	309,09	18,109
31,35%	261,11	9,179
15,01%	213,13	0,249
14,93%	213,25	0,257
14,85%	213,37	0,265
12,72%	411,84	0,142
10,58%	610,32	0,018

Таблица 4.3 – Значения коэффициентов подобранных в ходе расчётов

Из анализа данных таблицы 4.3 следует, что наименьшее отклонение между расчётом и экспериментом достигается при низких значениях параметра Р. Таким образом, определены значения

$$L = L' \cdot L_0 = 610,32 * \frac{1}{3600} = 0,169 \mathrm{c}^{-1}$$

Следует отметить, что результат расчёта интегро-дифференциального уравнения двумя схемами – схемой расщепления и схемой предиктор-корректор – близки (относительное отклонение не превышает 0,5%)

4.5 Анализ результата расчета численного решения процесса измельчения и его оптимизация

Таблица 4.4 демонстрирует относительные ошибки между расчётными и экспериментальными значениями конечного среднего размера частиц для различных комбинаций параметров:

Таблица 4.4 – Соотношение конечных средних размеров расчётных и экспериментальных

Размер шаров, мкм	Соотношение масс	<r<sub>расчет>, мкм</r<sub>	<r<sub>эксп>, мкм</r<sub>	Отклонение, %
2	5:1	2,19	1,831	16
2	3:1	2,36	2,043	13
5	5:1	2,87	2,972	3
5	3:1	3,07	3,424	10

Для проверки адекватности модели кинетики измельчения (4.35-4.38) с найденными параметрами L и P были проведены дополнительные эксперименты при условиях: размер шаров Змм, соотношение масс 3:1, т.е. при тех условиях, которые не участвовали в поиске параметров L и P.

Таблица 4.5 – Средние размеры частиц (при условиях: размер шара 3 мм, соотношение масс 3:1)

d _{кинетика} , мкм	Отклонение, %	d _{принцип min σ} , MKM	Отклонение, %	d _{эксперимент} , мкм
2,65	2,3	2,51	3	2,59

Результаты, приведённые в таблице 4.5, также свидетельствуют об адекватности кинетической модели с найденными параметрами L и P.

Из рисунков (4.2)-(4.5) видно, что основное измельчение осуществляется на первых пятнадцати минутах. Также из рисунков (4.2)-(4.5) следует, что чем меньше размер шаров и выше соотношение масс мелющих шаров к измельчаемому материалу, тем скорость измельчения выше.

Подобранные коэффициенты использовались для проведения расчётов и последующего сравнения с экспериментальными данными. Для того, чтобы сделать вывод о качестве проведённых расчётов, вычислим относительные ошибки для каждого из четырёх экспериментов по следующей формуле [4]:

$$R_i = \frac{r_i^{{}^{\mathfrak{scn}}} - r_i^{{}^{\mathfrak{pacyer}}}}{r_i^{{}^{\mathfrak{scn}}}}$$
(4.42)

Для более достоверного анализа необходимо учитывать не только конечные средние размеры частиц, но и изменение из размеров в процессе дробления. Для визуального сравнения рассчитанных и экспериментальных значений приведены графики (рисунки 4.3-4.6), иллюстрирующие динамику среднего размера частиц во времени для всех режимных параметров процесса измельчения (см. главу 2).



Рисунок 4.3 – Зависимость среднего размера частиц от времени дробления (при условиях размер шаров 5мм, соотношение масс 5:1)



Рисунок 4.4 – Зависимость среднего размера частиц от времени дробления (при условиях размер шаров 5мм, соотношение масс 3:1)



Рисунок 4.5 – Зависимость среднего размера частиц от времени дробления (при условиях размер шаров 2мм, соотношение масс 3:1)



Рисунок 4.6 – Зависимость среднего размера частиц от времени дробления (при условиях размер шаров 2мм, соотношение масс 5:1)

На рисунке 4.7 представлено рассчитанное распределение числа частиц по размерам на различных этапах дробления. Данные получены на основе численного моделирования процесса с использованием выбранной модели (4.35)-(4.38).



Рисунок 4.7 – Распределение частиц по размерам для эксперимента d_ш=5мм и соотношением масс 5:1. 1 – начальное распределение частиц, 2 – распределение на 30 минуте измельчения, 3 – распределение на 60 минуте измельчения, 4 – распределение на 90 минуте измельчения

102

Важно отметить, что в качестве исходного распределения частиц использовались два подхода:

• Сгенерированное распределение, основанное на нормальном законе и позволяющее независимо настраивать средний размер и дисперсию частиц полученные на основе экспериментальных данных.

• Экспериментально измеренное распределение, полученное в ходе физического эксперимента и отражающее реальные условия начального состояния материала.

Несмотря распределениях, на различия В начальных качественные характеристики конечного распределения практически не изменялись. Сравнение сгенерированным распределением (на между начальным основе экспериментального совпадением дисперсии) С среднего размера И И экспериментальным распределением представлено на рисунке (4.8).

На рисунке 4.9 представлено сравнение двух расчётных распределений по размерам в конце процесса измельчения. Одно распределение получено при начального распределения, другое распределение получено при начальном задании экспериментального распределения.



Рисунок 4.8 – Сравнение экспериментального и сгенерированного распределений

по размерам частиц



Рисунок 4.9 – Сравнение расчётных плотностей распределения частиц по размерам при 90 мин. размер шаров 2 мм, соотношение масс 3:1.

1) Получено из экспериментального; 2) Получено из сгенерированного;

Качественное совпадение двух распределений свидетельствует о влиянии функции $B(r/\gamma)$ на дисперсию полученных распределений. Условная вероятность дробления частиц объёмами γ с образованием частиц размера r, представленная зависимостью (4.6) является функцией симметричной, предсказывающей наибольшую вероятность образования частицы $r=\gamma/2$ и за счёт этого сужающей дисперсию распределения частиц по размерам.

Параметры		Эксперимент		Кинетика	
Диаметр шара, мм	Соотношение масс	Сред. размер, мкм	Дисперсия	Сред. размер, мкм	Дисперсия
2	3:1	2,043	1,429	2,36	1,096
2	5:1	1,831	1,353	2,19	0,856
5	3:1	3,424	1,795	3,07	1,319
5	5:1	2,972	1,724	2,87	1,287

Таблица 4.6 – Сравнение характеристик распределения частиц по размерам

В таблице 4.6 приведены результаты сравнения среднего размера и дисперсии, полученных в результате экспериментальных исследований и расчёта кинетики измельчения.

Видно, что средние размеры находятся в хорошем соответствии, а дисперсия, полученная при расчёте кинетики измельчения меньше, чем дисперсия экспериментальных кривых.

Из таблицы 4.6 видно, что и результат расчётной дисперсии и полученной из экспериментальных исследований показывает уменьшение дисперсии при уменьшении размера мелющих шаров и увеличении соотношения масс мелющих шаров к измельчаемому материалу. Несмотря на различия в совпадении значений дисперсии в расчёте кинетики измельчения и в экспериментальных исследованиях качественное поведение от режимных параметров совпадает.

На рисунке 4.9 представлено изменение среднего размера частицы оксида алюминия при расчёте кинетики процесса измельчения во времени, (4.41) при условиях, что размер шаров 3мм, соотношение масс 3:1.



Рисунок 4.10 – Изменение среднего размера частиц от времени при условиях размер шаров 3мм, соотношение масс 3:1

Рассматриваемые условия: размер шара 3мм, соотношение масс 3:1 не были включены в группу экспериментальных исследований, по которым определялись

параметры процесса измельчения *L* и *P*. Из Рисунка 4.10 и таблицы видно хорошее соответствие расчётных и экспериментальных данных.

Таким образом, на основе полученных результатов можно сделать вывод, что математическая модель кинетики измельчения в планетарной мельнице (на примере оксида алюминия), представленная уравнениями и соотношениями (4.35)-(4.38) с большой степенью достоверности описывает процесс измельчения.

Для получения керамоматричного композита с высокими свойствами желательно иметь оксид алюминия с размерами в интервале [0,8 – 2,0 мкм]. Расчёт показал, что частицы оксида алюминия с такими размерами можно достичь при измельчении в планетарной мельнице с режимными параметрами:

1) Размер мелющих шаров 1мм. Соотношение масс мелющих тел к измельчаемому порошку может находиться в интервале: [10:1 – 2:1];

2) Размер мелющих шаров 2мм. Интервал соотношения масс: [10:1-3:1];

3) Размер мелющих шаров 3мм. Интервал соотношения масс: [10:1-7:1];

С размерами мелющих шаров более 3мм, соотношение масс должно превышать 10:1.

4.6 Выводы по главе 4

1. Разработана математическая модель кинетики процесса измельчения в планетарной мельнице;

2. Уравнения математической модели процесса измельчения в планетарной мельнице приведён к безразмерному виду;

3. Для решения интегро-дифференциального уравнения математической модели измельчения разработаны две разностные схемы, аппроксимирующие данные уравнения с порядком аппроксимации $O(\Delta t, \Delta r^2)$: схема расщепления, схема предиктор корректор;

4. Разработана блок-схема алгоритма и программный комплекс для решения уравнений математической модели измельчения в планетарной мельнице; 5. Определены феноменологический коэффициент потока дробления частиц и учитывающий параметр (для сохранения массы в процессе дробления) для условной вероятности $B(r,\gamma)$;

6. Проведена проверка адекватности математической модели процесса измельчения в планетарной мельнице;

7. Приведены результаты расчёта процесса измельчения в планетарной мельнице. Показано что основное измельчение осуществляется на первых пятнадцати минутах процесса измельчения. Показано, что чем меньше размер мелющего шара и выше соотношение масс мелющих шаров к измельчаемому материалу, тем выше скорость измельчения и тем меньшего размера частиц можно достичь при измельчении.

8. Для получения оксида алюминия с размерами в интервале [0,8-2,0 мкм] определены оптимальные режимные параметры планетарной мельницы: 1) размер мелющих шаров 1мм, соотношение масс мелющих тел к измельчаемому материалу [10:1 – 2:1]; 2) размер мелющих шаров 2мм, интервал соотношения масс: [10:1 – 3:1]; 3) размер мелющих шаров 3мм, интервал соотношения масс: [10:1 – 7:1];

5 РАЗРАБОТКА И РЕЗУЛЬТАТЫ ПРАКТИЧЕСКОГО ПРИМЕНЕНИЯ КОМПЛЕКСА ПРОГРАММ ПРОЦЕССА ИЗМЕЛЬЧЕНИЯ ОКСИДА АЛЮМИНИЯ

5.1 Разработка методики для создания цифрового двойника

Для разработки виртуальной модели (цифрового двойника) планетарной мельницы в работе выбран игровой движок Unreal Engine 5, а также применены технологии виртуальной реальности (VR). Выбор Unreal Engine 5 обусловлен его преимуществами с точки зрения визуализации и симуляции сложных процессов. Данный движок предоставляет современные средства графической визуализации физического позволяющие создавать фотореалистичную и движка, И интерактивную 3D-среду [108]. Кроме того, Unreal Engine изначально ориентирован не только на игровые приложения, но и на задачи в архитектуре, автомобилестроении и промышленности, что подтверждает его универсальность и пригодность для реализации цифровых двойников оборудования [108]. Важным фактором является широкое сообщество разработчиков и наличие множества готовых библиотек и плагинов, что ускоряет процесс разработки и интеграции [108]. Unreal Engine необходимых компонентов 5 обладает высокой производительностью и масштабируемостью, позволяя обрабатывать сложные сцены и расчеты в реальном времени, что критически важно при моделировании физических процессов мельницы и обработке больших объемов данных симуляции.

Одной из причин применения именно Unreal Engine 5 является его полная поддержка технологий виртуальной реальности. Использование VR позволяет создать эффект присутствия и высокой вовлеченности пользователя в процесс работы с цифровым двойником. Оператор или обучающийся может погрузиться в виртуальное пространство лаборатории и взаимодействовать с моделью планетарной мельницы так, как если бы он работал с реальной установкой. Согласно исследованиям в области обучающих симуляций, применение VR-технологий делает тренажеры и цифровые модели более наглядными и
интерактивными, повышая эффективность обучения за счет эффекта присутствия VR-среда обеспечивает безопасные условия для экспериментов [109]. С оборудованием: пользователь может отрабатывать навыки и проверять различные режимы работы без риска повредить реальное оборудование или получить травму [109]. Таким образом, сочетание Unreal Engine 5 и VR предоставляет оптимальные цифрового обладающего средства для создания двойника, высокой реалистичностью визуализации и возможностью интерактивного обучения персонала.

Для воспроизведения процесса измельчения частиц в планетарной мельнице необходима интеграция разработанной математической модели этого процесса в среду Unreal Engine 5. Математическая модель расчёта размера частиц основана производства откалибрована на принципе минимума энтропии И на экспериментальных данных, описывающих скорость дробления частиц при соударениях шаров и порошка в барабанах мельницы. В ходе работы реализована программная интеграция данной модели: разработан модуль на языке С++ для Unreal Engine, который рассчитывает изменение распределения размеров частиц во времени по заданным исходным параметрам (скорость вращения, загрузка, свойства материала и шаров). Этот модуль встроен в цикл обновления (Tick) приложения Unreal, благодаря чему вычисления выполняются синхронно с ходом визуальной симуляции. В каждый дискретный шаг времени модель использует текущие параметры процесса (например, текущую скорость вращения барабанов, время работы, параметры столкновений) и вычисляет уменьшение среднего размера частиц и изменения распределения частиц по размерам. Рассчитанные данные передаются в систему визуализации: например, могут отображаться как числовые показатели (текущий средний размер частиц, степень измельчения).

Выбор Unreal Engine 5 оказался выгоден и с точки зрения интеграции пользовательских моделей: движок предоставляет открытый доступ к исходному коду и расширяемость, что позволяет внедрять произвольные алгоритмы физического моделирования. Это означает, что математическая модель измельчения частиц была напрямую встроена в цифровой двойник без

109

упрощений, необходимых при использовании закрытых проприетарных систем. Концепция «гибридного» цифрового двойника, сочетающего данные от физических датчиков и результаты вычислительной модели, показывает эффективность подобного подхода [110].

В нашем случае цифровой двойник планетарной мельницы фактически использует математическую модель как виртуальный датчик процесса, дополняющий визуальную часть симуляции. Такой виртуальный датчик в реальном времени предоставляет данные о текущем гранулометрическом составе измельчаемого материала, которые трудно было бы измерить напрямую в физическом эксперименте. Интеграция модели выполнена таким образом, чтобы VR-визуализации: не нарушать плавность вычислительная нагрузка оптимизирована, а при необходимости расчеты могут выполняться на отдельном потоке. В результате достигнута синхронизация математической модели и графической среды: цифровой двойник не только отображает внешний облик и движение мельницы, но и имитирует ход технологического процесса измельчения, рассчитывая количественные показатели процесса параллельно с визуализацией.

5.2 Разработка комплекса программ цифрового двойника планетарной мельницы процесса измельчения частиц оксида алюминия

Цифровой двойник планетарной мельницы разработан на примере процесса измельчения частиц оксида алюминия (Al₂O₃) – одного из распространенных исследованиях измельчения. материалов, используемых В Выбор оксида алюминия обусловлен тем, что это хрупкий материал с хорошо изученными характеристиками измельчения, позволяющими провести верификацию модели. В рамках цифрового двойника смоделированы основные процессы, происходящие при помоле в планетарной шаровой мельнице. К таким процессам относятся: вращение центрального диска (водила) с закрепленными на нем барабанами, самовращение барабанов с измельчаемым материалом и шарами, а также износ движущих элементов мельницы, таких как ременная передача и валы мотора и планетарного диска.

Подход к созданию виртуальной модели позволяет не только проводить детальные исследования процесса измельчения керамических материалов, но и быстро адаптировать параметры для различных сценариев и условий. Такой подход не только повышает эффективность производственного процесса, но и снижает затраты на эксперименты с использованием физического оборудования, что является важным преимуществом в современной индустрии.

Ниже приведена блок-схемы интегрированной модели, демонстрирующие взаимодействие между математической моделью и цифровым двойником мельницы. Эти схемы представляют собой детальное описание каждого этапа процесса измельчения, включая параметры материала, характеристики оборудования, алгоритмы расчета И вывод результатов. Интеграция математической цифрового двойника обеспечивает модели И полную автоматизацию процесса анализа и оптимизации, а также улучшает точность результатов благодаря их взаимодействию в единой среде.



Рисунок 5.1 – Блок схема работы с цифровым двойником

Окружение в виртуальной среде было составлено из компонентов, распространяемых на бесплатной основе торговой площадки Epic Market Place, а также была разработана собственная 3D модель планетарной мельницы в программном обеспечении Blender.

В качестве основы была выбрана мельница «Активатор S2» исходя из наглядности устройства внутренних движущих механических составляющих. Иллюстрация выбранной планетарной мельницы представлена на рисунке 5.2.



Рисунок 5.2 – Планетарная мельницы «Активатор S2»

Одной из особенностей этой виртуальной среды является визуализация производительности мельницы в режиме реального времени, при этом динамика изменения размера частиц отображается на видном месте над мельницей (рисунок 5.3). По мере протекания процесса измельчения пользователи могут наблюдать за изменением размеров частиц, принимая обоснованные решения и корректируя длительность процесса по мере необходимости для достижения желаемых результатов [98].



Рисунок 5.3 – Отображение результата работы математической модели

Цифровой двойник планетарной мельницы дополнен текстовой панелью, отображающей текущее состояние измельчаемого материала, включая средний размер частиц. Эта панель предоставляет оператору важную информацию о процессе измельчения, позволяя контролировать и анализировать результаты в реальном времени. Кроме того, текстовая панель также отображает время измельчения, которое ускорено в несколько раз для удобства пользователей. Это позволяет операторам эффективно управлять временными рамками процесса и быстро реагировать на изменения, обеспечивая более эффективное использование мельницы. В случае слишком длительного измельчения устройство моделирует ситуацию выхода из строя важных внутренних компонентов аппарата [98].

Результаты построения цифрового двойника планетарной мельницы для измельчения оксида алюминия

Созданный цифровой двойник планетарной мельницы продемонстрировал широкие функциональные возможности и визуализацию процессов измельчения. Виртуальная модель получила интуитивно понятный интерфейс: информационная панель процесса с отображением данных протекающего процесса, а также VRинтерфейс для взаимодействия пользователя с оборудованием. На рисунке 5.3 представлен общий вид цифрового двойника – виртуальной лабораторной установки планетарной мельницы в среде Unreal Engine 5. Видно, что в виртуальном помещении лаборатории размещена трехмерная модель планетарной мельницы, воспроизводящая геометрию реального прибора (корпус, привод, опорная рама, вращающиеся барабаны и т.д.). Пользовательский аватар (в VR-очках) может свободно перемещаться вокруг оборудования, осматривая его со всех сторон, а также взаимодействовать с элементами – например, поднять крышку барабана или нажать кнопку на панели управления. Благодаря возможностям графического движка, визуализация достигает высокого уровня реализма: тщательно проработаны материалы поверхностей, присутствуют динамические тени и отражения, имитирована работа индикаторных ламп и окружение.

Функциональные возможности цифрового двойника включают в себя как интерактивное управление прибором, так и фоновый расчёт процесса измельчения. После запуска виртуальной мельницы, пользователь может в режиме реального времени наблюдать параметры процесса на экране. Система отображает данные снижения среднего размера частиц по времени, ускоренное время измельчения и износ элементов двигателя.

Помимо визуализации, цифровой двойник обладает важной функциональной возможностью – он способен прогнозировать результаты процесса измельчения на основе встроенной математической модели. В процессе виртуального опыта параллельно ведется расчет, и пользователь может видеть, как с течением времени уменьшается расчетный размер частиц. Например, при помоле оксида алюминия с исходным средним размером частиц ~30 мкм модель может предсказывать достижение среднего размера ~2-3 мкм через 90 минут работы (при определенных параметрах режима). Эти прогнозы обновляются динамически, давая оператору представление о том, как близок процесс к достижению требуемой тонкости помола. Если выполняется несколько этапов помола (например, серия циклов по 5 минут с перерывами), система отображает прогресс по этапам. Такой функционал выводит цифровой двойник за рамки

простого анимационного тренажера, превращая его в инструмент исследовательского анализа данных помола.

Для оценки точности симуляции была проведена верификация работы цифрового двойника на основе сравнения с известными экспериментальными данными по помолу оксида алюминия. В качестве сравнительных данных использовались результаты лабораторного эксперимента: оксид алюминия измельчался в реальной планетарной мельнице при аналогичных параметрах (размер и материал шаров, скорость вращения, время помола), после чего полученное распределение размеров частиц измерялось методом лазерной дифракции. Сравнение показало, что цифровой двойник достаточно адекватно Например, процесса. воспроизводит динамику экспериментально было установлено снижение среднего размера частиц оксида алюминия с 30 мкм до 2.0 мкм за 90 минут помола, тогда как математическая модель в цифровом двойнике предсказала значение ~2.2 мкм за тот же период.

Расхождение результатов не превышает 10%, что находится в пределах допустимой погрешности для инженерных расчетов. Следует отметить, что качество прогноза напрямую зависит от адекватности самой математической модели измельчения. В настоящей работе использована модель, основанная на принципе минимума производства энтропии, и характеризует зависимость конечного устойчивого размера частиц от параметров измельчения оксида алюминия, поэтому для других материалов потребуется доработка и расширение модели цифрового двойника. Тем не менее, платформа Unreal Engine 5 и реализованные алгоритмы интеграции позволяют относительно легко обновлять модель – например, заменять коэффициенты или даже алгоритм расчета под новую задачу. Кроме того, хорошее соотвествие результатов симуляции с экспериментом показывает, что выбранный подход (комбинация качественной визуализации и достоверной математической модели) жизнеспособен для создания цифровых двойников процессов измельчения.

116

5.3 Комплекс программ расчёта процесса измельчения

На основе математической модели, представленной в четвёртой главе, был создан программный комплекс, включающий в себя ряд стандартизированных программных модулей, обеспечивающих автоматизацию основных этапов анализа и настройки процесса измельчения. Комплекс разработан с целью поддержки научных исследований и инженерных задач в области моделирования и оптимизации процессов измельчения твердых материалов. В состав комплекса входят следующие программные компоненты:

5.3.1 Программный модуль моделирования кинетики процесса измельчения

Назначение данного модуля – реализация численного моделирования кинетики измельчения на основе заданной математической модели. Данный модуль предназначен для расчёта кинетики измельчения порошков, где в качестве стандартных данных используются настройки для оксида алюминия, измельчаемого в планетарной мельнице.

Данный модуль запускается как модуль по умолчанию при запуске программы. Отображаемый интерфейс программы приведён на рисунке 5.4.

Аскодный средний размер ча 34 , 60	астиц, микрон		Deploy
1.58	108.08	Выберите хранилище	
Частройка параметро Тланетарная мельниц	в для: ца,	Планетарная мельница, измельчение Al ₃ O ₃	v
азмельчение Al ₁ O ₁		Конечный соокраеный размер, михрон	
2.09		0.01	10.00
-18 тношение масс шарон к пор 3-00	20.00	Обучение навой мадели	×
.10	29.00	Запустить расчёт	
аспределение дочерних эле	оментов		
Бинарная Бетта	~		
еноменологический коэфф	brigetert		
610,317795	n *		
оэффналент дочерних част	nut.		
0,018086			

Рисунок 5.4 – Экран главной страницы программы

Алгоритм работы:

- Настройка исходных данных (начальное распределение частиц, управляющие параметры, свойства материала) в левой боковой панели интерфейса.
- Настройка ожидаемого размера частиц. Используется для прогнозирования времени получения частиц заданного среднего размера.
- Обучение модели машинного обучения для расчёта мощности на измельчение (опционально).
- Моделирование кинетики изменения плотности числа частиц во времени с использованием математической модели процесса.
- Формирование выходных данных в виде таблиц и графиков, отражающих изменение распределения частиц по размерам, а также дополнительных статистических данных.

В данном программном модуле обучение новой модели машинного обучения для расчёта мощности на измельчение является не обязательным этапом, если измельчение будет рассчитываться для оксида алюминия, измельчаемого в планетарной мельнице упомянутой в 2-ой главе.

В случае если условия измельчения отличаются, в подразделе «Обучение новой модели» можно указать набор данных, представленных в файле формата «.csv», где в качестве колонок будут использоваться управляющие параметры измельчения, например размер шаров и соотношение масс, таких колонок должно быть минимум одна. Необходимо также наличие колонки, описывающей конечный средний размер частиц устойчивых к дроблению. Интерфейс подмодуля представлен на рисунке 5.5.

Эбучения н	canai e	actinua		^
Рег	pe	ecci	юнные модели для оценки	удельной мощности
Загрузите	CSV (baiincд	нными, Обязательно должна быть колонка d – конечный размер. Остальные	колонки используются как входные признаки.
выберите С	SV фa	ñn		
	Drag a	ind drop	lle here He - Clie	Browse files
D	energ	y.csv 51.		×
Загру	же	нный	набор данных:	
16	stor.	muther.	#)	
	- 22		3.424	
			201	
1	i	5	1.031	
Повержност	n-an a	epres		
3,00				100.0
Плотность	000	90		
1.00	•			50000.0
Призи	21/14	0.000	билоние	
- /	ann	ALL O	oy terma.	
0 1 "	she	p. 11.		
1 3 18	sha	e. 11		
1				

Рисунок 5.5 – Экран обучения моделей ML

После загрузки набора данных и запуска процесс обучения, программа предоставит результаты обучения различных моделей, для анализа и выбора пользователем наиболее подходящей модели. Оценка модели осуществляется не только исходя из точности обучения модели, но также посредством оценки графиков зависимости предсказываемого размера частиц устойчивых к дроблению. Отображение примера результата обучения моделей машинного обучения представлено на рисунке 5.6.

Nodel		12.9	pi Mit							
Ung	pastor	0.99	17 545,000,066,35	4,990.06						
100		-0.03	H 5941250200	SELM						
landur	d conthing on	0.90	49 5,599,645,824	010,586,						
thingh	bostingianur		a samilezcirie	10070						
Decisla	chieftigetour		1							
butter	duanghan	-	1 41,526.	TTT 831.2						
MLPRe	е модель для в груспал	нэүлтнээци								
MLPRe	e wogens gan a sgrees of	9787913849 978								
ибернії МЕРЯм одель	e waterte are e igressor MLPRegressi	н эреннаци ок: точност	» ъ по d — Я ² = 93.1	19%, MSE = 0.0250	e.					
иберни МLРВе одель 1ета	е мадель для в •gressor •MLPRogress • ХЛЬНЫС	н уленаци от точнос Предс	» »nod — Я ⁴ = 533 Казания:	99%, MSE = 0.0250	e.					
иберин MLPRe одель Lета	е мадель для в sgressor MLPRegresso АЛЬНЫЕ	нултезци от точнос предс	ыпоd — № = 933 Казания:	95%, MSE = 0.0259						
ибедини МШРЯХи оджињ Цета	e waante ante e rgressor MLPRegresso AJTEHEIE Laduer (w., d	нулансаци ок: точнос: предс	и по d — R ² = 933 Казания: ни	99%, MSE = 0.0250 -19%, predkted	e, predicted	ang pend				
ogene MLPRe ogene Jera	e waans an e spressor MLPRogresse ATABHBIE A date oo d S	науалезаци от точнос предс и а з 3.424	и и по d — R ² = 93.5 Казания: им 105.576.846.6403	95%, MSE = 0.0250 198, predicted 188, see, 344, 1716	e gandatad 3.1703	ung pesart 14127				
MLPRe MLPRe logens leta	e wagens gen a rgressor MLPRogresso AABHBB A.dus w.d S S	атранезци ат точност предс а 3.3426 5.2377	н на по d — H ² = 933 казания: 105.576,846,6463 221,646,946	49%, MSE = 0.0259 +ps, positions 148,608,344,1716 148,608,344,1716	0 (2004154) 3.1702	arta: petael 54127 6485				
MLPRe Nogens Jeta 0 1	e wagens gen i rgressor MLPRogresso AABHBIE A.duk w.d S S S 3	атранезар от точнос предс ал а 3 3.434 5 2.977 3 2.043	н на по d — H ² = 933 казания: 105,574,846,6483 221,641,648,946 946,721,729,7287	HSYN, MSE = 0.0259 +px, predicted 148,608,344,1716 148,608,344,1716 967,721,721,4888	4,200dx3ad 3.1703 3.1702 3.1702 3.043	ange_petanti 7.4127 8.6855 0.0000005				

Рисунок 5.6 – Экран отображения результатов обучения моделей ML

Обученные модели будут доступны в дальнейшем, в течении одной пользовательской сессии, в выпадающем меню главного раздела программы.

5.3.2 Программный модуль поиска коэффициентов математической модели

Назначение этого модуля, это автоматизированный подбор коэффициентов L и P для математической модели кинетики измельчения по данным, полученным в ходе экспериментальных исследований. Программа использует алгоритм градиентного спуска, для поиска экстремума функции разности расчётных и экспериментальных данных. Модуль доступен в разделе "*ResolverModule*".

Алгоритм работы:

- Импорт набора данных об управляющих параметрах и соответственным размером частиц.
- Определение формы распределения дочерних частиц. Требуется для более точного предсказания поведения функции плотности распределения частиц.
- Определение стартовых значений коэффициентов L и P, а также границ поиска.
- Вывод прогресса обучения на всех этапах расчёта, и конечный вывод полученных коэффициентов с оценкой точности аппроксимации.
 Интерфейс программы подбора коэффициентов представлен на рисунке 5.7.

	H. PUTTER Bag Degley
Propagation and an entering	
Generation Derro	*
(Tartiste Jaining).	
610,317796	
Management (minimum)	
4,00000	- •
🖂 Побрать наномасниот экономет.	
b (approximate province on g	
0,019098	- +
annear ann ann an a	
8,00000	
🗋 Лыбрать навланальние именные р	
🖂 Илтреккоодть кооффециент п	
B Испальзовать жил. длянае с распределична	
	Participationen gangene interente Selegipationen gangene interente statutionen gangene interente Selegipationen gangene interente

Рисунок 5.7 – Экран поиска коэффициентов математической модели кинетики процесса измельчения

5.3.3 Программный модуль настройки хранилища параметров математической модели

Модуль предназначен для настройки системы – создания и редактирования окружения, которое связывает управляющие параметры измельчения с системой. Основная роль данного модуля, это настройка спецификации работы программного модуля для расширения перечня моделируемых мелющих устройств.

Функции модуля:

- Инициализация структуры хранилища (тип модели, материал, параметры оборудования, и т.д.).
- Возможность импорта и экспорта данных в формате *pkl*.
- Интерфейс для редактирования параметров.
- Автоматическая синхронизация параметров между модулями комплекса.
- Обеспечение версионности данных для возможности воспроизведения предыдущих расчётов.

Интерфейс программы при выбранном стандартном хранилище для планетарной мельницы и оксида алюминия представлен на рисунке 5.8. Данное окружение создаётся автоматически даже после полного удаления всех кешданных. В интерфейсе отображен первый параметр настроенного окружения, который характеризует размер мелющих шаров, и настройки для этого параметра, такие как:

- Стандартное значение параметра
- Минимальное и максимальное значение параметра
- Размерность параметра
- Имя колонки соответствующего параметра из загружаемого набора данных

	he advances constructions	Cepiny
NaioModule	Promovement and a second second and the second	141
Console	contract of home acceleration's whether courses with a 2	
AultyParamoOptimization	Редактирование хранилища: Планетарная мельница,	
1pelinerModule	измельчение Al ₂ O ₃	
lesniverModule	Параметр 1:	
torageSetup	Designers were implaater pa 1	
	Размер мелющих шоров	
	Begginte www.exploredw.l	
	r_shie	
	Пендите дафолтное значение 1	
	- 2,00 -	+
	Выздати илинимальное ананение 1	
	0.10 -	+
	Stighte agricationation and environment	
	- 20,06 -	+
	Виндите ндининду измирения 1	
	deer .	
	Сохранить парамитр 1	

Рисунок 5.8 – Экран настройки хранилища

Таким образом, программный комплекс представляет собой модульную, масштабируемую и адаптируемую систему, обеспечивающую полный цикл математического и вычислительного сопровождения исследований по кинетике процесса измельчения.

5.4 Создание методики образовательного лабораторного практикума для измельчения в планетарной мельнице

Разработанный цифровой двойник планетарной мельницы был использован при создании учебного лабораторного практикума, предназначенного для подготовки студентов и персонала в области процессов измельчения. Цель данного практикума – ознакомить обучающихся с работой планетарной шаровой мельницы, факторами, влияющими на эффективность измельчения, а также отработать навыки безопасной эксплуатации оборудования. Цифровой двойник предоставил возможность перенести реальный лабораторный эксперимент в виртуальную среду без потери наглядности и реалистичности. Методика практикума построена таким образом, что обучаемый взаимодействует с виртуальной мельницей так же, как он бы делал это в физической лаборатории: загружает материал, задаёт режимы, запускает процесс и наблюдает за его ходом, а затем анализирует полученные данные. Применение цифрового двойника в обучении имеет ряд преимуществ. Во-первых, существенно повышается безопасность обучения – все действия происходят в виртуальной реальности, где исключены какие-либо риски (например, травмы от неправильно закрепленного оборудования или повреждение дорогостоящей мельницы при ошибочных действиях). Как отмечается в исследованиях, цифровые двойники позволяют безопасно отрабатывать навыки в ситуациях, трудно воспроизводимых или рискованных в реальном мире [109]. Во-вторых, VR-практикум обеспечивает эффект присутствия и «обучение через действие»: студенты не пассивно наблюдают, а непосредственно выполняют эксперимент, что соответствует современным подходам в образовании, делающим упор на практическое освоение материала. Иммерсивная среда с обратной связью (визуальной, звуковой, тактильной через VR-контроллеры) способствует лучшему усвоению принципов работы мельницы и пониманию взаимосвязи между параметрами процесса и его результатами.

В рамках разработанной методики предусмотрены различные обучающие сценарии, демонстрирующие как стандартные режимы работы, так и нештатные

ситуации, с которыми столкнуться оператор измельчительного может оборудования. Одним из ключевых сценариев является сценарий износа. В цифровом двойнике реализована возможность моделировать накопление износа: по мере «виртуального старения» оборудования пользователь может наблюдать, как изменяется характер работы мельницы. Например, в учебном режиме можно последовательно запустить серию помолов, эквивалентную нескольким месяцам эксплуатации, после чего в модели изменяется режим отображения внутренних элементов мельницы с зелёного на красный в зависимости от уровня износа. Система зафиксирует факт длительного использования оборудования И запускается аварийный сценарий, сопровождающийся звуковыми и визуальными эффектами (рисунок 5.3). Таким образом, студентам демонстрируется влияние износа на процесс и подчеркивается необходимость контроля состояния оборудования. Подобный подход соответствует промышленным приложениям цифровых двойников, где на основе вычислительных моделей оценивается степень износа и прогнозируется остаточный ресурс мельницы [110]. В обучающем контексте это позволяет сформировать у персонала навыки своевременного распознавания признаков износа и принятия решений о техническом обслуживании или замене расходных элементов.

Все сценарии практикума сопровождаются методическими указаниями и критериями оценки действий обучаемого. Цифровой двойник позволяет фиксировать, какие параметры были выставлены, сколько времени занял помол, достигнуты ли целевые показатели. На основе этой информации система или преподаватель могут дать обратную связь студенту, указать на ошибки (например, «слишком высокая скорость – произошла имитация аварийной остановки», или «не достигнута требуемая дисперсность – вероятно, из-за недостаточного времени помола»). Таким образом, виртуальный практикум не только обучает, но и контролирует знания и умения. Похожий подход «обучения через пробование и ошибки» с цифровым двойником соответствует концепции продуктивного провала, которая, как показали исследования, способствует более глубокому

пониманию, когда обучаемый может в безопасной среде совершать ошибки и учиться на них [109].

Внедрение цифрового двойника планетарной мельницы в образовательный расширяет возможности преподавания дисциплин, процесс связанных С механикой дробления. Теперь даже при ограниченном доступе к реальному оборудованию студенты могут выполнить полный цикл эксперимента виртуально. Более того, они могут многократно повторять опыты с разными параметрами, что часто невозможно в условиях учебной лаборатории из-за ограничения времени или ресурсов. Виртуальная среда позволяет смоделировать разнообразные условия, вплоть до экстремальных, и пронаблюдать отклик системы на них [110]. Это готовит специалистов более всесторонне: они заранее знакомятся с поведением мельницы в широком диапазоне ситуаций и лучше понимают принципы ее работы. В целом, методика VR-лабораторного практикума на основе цифрового двойника получила положительные отклики: отмечается высокий уровень вовлеченности студентов, улучшение показателей усвоения материала и развитие практических навыков работы с оборудованием. Данный подход может быть рекомендован для тиражирования и на другие виды технологического оборудования, используемого в учебном процессе.

5.5 Выводы по главе 5

В данной главе описана разработка и применение цифрового двойника процессов измельчения в планетарной шаровой мельнице. Были обоснованы выбранные методы и инструменты: использование игрового движка Unreal Engine 5 в сочетании с технологией виртуальной реальности позволило создать реалистичную и интерактивную модель лабораторной мельницы. Проведена интеграция математической модели расчёта размера частиц непосредственно в VR-среду, благодаря чему цифровой двойник не только визуализирует работу оборудования, но и рассчитывает ключевые параметры процесса в реальном времени. На примере измельчения оксида алюминия продемонстрировано построение цифрового двойника: модель воспроизводит процесс измельчения в планетарной мельнице, процесс загрузки, запуск и ход помола, а также предоставляет пользовательский интерфейс для наблюдения за экспериментом. Результаты реализации показали, что цифровой двойник способен достоверно имитировать процесс измельчения – прогноз конечного размера частиц с приемлемой точностью по сравнению с экспериментальными данными. Таким образом, подтверждена работоспособность принятого подхода к моделированию.

Важным итогом разработки стало создание методики учебного практикума с использованием цифрового двойника. Показано, что виртуальный тренажер планетарной мельницы может эффективно применяться для обучения персонала и правилам эксплуатации тонкостям процесса студентов И измельчения. Разработанные обучающие сценарии (типовые режимы, износ оборудования, нештатные ситуации) демонстрируют, что цифровой двойник способен не только отразить нормальную работу системы, но и помочь отработать действия в различных случаях, включая аварийные. Преимущество VR-двойника в контексте образования состоит в обеспечении полного контроля над условиями и безопасностью проведения эксперимента, а также в возможности многократного повторения и варьирования параметров без дополнительных затрат.

Таким образом, в рамках главы 5 решены поставленные задачи по созданию цифрового двойника процесса помола в планетарной мельнице и разработке на его основе образовательного практикума. Полученный цифровой двойник объединяет в себе функции симулятора технологического процесса и обучающей системы. Его применение в учебном процессе позволяет повысить наглядность и эффективность обучения, а в перспективе подобные цифровые двойники могут быть интегрированы и в производственную сферу для поддержки операторов (например, для отладки режимов работы, прогнозирования обслуживания). Разработанный цифровой двойник планетарной мельницы является успешным примером реализации концепции Industry 4.0 в образовании, сочетая физикоматематическое моделирование и современные информационные технологии для решения как исследовательских, так и педагогических задач.

126

Заключение

1. Проведённые в планетарной мельнице экспериментальные исследования по измельчению частиц Al₂O₃, 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 интегродифференциального уравнения баланса числа частиц, аппроксимирующие данные уравнения со вторым порядком по времени и размеру.

6. Создано программное обеспечение для моделирования процесса дробления.

7. Определены оптимальные условия проведения процесса дробления частиц Al₂O₃ в планетарной мельнице для получения частиц со средними размерами в диаметре [1,2-2,0 мкм], обеспечивающие высокие физикомеханические свойства керамоматричных композитов на основе Al₂O₃.

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.

В результате проведённого исследования удалось создать комплексный инструмент, объединяющий математическое моделирование, экспериментальные данные и цифровой двойник технологического оборудования. Данная работа не только расширяет теоретические представления о процессах измельчения, но и имеет высокую практическую ценность для оптимизации и обучения в производственных процессах.

Результаты исследований могут быть внедрены в российское производство керамоматричных композитов, а также в различные отрасли горнодобывающей промышленности.

Список сокращений и условных обозначений

Al₂O₃ – Оксид алюминия

ZrO₂ – Диоксид циркония

ПАВ – Поверхностно-активное вещество

DEM – Discrete Element Method (метод дискретных элементов)

VR – Virtual Reality (виртуальная реальность)

ML – Machine Learning (машинное обучение)

MSE – Mean Squared Error (среднеквадратичная ошибка)

R² – Коэффициент детерминации

QMOM – Quadrature Method of Moments (метод квадратур для моментов)

DQMOM – Direct Quadrature Method of Moments (прямой метод квадратур моментов)

UE5 – Unreal Engine 5

Список литературы

1 Кафаров В. В. Методы кибернетики в химии и химической технологии. М.: Химия, 1985. – 486 с.

2 Дробилки: энциклопедия современной техники. Строительство. Том 1 / отв. ред. Г. А. Караваев. М.: Советская энциклопедия, 1964. – 482 с.

3 Кольцова Э. М., Бабкин М. А., Попова Н. А., Женса А. В. Математическое моделирование процесса измельчения материалов // Теоретические основы химической технологии. 2024. Т. 58, № 1. С. 115–121.

4 Шанева А. С. Исследование, моделирование и оптимизация процессов получения нанокомпозитов на основе бескислородных и кислородных матриц: дис. ... канд. техн. наук. – М.: РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2023. – 228 с.

5 Mavhungu E., Campos T. M., Karolyne B. и др. Simulating large-diameter industrial ball mills from batch-grinding tests // Minerals Engineering. 2024. Vol. 206. P. 108505.

6 Carvalho R. M. и др. Predicting the effect of operating and design variables on breakage rates using the mechanistic ball mill model // Minerals Engineering. 2013. Vol. 43–44. Pp. 91–101.

7 Carvalho R. M., Campos T. M., Faria P. M., Tavares L. M. Mechanistic modeling and simulation of grinding iron ore pellet feed in pilot and industrial-scale ball mills // Powder Technology. 2021. Vol. 392. Pp. 489–502.

8 Austin L. G., Julianelli K., de Souza A. S., Schneider C. L. Simulation of wet ball milling of iron ore at Carajás, Brazil // Int. J. Miner. Process. 2007. Vol. 84. Pp. 157–171.

9 Austin L. G., Klimpel R. R., Luckie P. T. Process Engineering of Size Reduction: Ball Milling. New York: SME, 2021.

10 Faria P. M., Rajamani R. K., Tavares L. M. Optimization of solids concentration in iron ore ball milling through modeling and simulation // Minerals. 2019. Vol. 9. P. 366.

11 Truee M., Aman S., Aman P. и др. Measurement and evaluation of the grinding bodies' motions in a vibratory disc mill filled with viscous fluids // Advanced Powder Technology. 2020. Vol. 31. Pp. 4376–4389.

12 Aman S., Aman A., Hintz W., Truee M., Veit P., Hirsch S. The exfoliation of graphite particles in the vibratory disk mill // Chem. Ing. Tech. 2017. Vol. 89, No. 9. Pp. 1185–1191.

13 Du Y., Wu X. Experimental study on superfine grind process for the preparation of calcium carbonate particles via vibrated mill // Proc. Eng. 2015. Vol. 102. Pp. 424–434.

14 Plescia P., Tempesta E. Analysis of friction coefficients in a vibrating cup mill (ring mill) during grinding // Tribol. Int. 2017. Vol. 114. Pp. 458–468.

15 Truee M., Aman S., Mueller P., Hintz W., Hirsch S. Herstellung von mehrschichtigem Graphen in einer Scheibenschwingmühle (Production of multilayer graphene in a vibratory disk mill) // Chem. Ing. Tech. 2018. Vol. 90, No. 4. Pp. 533–539.

16 Drechsler M., Skinner W. Commercialisation pathway for low energy wet/dry gyratory rolls crusher comminution technology // Minerals Engineering. 2023. Vol. 204. P. 108419.

17 Katzmarzyk J., Silin I., Hahn K., Wotruba H., Gerold C., Stapelmann M. Investigation on flotation behaviour of a copper sulphide ore after dry grinding by Loesche Vertical Roller Mill // Annual Conference of Metallurgists. 2019. Vol. 58.

18 Gerold C., Schmitz S., Stapelmann M., Dardemann F. Recent installations and developments of Loesche vertical-roller-mills in the ore industry // Proc. 26th International Mineral Processing Congress. New Delhi, India, 2012.

19 Pareek P., Sankhla V. S. Review on vertical roller mill in cement industry and its performance parameters // Materials Today: Proceedings. 2021. Vol. 44, No. 6. Pp. 4621–4627.

20 Hailiang H., Yiming L., Biaobiao L., Zhuanghu J., Guiqiu S. Influence of different ash bucket structure on classification performance of the vertical roller mill // School of Mechanical & Engineering report. 2023. P. 35.

21 Chw P., Mailapalli D. Modeling the particle size of nanomaterials synthesized in a planetary ball mill // OpenNano. 2023. Vol. 14. P. 100191.

22 Paul K. T., Satpathy S. K., Manna I., Chakraborty K. K., Nando G. B. Preparation and characterization of nanostructured materials from fly ash: a waste from thermal power stations, by high energy ball milling // Nanoscale Res. Lett. 2007. Vol. 2. Pp. 397–404.

23 Panda D., Kumar E. A. Surface modification of zeolite 4A molecular sieve by planetary ball milling // Materials Today: Proceedings. 2017. Vol. 4. Pp. 395–404.

24 Piras P. Ball milling: a green technology for the preparation and functionalisation of nanocellulose derivatives // Nanoscale Advances. 2019. Vol. 1. Pp. 937–947.

25 Pohshna C., Mailapalli D. R., Laha T. Synthesis of nanofertilizers by planetary ball milling // Sustainable Agriculture Reviews. 2020. Pp.75–112.

26 Raghavendra G., Raghavendraa G., Ojhab S., Acharyab S. K., Palc S. K. Fabrication and characterization of nano fly ash by planetary ball milling // Journal of International Innovative Materials, Systems and Structures. 2014. Vol. 2. Pp. 59–68.

27 Rajak D. K., Raj A., Guria C., Pathak A. K. Grinding of Class-F fly ash using planetary ball mill: a simulation study to determine the breakage kinetics by direct- and back-calculation method // South African Journal of Chemical Engineering. 2017. Vol. 24. Pp. 135–147.

28 Lee G. J., Park E. K., Yang S. A., Park J. J., Bu S. D., Lee M. K. Rapid and direct synthesis of complex perovskite oxides through a highly energetic planetary milling // Scientific Reports. 2017. Vol. 7. P. 46241.

29 Gul A., Papia E., Naimi-Akbar A., Ruud A., von Steyern P. V. Zirconia dental implants: the relationship between design and clinical outcome: a systematic review // Journal of Dentistry. 2024. Vol.143. P.104903.

30 Borbás B., Ádám P., László N., Temesi O., Vida Á., Nagy B. Effect of binder's size and chemistry on pure aluminium-oxide vacuum formed ceramic fibre boards // Open Ceramics. 2024. Vol. 17. P. 100553.

31 Varga M., Grundtner R., Maj M., Tatzgern F., Alessio K.-O. Impact-abrasive wear resistance of high alumina ceramics and ZTA // Wear. 2023. Vol. 522. P. 204700.

32 Li M., Li P., Gao Q., Li S., Chen R., Wen H., Li C. Fly ash coated with alumina sol for improving strength and thermal insulation of mullite porous ceramics // Construction and Building Materials. 2024. Vol. 416. P. 135013.

33 Sathish T., Sabarirajan N., Saravanan R. Nano-alumina reinforcement on AA 8079 acquired from waste aluminium food containers for altering microhardness and wear resistance // Journal of Materials Research and Technology. 2021. Vol. 14. Pp. 1494–1503.

34 G. Suárez-Campos G., Cabrera-Germán D., Castelo-González A. O., Avila-Avendaño C., Fuentes Ríos J. L., Quevedo-López M. A., Aceves R., Hu H., Sotelo-Lerma M. Characterization of aluminum oxide thin films obtained by chemical solution deposition and annealing for metal–insulator–metal dielectric capacitor applications // Applied Surface Science. 2020. Vol. 513. P. 145879.

35 Mohammadi M. R. Semiconductor TiO₂–Al₂O₃ thin film gas sensors derived from aqueous particulate sol–gel process // Materials Science in Semiconductor Processing. 2014. Vol. 27. Pp. 711–718.

36 Badar N., Mohd Yusoff H., Elong K., Kamarulzaman N. Crystallite size reduction of Cr-doped Al₂O₃ materials via optimized high-energy ball milling method // Advanced Powder Technology. 2023. Vol. 34, No. 8. P. 104102.

37 Бабкин М. А., Попова Н. А., Кольцова Э. М. Моделирование кинетики процесса измельчения оксида алюминия // Успехи в химии и химической технологии. 2019. Т. 33, № 11 (221). С. 18–19.

38 Müller L., Klar A., Schneider F. A numerical comparison of the method of moments for the population balance equation // Mathematics and Computers in Simulation. 2019. Vol. 165. Pp. 26–55.

39 Ramkrishna D. Population balances: theory and applications to particulate systems in engineering. San Diego: Academic Press, 2000.

40 Coulaloglou C., Tavlarides L. Description of interaction process in agitated liquid–liquid dispersions // Chemical Engineering Science. 1977. Vol. 32. Pp. 1289– 1297.

41 Hill P., Ng K. Statistics of multiple particle breakage // AIChE Journal. 1966. Vol. 42, No. 6. Pp. 1600–1608.

42 Rosales-Marín G., Andrade J., Alvarado G., Delgadillo J. A., Tuzcu E. T. Study of lifter wear and breakage rates for different lifter geometries in tumbling mill: experimental and simulation analysis using population balance model // Minerals Engineering. 2019. Vol. 141. P. 105857.

43 Bhattacharyya A., Tuzcu E. T., Rajamani R. Experimental study on nonlinear behavior of breakage rates due to fines generation in wet batch milling // Minerals Engineering. 2016. Vol. 99. Pp. 19–29.

44 Liné A., Frances C. Discussion on DQMOM to solve a bivariate population balance equation applied to a grinding process // Powder Technology. 2016. Vol. 295. Pp. 234–244

45 Frances C., Liné A. Comminution process modeling based on the monovariate and bivariate direct quadrature method of moments // AIChE Journal. 2014. Vol. 60. Pp. 1621–1631.

46 Мешалкин В. П., Флисюк О. М., Марцулевич Н. А., Гарабаджиу А. В. Теоретико-экспериментальный анализ изменения дисперсного состава частиц твердой фазы в технологических аппаратах // Доклады Российской академии наук. Серия «Химия, науки о материалах». 2021. Т. 501, № 1. С. 32–36.

47 Флисюк О. М., Марцулевич Н. А. Истирание частиц в аппаратах взвешенного слоя // Журнал прикладной химии. 2020. Т. 93, № 10. С. 1468–1473.

48 Bazin C. Data reconciliation for the calibration of a model for batch grinding // Minerals Engineering. 2005. Vol. 18. Pp. 1052–1056.

49 Pieper M., Kutelova Z., Aman S., Tomas J. Modeling of baryte batch grinding in a vibratory disc mill // Advanced Powder Technology. 2013. Vol. 24. Pp. 229–234. 50 Hasan M., Palaniandy S., Hilden M., Powell M. Simulating product size distribution of an industrial scale VertiMill® using a time-based population balance model // Minerals Engineering. 2018. Vol. 127. Pp. 312–317.

51 Hasan M., Palaniandy S., Hilden M., Powell M. Calculating breakage parameters of a batch vertical stirred mill // Minerals Engineering. 2017. Vol. 111. Pp. 229–237.

52 Xiaoli W., Weihua G., Chunhua Y., Yalin W. Wet grindability of an industrial ore and its breakage parameters estimation using population balances // International Journal of Mineral Processing. 2011. Vol. 98. Pp. 113–117.

53 Wang X., Wang Y., Yang C., Xu D., Gui W. Hybrid modeling of an industrial grinding-classification process // Powder Technology. 2015. Vol. 279. Pp. 75–85.

54 Mazzinghy D. B., Galéry R., Schneider C. L., Alves V. K. Scale up and simulation of VertiMill[™] pilot test operated with copper ore // Journal of Materials Research and Technology. 2014. Vol. 3. Pp. 86–89.

55 Mazzinghy D. B., Russo J. F. C. VertiMill[™] pilot scale tests simulated by perfect mixing model // Journal of Materials Research and Technology. 2014. Vol. 3. Pp. 217–221.

56 Mazzinghy D. B., Schneider C. L., Alves V. K., Galéry R. Vertical agitated media mill scale-up and simulation // Minerals Engineering. 2015. Vol. 73. Pp. 69–76.

57 Mazzinghy D. B., Schneider C. L., Alves V. K., Galéry R. Vertical mill simulation applied to iron ores // Minerals Engineering. 2015. Vol. 4. Pp. 186–190.

58 Lee H., Cho H., Kwon J. Using the discrete element method to analyze the breakage rate in a centrifugal/vibration mill // Powder Technology. 2010. Vol. 198, No. 3. Pp. 364–372.

59 Hsia M. A., Tavlarides L. L. Simulation analysis of drop breakage, coalescence and micromixing in liquid–liquid stirred tanks // Chemical Engineering Journal. 1983. Vol. 26, No. 3. Pp. 189–199.

60 Laakkonen M., Alopaeus V., Aittamaa J. Validation of bubble breakage, coalescence and mass transfer models for gas–liquid dispersion in agitated vessel // Chemical Engineering Science. 2006. Vol. 61. Pp. 218–228.

61 ANSYS Fluent 12.0 Population Balance Module Manual: Particle birth and death due to breakage and aggregation [Электронный ресурс] // URL: https://www.afs.enea.it/project/neptunius/docs/fluent/html/popbal/node16.htm (дата обращения: 03.02.2024).

62 Moreno-Atanasio R., Ghadiri M. Mechanistic analysis and computer simulation of impact breakage of agglomerates: effect of surface energy // Chemical Engineering Science. 2006. Vol. 36. Pp. 2476–2481.

63 Rumpf H. The strength of granules and agglomerates // Agglomeration: Proceedings of the First International Symposium on Agglomeration / Ed. W. A. Knepper. Philadelphia: Proceedings Office, 1962. Pp. 379–418.

64 Kendall K. J. Agglomerate strength // Powder Metallurgy. 1988. Vol. 31. Pp. 28–31.

65 Subero J. Impact breakage of agglomerates. Ph.D. Dissertation. University of Surrey, Guildford, UK, 2001.

66 Kafui K. D., Thornton C. Computer simulated impact of agglomerate // Powders & Grains. 1993. Vol. 93. Pp. 401–406.

67 Israelachvili J. N. Intermolecular and surface forces. London: Academic Press, 1985. – 706 p.

68 Subero J., Ning Z., Ghadiri M., Thornton C. Effect of interface energy on the impact strength of agglomerates // Powder Technology. 1999. Vol. 105. Pp. 66–73.

69 Thornton C., Yin K. K., Adams M. J. Numerical simulation of the impact fracture and fragmentation of agglomerates // Journal of Physics D: Applied Physics. 1996. Vol. 29. Pp. 425–435.

70 Moreno R., Ghadiri M. Computer simulation analysis of the effect of bond strength on the breakage pattern of agglomerates // PARTEC. 2004. Vol. 3. Pp. 1–5.

71 Reid N., Shah I. The role of laboratory work in university chemistry // Chemistry Education Research and Practice. 2007. Vol. 8, No. 2. Pp. 172–185.

72 Seery M. K. Establishing the laboratory as the place to learn how to do chemistry // Journal of Chemical Education. 2020. Vol. 97, No. 6. Pp. 1511–1514.

73 Каримова Б. Е., Хамзина Ш. Ш., Жумабекова Б. К. Новые возможности оптимизации учебного процесса по биологии с применением виртуальных лабораторий // Вестник Торайгыров университета. Педагогическая серия. 2023. № 1. С. 12–25.

74 Bretz Bretz S. L. Evidence for the importance of laboratory courses // Journal of Chemical Education. 2019. Vol. 96, No. 2. Pp. 193–195.

75 Jones N. Simulated labs are booming // Nature. 2018. Vol. 562, No. 7725. Pp. S5–S7.

76 H. Kim, Kim H., Nah S., Oh J., Ryu H. VR-MOOCs: a learning management system for VR education // IEEE Conference on Virtual Reality and 3D User Interfaces. 2019. Pp.1325–1326.

77 Han J., Tian Y., Song W., Fong S. An implementation of VR chemistry experiment system // Proceedings of the ACM International Conference Proceeding Series. 2017. Pp. 205–208.

78 Ali N., Ullah S. Review to analyze and compare virtual chemistry laboratories for their use in education // Journal of Chemical Education. 2020. Vol. 97, No. 10. Pp. 3563–3574.

79 Alkhaldi T., Pranata I., Athauda R. I. A review of contemporary virtual and remote laboratory implementations: observations and findings // Journal of Computers in Education. 2016. Vol. 3, No. 3. Pp. 329–351.

80 Faulconer E. K., Gruss A. B. A review to weigh the pros and cons of online, remote, and distance science laboratory experiences // International Review of Research in Open and Distributed Learning. 2018. Vol. 19, No. 2. Pp. 155–168.

81 Lynch T., Ghergulescu I. Review of virtual labs as the emerging technologies for teaching STEM subjects // Proceedings of the INTED Conference. 2017. Vol. 1. Pp. 6082–6091.

82 Mikropoulos T. A., Natsis A. Educational virtual environments: a ten-year review of empirical research (1999–2009) // Computers & Education. 2011. Vol. 56, No. 3. Pp. 769–780.

83 Makransky G., Terkildsen T. S., Mayer R. E. Adding immersive virtual reality to a science lab simulation causes more presence but less learning // Learning and Instruction. 2019. Vol. 60. Pp. 225–236.

84 Mayer R. E., Mayer R. The Cambridge Handbook of Multimedia Learning. Cambridge: Cambridge University Press, 2022.

85 Brinson J. R. Learning outcome achievement in non-traditional (virtual and remote) versus traditional (hands-on) laboratories: a review of the empirical research // Computers & Education. 2015. Vol. 87. Pp. 218–237.

86 Ma J., Nickerson J. V. Hands-on, simulated, and remote laboratories: a comparative literature review // ACM Computing Surveys. 2006. Vol. 38, No. 3. P. 1.

87 Bellou I., Papachristos N. M., Mikropoulos T. A., Sampson D., Ifenthaler D., Spector J. M. и др. Digital technologies: sustainable innovations for improving teaching and learning. Cham: Springer International Publishing, 2018. Pp. 57–80.

88 Sypsas A., Kalles D., Karanikolas N. N., Mamalis B. Virtual laboratories in biology, biotechnology and chemistry education: a literature review // Proceedings of the ACM International Conference Proceeding Series. New York: Association for Computing Machinery, 2018. Pp. 70–75.

89 Tatli Z., Ayas A., Keser H., Ozcinar Z., Kanbul S. Virtual laboratory applications in chemistry education // Procedia – Social and Behavioral Sciences. 2010. Vol. 9. Pp. 938–942.

90 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. Pp. 207–211.

91 Кафаров В. В., Дорохов И. Н., Кольцова Э. М. Системный анализ процессов химической технологии: процессы массовой кристаллизации из растворов и газовой фазы. М.: Наука, 1983. – 368 с.

92 Нигматулин Р.И. Основы механики гетерогенных сред. М.: Наука, 1978. –336 с.

93 Седов Л. И. Механика сплошной среды. В 2 т. Т. 1. М.: Наука, 1970. – 535 с.; Т. 2. М.: Наука, 1970. – 573 с.

94 Дерягин Б.В., Кротова Н.А., Смилга В.П. Адгезия твёрдых тел. М.: Наука, 1973. 279 с.

95 Пригожин И. Р. От существующего к возникающему. М.: КомКнига, 2006. – 327 с.

96 Арутюнов С. Ю. Моделирование и оптимизация процесса измельчения зернистых материалов (на примере получения эффективных хроматографических сорбентов): дис. ... канд. техн. наук. М.: МХТИ им. Д. И. Менделеева, 1982. – 188 с.

97 Кольцова Э. М., Гордеев Л. С. Методы синергетики в химии и химической технологии. М.: Химия, 1999. – 253 с.

98 Бабкин М. А., Валеева О. В. Применение математической модели кинетики процесса измельчения в цифровом двойнике планетарной мельницы // Актуальные вопросы современной науки и образования: сб. ст. XXXVI Междунар. науч.-практ. конф. (Пенза, 15 марта 2024 г.). Пенза: Наука и просвещение, 2024. С. 11–16.

99 Левич В. Г. Физико-химическая гидродинамика. 2-е изд. М.: Физматлит, 1959. – 453 с.

100 Колмогоров А. Н. К логике приближённых вычислений // Докл. АН СССР. 1949. Т. 66, № 5. С. 825–832.

101 Кольцова Э. М., Бабкин М. А., Женса А. В. Определение параметров модели для поиска диаметра частиц, устойчивых к дроблению // Вестник Международной академии системных исследований. Информатика, экология, экономика. 2022. № 24. С. 100–104.

102 Гельфранд Б. Е., Губин С. А., Нигматулин Р. И. О законе распределения капель в турбулентной струе // Докл. АН СССР. 1977. Т. 235, № 2. С. 292–294.

103 Губайдулин А. А., Ивандаев А. И., Нигматулин Р. И., Хабеев Н. С. Волны и жидкости с пузырьками // Итоги науки и техники. Сер. Механика жидкости и пара. М.: ВИНИТИ, 1982. Т. 17. С. 160–249.

104 Бабкин М. А., Терехова Ю. В., Попова Н. А., Кольцова Э. М. Разработка кинетической модели процесса дробления в планетарной мельнице // Успехи в химии и химической технологии. 2018. Т. 32, № 11 (207). С. 78–80.

105 Burmeister C. Dry grinding in planetary ball mills: evaluation of a stressing model // Journal of the Society of Powder Technology, Japan. 2017. Vol. 29. Pp. 191–201.

106 Murthy B. V., Auradi V., Nagaral M. и др. Al2014–alumina aerospace composites: particle size impacts on microstructure, mechanical, fractography, and wear characteristics // ACS Omega. 2023. Vol. 8, No. 14. Pp. 13444–13455.

107 Xu Z., Zhang C., Xu Z., Zhang C., Li Y. и др. Effect of the alumina microparticle sizes on the thermal conductivity and dynamic mechanical property of epoxy resin // PLOS ONE. 2023. Vol. 18, No. 10. P. 292878.

108 Digital twins in Unreal Engine [Электронный ресурс]. URL: https://program-ace.com/blog/unreal-engine-digital-twins/ (дата обращения: 20.05.2025).

109 Digital twins and the future of learning [Электронный ресурс]. URL: https://horizon.mit.edu/insights/digital-twins-and-the-future-of-learning (дата обращения: 20.05.2025).

110 Цифровые двойники и обучение будущего [Электронный ресурс]. URL: <u>https://www.cta.ru/articles/soel/2022/2022-1/165628/</u> (дата обращения: 20.05.2025).

Приложение 1. Свидетельство государственной регистрации программы для ЭВМ



Приложение 2. Свидетельство государственной регистрации программы для ЭВМ



Приложение 3. Акты о внедрении результатов диссертационной работы

AKT

о внедрении программного обеспечения для моделирования процессов измельчения порошков в планетарных мельницах, разработанного диссертантом кафедры информационных компьютерных технологий РХТУ им Д.И. Менделеева Бабкиным Михаилом Андреевичем

г. Москва

«___»____2025 г.

Настоящим актом подтверждается, что программное обеспечение для моделирования измельчения дисперсных материалов в планетарной мельнице, созданное при выполнении диссертационной работы «Разработка математической модели и цифрового двойника процессов измельчения в планетарной мельнице» может быть использовано в технологических процессах НИЦ «Курчатовский институт» для моделирования и прогнозирования режимных параметров процесса измельчения с целью получения материалов с заданными свойствами.

В результате применения программного обеспечения для планетарной мельницы в диссертационной работе были определены режимы процесса измельчения: размер шара 1мм, соотношение масс мелющих шаров к измельчаемому материалу в диапазоне [10:1-2:1], размер шара 2мм, соотношение масс [10:1-3:1]; размер шара 3мм, соотношение масс [10:1-7:1] для получения средних размеров частиц оксида алюминия в диапазоне [1,2-2,0 мкм].

Заместитель руководителя Курчатовского комплекса физико-химических технологий по технологическим процессам и аппаратам НИЦ "Курчатовский институт" д.т.н. профессор

Подпись Д.А. Макаренкова заверяю Заместитель директораглавный ученый секретарь НИЦ «Курчатовский институт»

Адрес НИЦ «Курчатовский институт»: 123182, Москва, пл. Академика Курчатова, д. e-mail: <u>nrcki@nrcki.ru</u> http://www.nrcki.ru Макаренков Д.А.

Алексеева Озыга Анатольевна

22.05.2025

	IGIPXTV	
	Quintin .	
МИ	НОБРНАУКИ РОССИИ	
Феде бюд учрежд	ральное государственное жетное образовательное сение высшего образования	
«Российсь	ий химико-технологический	
универси	тет имени Д.И. Менделеева»	
Миу Teл.: +7 (49 E-mail: p OKПС ИН	чекая пп., д. 9, Москва, 125047 9) 978-86-60; Факс: +7 (495) 609-29-64 ochta@muetr.ru; https://www.muetr.ru 02066492; ОГРН 1027739123224 H/КПП 7707072637/770701001	
	N₂	
на №	ot	
		AKT
	о внедрении результа	гов диссертационной работы
	Бабкина М	ихаил Андреевича
«Разра	ботка математической мо	дели и цифрового двойника процессов
	измельчения в п	ланетарной мельнице»

г. Москва

.

«<u>27</u>» <u>мая</u> 2025 г.

Настоящим актом подтверждается, что результаты диссертационной работы Бабкина Михаила Андреевича на соискание степени кандидата технических наук по специальности 1.2.2. Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ по теме «Разработка математической модели и цифрового двойника процессов измельчения в планетарной мельнице», выполненной на кафедре информационных компьютерных технологий РХТУ им. Д.И. Менделеева 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, внедрены на кафедре химической технологии керамики и огнеупоров РХТУ им. Д.И. Менделеева при проведении обучающимися по программам высшего образования - программам бакалавриата занятий семинарского типа (лабораторных работ) по следующим ООП:

1. 18.03.01 Химическая технология, профиль «Химическая технологий

Исполнитель Кольцова Э.М. тел. +7 (495) 495-21-26 e-mail: koltsova.e.m@muctr.ru
тугоплавких неметаллических и силикатных материалов» при изучении дисциплины «Химическая технология керамики» в разделе «Процессы технологии керамики: Измельчение и зерновой состав порошков», при изучении дисциплины «Оборудование и основы проектирования предприятий по производству керамики» в разделе «Оборудование для получения измельченных компонентов керамических масс»;

2. 15.03.02 Технологические машины и оборудование, профиль «Технологические машины и оборудование производства высокотемпературных функциональных материалов» при изучении дисциплины «Технология оборудования для производства высокотемпературных функциональных керамических материалов» в разделе «Введение. Оборудование для получения формовочных масс», при изучении дисциплины «Основы технологии нанопорошков и материалов на их основе».

Заведующий кафедрой ХТКиО, д.т.н., профессор Декан факультета ТНВиВМ, к.т.н., доцент Проректор по образованию РХТУ им. Д.И. Менделеева



Приложение 4. Диплом победителя программы «УМНИК»

```
Приложение 5. Листинг программного кода
Файл MainModule.py
import numpy as np
import pandas as pd
import plotly.express as px
import streamlit as st
import math_module as mm
from daughter_distr import daughter_distributions
import misc
st.set_page_config(layout='wide')
massStateDisplay = False
```

```
#проверка использования настройки распределения частиц
```

```
if st.sidebar.checkbox("Использовать эксп. данные о распределении", value=False):
```

```
avStSize = None
```

else:

```
# Исходный средний размер частиц, микрон
```

```
avStSize = st.sidebar.slider('Исходный средний размер частиц, микрон',
```

```
min_value=0.5, max_value=100.0, value=34.6, step=0.5)
```

```
# Параметры измельчаемого материала
typeMill = 0
material = 'Al₂O₃' # или можно выбрать через st.sidebar.radio()
```

```
storage = None
```

```
# Если ни одного хранилища не найдено, создаём новое дефолтное
```

```
if len(misc.VariableStorage.load_all(directory=misc.def_directory))
== 0:
```

```
storage = misc.VariableStorage("Планетарная мельница, измельчение Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>", 2)
```

```
storage.add parameter(0, misc.ControllingParameter(
           'Размер мелющих шаров',
           'r shar',
          2.0,
          min value=0.1,
          max value=20.0,
          unit='MM'
         ))
        storage.add_parameter(1, misc.ControllingParameter(
           'Отношение масс шаров к порошку',
           'm shar',
          3.0,
          min_value=0.1,
          max_value=20.0,
          unit='[-]'
         ))
        storage.save()
        storage.display settings()
     elif len(misc.VariableStorage.load all(directory=misc.def directory))
== 1:
                                                storage
                                                                             =
misc.VariableStorage.load_all(directory=misc.def_directory)[0]
        storage.display_settings()
     else:
        storages = misc.VariableStorage.load_all(misc.def_directory)
        storage_names = [storage.name for storage in storages]
              selected storage =
                                       st.selectbox('Выберите
                                                                  хранилище',
storage names)
                          next((s for s
            storage =
                                              in
                                                  storages
                                                              if s.name
                                                                            ==
selected_storage), None)
        if storage is not None:
          storage.display_settings()
     if material == 'Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>':
```

```
# Получаем значения параметров из хранилища
        MassRate = storage.get current values()[0]
        BallSize = storage.get current values()[1]
        typePAV = -1
        oborot = 250
        typeMill = 0
        densParticle = 4000
        densBalls = 5680
          daughter_distribution_key = st.sidebar.selectbox("Распределение
дочерних элементов",
                                 list(daughter_distributions.keys()))
        recomendations = {
          'Бинарная Бетта': [610.3177951100706, 0.01808597074346113],
                            (преобладание
                                            малых)':
                                                        [610.3177951100706,
                   'Бетта
0.01808597074346113],
                  'Бетта
                           (преобладание
                                           крупных)':
                                                        [610.3177951100706,
0.01808597074346113],
          #'Линейное распределение': [5.0, 1.0],
          #'Гамма-распределение': [5.0, 1.0],
          #'Нормальное распределение': [5.0, 1.0],
          #'Лог-нормальное распределение': [5.0, 1.0],
          #'Упрощённое распределение': [5.0, 1.0],
          #'Бета-распределение': [296.91, 1.21],
          #'Empty': [100.0, 1.0]
        }
                 st.sidebar.number input("Феноменологический коэффициент",
          L =
min value=0.0,
                        value=recomendations[daughter_distribution_key][0],
format="%.6f")
           Ρ
                  st.sidebar.number_input("Коэффициент
             =
                                                                   частиц",
                                                         дочерних
```

```
min_value=0.0,
```

value=recomendations[daughter_distribution_key][1],

format="%.6f")

```
else:
        typeMill = 1
        oborot = st.sidebar.slider('Скорость вращение барабана:',
                            min value=100.0, max value=600.0, value=250.0,
step=10.0)
         BallMaterial = st.sidebar.radio('Материал мелющих шаров', ('WC',
'Zr02'))
        MassRate = 1
        BallSize = 10
        if BallMaterial == 'WC':
          densBalls = 15770
        elif BallMaterial == 'ZrO<sub>2</sub>':
          densBalls = 5680
            PAV = st.sidebar.radio('Наличие и концентрация
                                                                       ΠAB',
('отсутствует', 'изопропиловый спирт', 'этиловый спирт'))
        if PAV == 'otcytctbyet':
          typePAV = 0
        elif PAV == 'изопропиловый спирт':
          typePAV = 2
        elif PAV == 'этиловый спирт':
          typePAV = 3
        densParticle = 3210
        L = 0.9945000000001
        P = 0.06526484999999996
     averageSize = st.slider('Конечный ожидаемый размер, микрон',
                  min value=0.01, max value=10.0, value=3.043, step=0.01)
     # Глобальная переменная для выбранной модели
     best model = None
     # Обучение новой модели - вызываем модуль energy
     with st.expander('Обучение новой модели'):
        import energy
```

```
energy.show menu()
     bt = st.button('Запустить расчёт')
     @st.dialog("Распределение частиц")
     def show population(f particles):
        st.write(f_particles)
        return
        fig2 = px.line(f particles, x='r', y='f', log x=True)
          fig2 = fig2.update_layout(title='Дифференциальное распределение
частиц по размерам',
                            xaxis_title='Размер фракции частиц (диаметры),
мкм', yaxis_title='Доля фракции, %')
        st.plotly_chart(fig2)
     # Функция расчёта; модель (best model) используется внутри
     def
             runCalc( densBalls=densBalls,
                                               params:
                                                          list
                                                                         [],
                                                                   =
densParticle=densParticle,
            _oborot=oborot, _typePAV=typePAV, _L=L, _P=P):
        global best model
        if best model is None:
          st.warning('Используется модель по умолчанию')
        else:
          st.success('Используется модель ' +
               ( "аналитическая регрессия" if best model is None
                else best_model.named_steps['model'].__class__.__name__ ))
                                               array B
mm.get array B(B function=daughter distributions[daughter distribution key]
)
         outData = mm.run_calculation(params, avStSize, best_model, L=_L,
P=_P, array_B=array_B)
        return outData
```

use_ML_model = False

```
#
          Если
                             обучены,
                   модели
                                         они
                                                 теперь
                                                           сохраняются
                                                                           R
st.session state["training results"]
     if
              "training results"
                                                 st.session state
                                        in
                                                                         and
st.session_state["training_results"]:
        st.write('Обнаружены обученные модели!')
        models = [None] # Аналитическая регрессия по умолчанию
        # Извлекаем модели из результатов обучения
        for r in st.session state["training results"]:
          models.append(r["Model obj"])
        best model = st.selectbox('Модель', models, index=1,
                       format_func=lambda m: "аналитическая регрессия" if m
is None
                      else m.named_steps['model'].__class__.__name__)
     if bt:
         columns = st.session_state["feature_cols"] if "feature_cols" in
                        st.session state["feature cols"]
st.session state
                  and
                                                           else ['r shar',
'm shar']
        #print(columns)
        params = storage.get sorted values(columns)
        #st.write(params)
        #st.write(storage.get_current_values())
        if not storage.validate(colunms=columns):
          st.error('Некорректные значения параметров! Расчёт может быть не
валиден')
                                               resData
                                                                           =
```

```
pd.DataFrame(runCalc(params=storage.get_current_values())['stats'])
    resData.to_csv('cache/resData.csv', index=False)
    mean_column_name = 'Arithmetic Mean'
    time_column_name = 'Time'
    _, col, _ = st.columns([1, 3, 1])
    with col:
```

```
st.write('Pacпределение частиц по размерам:')
          drop_columns = ['sizes',]
          if not massStateDisplay:
            drop_columns = drop_columns + ['mass']
                           st.dataframe(resData.drop(columns=drop_columns),
use_container_width=True,column_config={
                "Time": "Время, мин",
                #"mean": "Средний размер частиц, мкм",
                "Mode": "Наиболее вероят. размер",
                #"sigma": "Дисперсия",
                "mass": "Безразмерная масса частиц",
                     "f": st.column_config.LineChartColumn("Распределение",
y_min=0, y_max=2, pinned=True,),
              },
              hide_index=True,)
        try:
                  target time = resData[resData[mean column name]
                                                                         <=
averageSize][time_column_name].iloc[0]
                   st.write('Желаемый
                                       размер
                                                достигается
                                                                на
                                                                          +
str(round(target_time)) + ' минуте')
        except Exception:
                  target_time = resData[resData[mean_column_name]
                                                                         <=
resData[mean_column_name].min()][time_column_name].iloc[0]
        try:
                      arr2
                                   resData[resData[mean_column_name]
                              =
                                                                         <=
averageSize]['sizes'].iloc[0]
        except Exception:
                      arr2
                                  resData[resData[mean_column_name]
                              =
                                                                         <=
resData[mean_column_name].min()]['sizes'].iloc[0]
           f_particles = pd.DataFrame({'r': pd.Series(arr2[0]),
                                                                       'f':
```

```
pd.Series(arr2[1])})
```

f_particles['f'] = 100 * f_particles['f'] / f_particles['f'].sum()

```
f particles['r'] = 2 * f particles['r']
        try:
                       f particles[time column name] = ('time:'
                                                                          +
str(resData[resData[mean column name]
                                                                         >=
averageSize][time column name].iloc[-1]) +
                        ' size:' + str(resData[resData[mean column name] >=
averageSize][mean_column_name].iloc[-1]))
        except Exception:
                       f particles[time column name] = ('time:'
                                                                          +
str(resData[resData[mean column name]
                                                                         >=
resData[mean_column_name].min()][time_column_name].iloc[-1]) +
                        ' size:' + str(resData[resData[mean column name] >=
resData[mean_column_name].min()][mean_column_name].iloc[-1]))
        f_particles['cum_f'] = np.cumsum(f_particles['f'])
        col1, col2 = st.columns(2)
                       px.line(pd.DataFrame(resData), x=time_column_name,
            fig
                  =
y=mean column name, line shape="spline")
        fig = fig.update layout(title='Кинетика процесса измельчения',
                     xaxis title='время, мин', yaxis title='размер частиц,
мкм')
        col1.plotly_chart(fig)
        fig3 = px.line(f_particles, x='r', y='cum_f')
        fig3 = fig3.update layout(title='Интегральное распределение частиц
по размерам',
                       xaxis_title='Размер фракции частиц (диаметры), мкм',
yaxis title='Доля фракции, %')
        col2.plotly_chart(fig3)
        col1, col2 = st.columns(2)
        fig2 = px.line(f_particles, x='r', y='f', log_x=True)
         fig2 = fig2.update layout(title='Дифференциальное распределение
частиц по размерам',
```

```
xaxis_title='Paзмер фракции частиц (диаметры), мкм',
yaxis_title='Доля фракции, %')
col1.plotly_chart(fig2)
fig2_1 = px.line(f_particles, x='r', y='f')
fig2_1 = fig2_1.update_layout(title='Дифференциальное
paспределение частиц по размерам',
xaxis_title='Paзмер фракции частиц (диаметры),
MKM', yaxis_title='Доля фракции, %')
col2.plotly_chart(fig2_1)
```

if massStateDisplay:

fig4 = px.line(pd.DataFrame(resData), x=time_column_name,
y='mass', line_shape="spline")

```
fig4 = fig4.update_layout(title='Macca частиц во времени',
```

```
xaxis_title='время, мин', yaxis_title='масса, г')
```

```
st.plotly_chart(fig4)
```

with st.expander('Справка'):

st.write("""

Данный модуль предназначен для расчёта распределения частиц при измельчении в мелющем оборудовании.

Базовая модель включает в себя предобученную регрессию для планетарной мельницы.

Также вы можете изменить обучающий датасет и переобучить модель.

Для этого загрузите CSV файл с параметрами дробления в следующем формате:

Должны быть несколько колонок, например:

- m_sharov – соотношение масс измельчаемого материала и измельчающего,

- r_sharov - размер шаров,

- d – конечный устойчивый к измельчению размер частиц в микронах.

Для загрузки нового датасета разверните меню «Обучение новой модели», выберите файл и нажмите кнопку 'Обучить модель'.

После обучения модель можно включить или отключить ниже под кнопкой запуска расчёта.

""")

Файл: ResolverModule.py import streamlit as st import math_module as mm import pandas as pd from scipy.optimize import minimize from datetime import datetime from daughter_distr import daughter_distributions import numpy as np import plotly.graph_objects as pgo import scipy.ndimage import energy # для вызова energy.reset_session_state() import inspect # Глобальные переменные array_B = None log_file = None

```
# Выбор распределения дочерних элементов
daughter_distribution_key = st.selectbox(
    "Pacпределение дочерних элементов",
    list(daughter_distributions.keys())
)
recomendations = {
    'Бинарная Бетта': [610.3177951100706, 0.01808597074346113],
        'Бетта (преобладание малых)': [610.3177951100706,
0.01808597074346113, 1.0],
```

```
(преобладание
                                         крупных)':
              'Бетта
                                                       [610.3177951100706,
0.01808597074346113,2.0],
        #'Линейное распределение': [185.41, 0.5],
        #'Гамма-распределение': [405.8, 7.81],
        #'Лог-нормальное распределение': [197.82, 1.0],
        #'Бета-распределение': [296.91, 1.21],
        #'Empty': [100, 1.0],
     }
     st.markdown("---")
                        st.number input("стартовое
                                                                      L",
     L start =
                                                        значение
value=recomendations[daughter distribution key][0], format="%.6f")
     L min bounds = st.number input("минимальное
                                                          значение
                                                                      L",
value=0.0000001, step=0.1, min value=0.0, format="%.6f")
     L use max = st.checkbox("Выбрать максимальное значение
                                                                      L",
value=False)
     if L use max:
           L max bounds = st.number input("максимальное
                                                                      L",
                                                            значение
value=1000.0, step=0.1, min value=0.0, format="%.6f")
     else:
        L max bounds = None
     st.markdown("---")
                                                                      р",
     P start
                  =
                         st.number input("стартовое
                                                        значение
value=recomendations[daughter distribution key][1], format="%.6f")
     P min bounds = st.number input("минимальное значение p", value=0.0,
step=0.1, min value=0.0, format="%.6f")
                 = st.checkbox("Выбрать максимальное
     P use max
                                                           значение
                                                                      p",
value=False)
     if P use max:
           P max bounds = st.number input("максимальное
                                                            значение
                                                                      p",
value=1000.0, step=0.1, min value=0.0, format="%.6f")
     else:
```

```
P max bounds = None
     st.markdown("---")
     use n = st.checkbox("Использовать коэффициент n", value=False)
     if use n:
              n start =
                              st.number input("стартовое
                                                           значение
                                                                        n",
value=recomendations[daughter_distribution_key][2], format="%.6f")
            n_min_bounds = st.number_input("минимальное
                                                                        n",
                                                             значение
value=0.0, step=0.1, min value=0.0, format="%.6f")
          n use max = st.checkbox("Выбрать максимальное значение
                                                                       n",
value=False)
        if n use max:
              n max bounds = st.number input("максимальное значение n",
value=1000.0, step=0.1, min value=0.0, format="%.6f")
        else:
          n max bounds = None
        st.markdown("---")
     else:
        n \text{ start} = None
     st.markdown("---")
          st.checkbox("Использовать
     if
                                                           распределении",
                                      эксп.
                                              данные
                                                       0
value=True):
        averSize_start = None
     else:
        # Исходный средний размер частиц, микрон
```

```
averSize_start = st.slider('Исходный средний размер частиц, микрон',
```

```
min_value=0.5, max_value=100.0, value=34.6, step=0.5)
```

st.markdown("---")

Если обученные модели есть в st.session_state (из модуля energy), позволяем выбрать одну

```
best model = None
     if
              "training results"
                                        in
                                                 st.session state
                                                                         and
st.session state["training results"]:
        st.write('Обнаружены обученные модели!')
        models = [None] # Аналитическая регрессия по умолчанию
        for r in st.session state["training results"]:
          models.append(r["Model_obj"])
        best_model = st.selectbox(
          'Модель',
          models,
          index=1,
          format_func=lambda m: "аналитическая регрессия" if m is None
                 else m.named_steps['model'].__class__.__name__
        )
     st.markdown("---")
     error = None
     # Загрузка CSV-файла с данными для подбора коэффициентов
     uploaded_file = st.file_uploader("Выберите CSV файл", type="csv",
key="uploaded file")
     if uploaded_file is None:
        error = "Невыбран файл обучающей выборки"
     else:
         # Если загружен новый файл (по имени), сбрасываем предыдущие
данные
        if "uploaded filename" not in st.session state:
          st.session state.uploaded filename = uploaded file.name
        elif st.session state.uploaded filename != uploaded file.name:
          energy.reset_session_state()
          st.session state.uploaded filename = uploaded file.name
        try:
          df = pd.read csv(uploaded file)
          st.write("### Загруженный набор данных:")
          # Можно вывести первые строки: st.dataframe(df.head())
```

```
st.session state["df"] = df
          cols = df.columns.tolist()
          if 'd' in cols:
            cols.remove('d')
          st.session_state["feature_cols"] = cols
        except Exception as e:
          st.error(f"Ошибка чтения файла: {e}")
     st.markdown("---")
     def combined_objective(LP, weight_mse=0.5, weight_mass=0.5):
        .....
        Функция цели, которая для заданных коэффициентов L и P:
         - проходит по всем примерам из датасета,
          - для каждого примера берет управляющие параметры из столбцов,
указанных в st.session_state["feature_cols"],
          а ожидаемое значение берётся из столбца "d";
             _
                запускает симуляцию через mm.run calculation, получает
```

```
результаты (статистика);
```

- вычисляет ошибку (например, разницу между минимальным значением результата и ожидаемым);

- усредняет ошибки по всем примерам и возвращает взвешенное значение.

....

```
try:
   L, P, n = LP
except:
   L, P = LP
   n = None
```

if "df" not in st.session_state: st.error("Нет загруженных данных для оптимизации!") return 1e6 df = st.session state["df"] #st.dataframe(df) # Для отладки (при необходимости можно убрать)

Получаем список управляющих параметров из сохранённого порядка (feature_cols)

if "feature_cols" in st.session_state:

```
fc = st.session_state["feature_cols"]
```

else:

```
st.error("Нет информации о признаках (feature_cols)!")
return 1e6
```

Проверяем, что все контролирующие параметры из fc присутствуют в df

if not all(col in df.columns for col in fc):

st.error("Некоторые контролирующие параметры, указанные в feature_cols, отсутствуют в датасете!")

return 1e6

```
# Формируем выборку: для каждого примера из df берем значения 
управляющих параметров (в указанном порядке)
```

```
# и ожидаемое значение из колонки "d"
samples = []
for idx, row in df.iterrows():
    controlling_values = [row[col] for col in fc]
    expected = row["d"]
    sample = controlling_values + [expected]
    samples.append(sample)
```

```
errors = []
mass_std_devs = []
max_relative_changes = []
mean_column_name = 'Arithmetic Mean'
# Для каждого примера из выборки:
for s in samples:
```

Передаём в расчет управляющие параметры: все элементы с индексами 0..n-1,

```
# а ожидаемое значение берём из s[n] (где n = len(fc))
controlling_params = s[0:len(fc)]
expected value = s[len(fc)]
```

resData = pd.DataFrame(mm.run_calculation(controlling_params, averSize_start, best_model, P=P, L=L, array_B=array_B, n=n)['stats']) minimum = resData[mean_column_name].min()

mass_series = resData['mass']
initial_mass = mass_series.iloc[0]
mass_std_dev = mass_series.std()
mass_std_devs.append(mass_std_dev)

relative changes = abs(mass series - initial mass) /

initial_mass

max_relative_change = relative_changes.max()
max_relative_changes.append(max_relative_change)

st.write('calc=', minimum, ' expected=', expected_value)
errors.append((minimum - expected value) ** 2)

```
mse_value = sum(errors) / len(samples)
average_mass_std_dev = sum(mass_std_devs) / len(samples)
average_max_relative_change = sum(max_relative_changes) /
len(samples)
```

total_objective = mse_value# + weight_mass * average_mass_std_dev `{mse_value}`, #st.write(f"MSE: Average Mass STD: `{average mass std dev}`, Average Max Relative Mass Change: `{average_max_relative_change}`, $L: \{L\}$ P:`{P}` n:`{n}` Model:{best model}")

#log_file.write(f"MSE: `{mse_value}`, Average Mass STD: `{average_mass_std_dev}`, Average Max Relative Mass Change:

```
L:`{L}` P:`{P}` n:`{n}`
`{average max relative change}`,
Model:{best model}\n")
           st.write(f"MSE: `{mse value}`, L:`{L}` P:`{P}` n:`{n}`
Model:{best_model}")
          log_file.write(f"MSE: `{mse_value}`, L:`{L}` P:`{P}` n:`{n}`
Model:{best model}\n")
        return total_objective
     def FindP():
          initial_guess = [L_start, P_start] # стартовые значения
коэффициентов
                    = [(L_min_bounds, L_max_bounds), (P_min_bounds,
            bounds
P_max_bounds)]
        if use_n:
         initial_guess = initial_guess + [n_start]
         bounds = bounds + [(n min bounds, n max bounds)]
             result
                           minimize(combined objective,
                                                         initial_guess,
                      =
bounds=bounds)
         st.write(f"Optimized L:`{result.x[0]}` P:`{result.x[1]}`" + f"
n:`{result.x[2]}`" if use_n else "")
```

```
def analyze_and_plot_array(array_B):
    from scipy.integrate import quad
    b_function = daughter_distributions[daughter_distribution_key]
    integral_check, _ = quad(lambda i: b_function(i, 1, 0.5, 0.1), 0,
1)
```

st.write(f"Интеграл beta: {integral_check}")

array_B

=

```
mm.get_array_B(daughter_distributions[daughter_distribution_key])
mean_value = np.mean(array_B)
std_dev = np.std(array_B)
min value = np.min(array B)
```

```
max value = np.max(array B)
   st.write(f"Mean: {mean value}")
   st.write(f"Standard Deviation: {std dev}")
   st.write(f"Min: {min value}")
   st.write(f"Max: {max value}")
   factor = 0.1 # уменьшаем размер массива для построения графика
   array B = scipy.ndimage.zoom(array B, factor)
   x = np.arange(array_B.shape[0])
   y = np.arange(array B.shape[1])
   x, y = np.meshgrid(x, y)
   fig = pgo.Figure(data=[pgo.Surface(z=array_B, x=x, y=y)])
   fig.update_layout(
     title='3D Surface Plot',
     scene=dict(
       xaxis title='X Axis',
      yaxis title='Y Axis',
       zaxis title='Z Axis'
     ),
     autosize=False,
     width=700,
     height=700,
     margin=dict(1=65, r=50, b=65, t=90)
   )
   st.plotly_chart(fig)
if st.button("Анализ B(r,y)"):
   analyze_and_plot_array([])
if st.button("Начать подбор!"):
```

```
# Открываем лог-файл для записи результатов
str_calc_date = datetime.now().strftime("%Y-%m-%d--%H--%M--%S")
```

```
log_file = open(f"logs/log_{str_calc_date}.txt", "w")
prog_bar = st.progress(0)
array_B
mm.get_array_B(daughter_distributions[daughter_distribution_key])
log_file.write(f"Resolve begin: {datetime.now()}\n")
st.write(f'Время начала расчёта {datetime.now()}')
FindP()
st.write(f'Время окончания расчёта {datetime.now()}')
log_file.write(f"Resolving success ended: {datetime.now()}\n")
prog_bar.progress(100)
log_file.close()
```

```
with st.expander("помощь"):
```

```
st.write('''
```

Добро пожаловать, в модуль подбора коэффициентов. Здесь вы можете подобрать коэффициенты L и P, используя данные из вашего обучающего датасета.

''')

```
Файл: math_module.py
import math
import time
import numpy as np
import datetime
import os
import md_logger as logging_module
import streamlit as st
import hashlib
import pickle
```

normalize_enabled = False # Использовать ли нормализация для снижения размерности задачи

```
LOGGING_ENABLED = True
LOG_FOLDER = "logs"
CACHE FOLDER = "cache"
```

- if LOGGING_ENABLED and not os.path.exists(LOG_FOLDER):
 os.makedirs(LOG_FOLDER)
- if not os.path.exists(CACHE_FOLDER):
 os.makedirs(CACHE_FOLDER)

Функция для вычисления хеша параметров и функций для проверки изменений

```
def calculate_hash(*args):
   hash_object = hashlib.sha256()
   for arg in args:
     if isinstance(arg, (int, float, str)):
       hash object.update(str(arg).encode())
     elif callable(arg):
       hash object.update(arg. code .co code)
   return hash_object.hexdigest()
# Вспомогательные функции
def decubeD(t):
   return pow((-0.0002*t*t + 0.0592*t + 3.8005), 1.0/3.0)
def FF(i, delta_r, r_min):
   return delta r*i+r min
def analog_f(X, Nr,delta_r, r_min):
   start_point = 0
   if X > FF(Nr/2,delta_r, r_min):
```

```
start point = (-1+Nr/2) if X < FF(Nr/2+Nr/4,delta r, r min) else</pre>
(Nr/2+Nr/4 - 1)
        else:
           start_point = 0 if X < FF(Nr/4,delta_r, r_min) else (Nr/4 -1)</pre>
        for i in range(math.floor(start point), Nr):
           if X <= FF(i,delta_r, r_min):</pre>
             return i
        return Nr-1
     def V(r, delta_r, r_min):
        return (4.0 / 3.0)*math.pi*pow(2*(delta_r*r+r_min), 3.0)
     def f_start(x, delta_r, r_min, r0, averStartSize, sigma = 10, isSynt
= True):
         return f synt(x, delta r, r min, r0, averStartSize, sigma = sigma)
if averStartSize else f real(x, delta r, r min, r0)
     def f synt(x, delta r, r min, r0, averStartSize, sigma = 10):
        x = (delta r*x+r min)*2.0*r0*pow(10.0, 6.0)
        x_0 = (r_{min}) * 2.0 * r_0 * pow(10.0, 6.0)
        mass_corrector = 0.2 #100000 #0.2
        math_oj = averStartSize
                ret 0
                                           mass corrector*math.exp((-pow(x 0-
                          =
math oj,2))/(2.0*sigma*sigma))/(sigma*pow(2*3.141598, 0.5))
                                             mass corrector*math.exp((-pow(x-
                ret
math oj,2))/(2.0*sigma*sigma))/(sigma*pow(2*3.141598, 0.5)) - ret 0
        return ret if ret > 0 else 0
     def f_real(x, delta_r, r_min, r0):
         .....
```

Интерполяция экспериментального распреления, средний размер 23.7мкм, отклонение 5мкм

.....

 $x = (delta_r*x+r_min)*r0*pow(10.0, 6.0)$

#x_points_um = np.array([0.12, 0.25, 0.45, 0.7, 1.2, 2.2, 3.2, 5.0, 8.0, 15.0, 25.0, 35.0, 40.0, 45.0, 50.0, 55.0, 60.0, 70.0, 100.0])#диаметры

#y_points_pct = np.array([0.0, 0.1, 0.15, 0.2, 0.4, 0.7, 1.0, 1.1, 1.0, 1.3, 2.0, 3.0, 3.6, 4.0, 3.6, 3.0, 2.3, 1.2, 0.0])

#x_points_um = x_points_um/2.0 #радиусы

x_points_um = np.array([0.12, 0.25, 0.45, 0.7, 1.2, 2.2, 3.2, 5.0, 8.0, 15.0, 20.0, 25.0, 30.0, 35.0, 40.0, 45.0, 50.0, 70.0, 85.0])/2.0

y_points_pct = np.array([0.0, 0.1, 0.15, 0.2, 0.4, 0.7, 1.0, 1.1, 1.0, 1.3, 2.0, 3.0, 3.6, 4.0, 3.6, 3.0, 2.1, 0.1, 0.0])

from scipy.interpolate import interp1d

```
interp_func = interp1d(x_points_um, y_points_pct, kind='cubic',
bounds_error=False, fill_value=0.0)
```

```
return interp_func(x)
```

```
def getEps(z1,z2):
    a0 = -93279971
    a1 = -6658820
    a2 = 783271474
    a12 = 191562000
    print(z1,z2)
```

```
_eps = a0 + a1 * z1 + a12 * z1 * z2 + a2 * z2
return _eps
```

```
def alterB(i, k, delta_r,r_min, P=1.0, B_function = None):
```

```
і - дочерний
```

k - родительский

```
. . .
        import daughter distr as dd #импорт модуля дочерних распределений
        if B function is not None:
          return B_function(i, k, delta_r,r_min, P)
        else:
          return dd.B(i, k, delta_r,r_min, P) #L = 3.85 P=2.35
     def SumInegral(f, t, r , array_A , array_B, delta_r):
        Nr = len(f[t])
         new_array = f[t][r:Nr-1] * array_A[r:Nr-1] * array_B[r][r:Nr-1] +
f[t][r+1:] * array_A[r+1:] * array_B[r][r+1:]
        SumI = new_array.sum()
        return SumI * delta_r / 2.0
     def RadiusMean(f, t, delta_r, r_min ):
        a = 0
        b = 0
        Nr = len(f[t])
        for i in range(Nr - 1):
              a += f[t][i] * (delta_r*float(i) + r_min)+ f[t][i+1] *
(delta_r*float(i+1) + r_min)
          b += f[t][i] + f[t][i + 1]
        a *= delta_r / 2.0
        b *= delta r / 2.0
        return a / b
     def RadiusGeomMean(f, t, delta r, r min):
        a = 0
        b = 0
        Nr = len(f[t])
        for i in range(Nr - 1):
          # текущие радиусы
          r1 = delta r * float(i) + r min
```

```
r2 = delta_r * float(i + 1) + r_min
          # значения f(r)
          f1 = f[t][i]
          f2 = f[t][i + 1]
          # логарифм радиуса на значение функции – метод трапеций
          a += f1 * math.log(r1) + f2 * math.log(r2)
          b += f1 + f2
        a *= delta_r / 2.0
        b *= delta_r / 2.0
        return math.exp(a / b)
     def calculate_particle_stats_trapezoidal(f, delta_r, r_min):
        .....
         Calculate statistical parameters for particle size distribution
using trapezoidal rule.
        Parameters:
         f : list or array, frequencies of particles at different time
        t : int, time index
        delta r : float, size bin width
        r_min : float, minimum particle size
        Returns:
        dict : Statistical parameters
        .....
        # Extract frequency array for time t
        f_t = np.array(f, dtype=float)
        Nr = len(f t)
```

steps

```
# Initialize accumulators
        integral r = 0.0 \# For arithmetic mean
        integral log r = 0.0 \# For geometric mean
        integral r2 = 0.0 \# For quadratic mean
        integral_inv_r = 0.0 # For harmonic mean
          integral_f = 0.0 # Normalizing integral (total number of
particles)
        # Compute integrals using trapezoidal rule
        for i in range(Nr - 1):
          r_i = r_min + i * delta_r
          r_i1 = r_min + (i + 1) * delta_r
          # Arithmetic mean: ∫ r f(r) dr
          integral_r += f_t[i] * r_i + f_t[i + 1] * r_i1
          # Geometric mean: \int \ln(r) f(r) dr
              integral log r += ft[i] * np.log(ri) + ft[i + 1] *
np.log(r i1)
          # Quadratic mean: ∫ r^2 f(r) dr
          integral_r2 += f_t[i] * r_i**2 + f_t[i + 1] * r_i1**2
          # Harmonic mean: ∫ f(r)/r dr
          integral_inv_r += f_t[i] / r_i + f_t[i + 1] / r_i1
          # Normalizing integral: ∫ f(r) dr
          integral f += f t[i] + f t[i + 1]
        # Apply trapezoidal rule factor
        integral_r *= delta_r / 2.0
        integral_log_r *= delta_r / 2.0
        integral r2 *= delta r / 2.0
        integral inv r *= delta r / 2.0
```

```
integral f *= delta r / 2.0
        # Calculate means
         arith_mean = integral_r / integral_f if integral_f != 0 else
np.inf
        geom_mean = np.exp(integral_log_r / integral_f) if integral_f != 0
else np.inf
        quadr_mean = np.sqrt(integral_r2 / integral_f) if integral_f != 0
else np.inf
        harmonic_mean = integral_f / integral_inv_r if integral_inv_r != 0
else np.inf
        # Variance: [ (r - arith mean)^2 f(r) dr / [ f(r) dr
        integral variance = 0.0
        for i in range(Nr - 1):
          r i = r min + i * delta r
          r i1 = r min + (i + 1) * delta r
           integral variance += f t[i] * (r i - geom mean)**2 + f t[i + 1]
* (r i1 - geom mean)**2
        integral variance *= delta r / 2.0
        variance = integral variance / integral f if integral f != 0 else
np.inf
        # Standard Deviation
        std dev = np.sqrt(variance) if variance >= 0 else np.inf
        # Mean Square Deviation (assumed same as variance in this context)
        mean square dev = variance
        # Coefficient of Variation
        coef var = std dev / arith mean if arith mean != 0 else np.inf
        mode = np.argmax(f)*delta r + r min
```

```
return {
    'Arithmetic Mean': arith_mean,
    'Geometric Mean': geom_mean,
    'Quadratic Square Mean': quadr_mean,
    'Harmonic Mean': harmonic_mean,
    'Variance': variance,
    'Standard Deviation': std_dev,
    'Mean Square Deviation': mean_square_dev,
    'Mode': mode,
    'Coefficient of Variation': coef_var
  }
def init_A(t0, r0, delta_r, r_min, ps, gammaBabk, Barrier_A, Nr, L,
```

```
params, alter_eps_function):
    print(params)
    params_hash = calculate_hash(t0, r0, delta_r, r_min, ps,
gammaBabk, Barrier A, Nr, getEps, alter eps function, *params)
```

```
= os.path.join(CACHE FOLDER,
                     array A path
f"array A {params hash}.pkl")
        L0 = 1.0 / t0
        # Проверка и загрузка сохраненных массивов А и В
        if False: # os.path.exists(array_A_path): #отключено
          print('Loading A with hash: ', params_hash)
          with open(array_A_path, "rb") as f:
            array A = pickle.load(f)
        else:
          array A = np.zeros(Nr)
           eps =getEps(params[1], 1.0/params[0]) if alter_eps_function is
None else alter_eps_function.predict([params])[0]
          for r in range(Nr):
             We = ps * (2*(delta r*r+r min)*r0)**(5.0 / 3.0) * eps**(2.0 /
5.0) / gammaBabk
            array A[r] = We \# * L/L0
```

```
print('Saving A with hash: ', params_hash)
# Coxpaнeниe мaccивов A и B
with open(array_A_path, "wb") as f:
    pickle.dump(array_A, f)
    plot_1D([(r_min+ x*delta_r)/r0 for x in range(0,Nr)], array_A,
'График движ. силы')
    return array_A * (L/L0 if normalize_enabled else L)

    def init_B(alterB, delta_r, r_min, Nr, n=None): #
np.apply_along_axis(lambda ij: alterB(ij[0], ij[1],delta_r, r_min), 2,
```

```
np.indices((Nr, Nr)).transpose(1, 2, 0))):
```

```
# Вычисление хеша для проверки изменений
params_hash = calculate_hash(alterB, delta_r, r_min, Nr, n)
array_B_path = os.path.join(CACHE_FOLDER,
f"array_B_{params_hash}.pkl")
```

```
# Проверка и загрузка coxpаненных массивов B
if False: # os.path.exists(array_B_path): #отключено
with open(array_B_path, "rb") as f:
array_B = pickle.load(f)
else:
```

```
array_B = np.apply_along_axis(lambda ij: alterB(ij[0], ij[1],
delta_r, r_min, n), 2, np.indices((Nr, Nr)).transpose(1, 2, 0))
```

```
# Сохранение массивов А и В
with open(array_B_path, "wb") as f:
    pickle.dump(array_B, f)
return array B
```

```
import matplotlib.pyplot as plt
def plot_1D(x, y, title):
    return
```

```
fig, ax = plt.subplots()
```

```
ax.plot(x, y)
        # Добавляем заголовок и метки осей
        ax.set title(title)
        ax.set xlabel('x')
        ax.set ylabel('y')
        # Отображаем график в Streamlit
        with st.expander(title):
          st.pyplot(fig, use_container_width=False)
     def mass_of_all_particle(f, t, ps, f0, V0, delta_r, Nr, r_min):
        Volume = 0
        for r in range(Nr-1):
            Volume += (V(r, delta_r, r_min) * f[t][r] + V(r+1, delta_r,
r_min) * f[t][r+1])
        return ps * Volume * delta r / 2.0
     def get array B(B function = None, n= None):
        r_min = 0.0000001*pow(10.0, -6) # минимальный радиус частицы
        r_max = 50.0*pow(10.0, -6) # максимальный радиус частицы
        r0 = r_max if normalize_enabled else 1.0 # средний радиус частицы
        r max /= r0
        r min /= r0
        Nr = 3*pow(10, 3) # количество отрезков разбиения
        delta_r = (r_max - r_min) / float(Nr) # шаг по радиусу
                   return
                               init B(r min=r min,
                                                       alterB=B function,
Nr=Nr,delta_r=delta_r,n=n)# np.apply_along_axis(lambda ij: alterB(ij[0],
ij[1], delta_r, r_min, B_function = B_function), 2, np.indices((Nr,
Nr)).transpose(1, 2, 0))
```

```
def D corrected(t, alpha):
                            return (1 - alpha) * np.exp(-t/3600.0) + alpha * (1 + np.log(1 + alpha)) + alpha) + alpha * (1 + np.log(1 + alpha)) + alpha) + alpha * (1 + np.log(1 + alpha)) + alpha) +
t/(3600.0)))
                def verify balance(arr A, arr B, f, Nr, r min, delta r, P, t = 0):
                          left = 0
                          right = 0
                          for r in range(Nr-2):
                                dr = r^* delta r + r min
                                left += (arr_A[r]*f[t][r] + arr_A[r+1]*f[t][r+1])*delta_r/2
                                sub right = 0
                                for g in range(Nr-2):
                                                                             sub_right += (arr_A[g]*arr_B[r][g]*f[t][g]
                                                                                                                                                                                                                                 +
arr_A[g+1]*arr_B[r][g+1]*f[t][g+1])*delta_r/2
                                sub right plus = 0
                                for g in range(Nr-2):
                                                               sub right plus += (arr A[g]*arr B[r+1][g]*f[t][g] +
arr A[g+1]*arr B[r+1][g+1]*f[t][g+1])*delta r/2
                                right += (sub right plus + sub right)*delta r/2
                                      print(f"left: ", left, "right: ", right*P, "diff:",
math.log10(left) - math.log10(right*P))
                 def weighted_sigma(f, r):
                          f = np.array(f)
                          r = np.array(r)
                          # Среднее значение (взвешенное)
                          mean r = np.sum(f * r) / np.sum(f)
                          # Взвешенное стандартное отклонение
                          sigma = np.sqrt(np.sum(f * (r - mean_r)**2) / np.sum(f))
                          return sigma
```

```
def verify balance(arr A, arr B, f, Nr, P, r min, delta r):
        t = 0
        sum dr = 0
        for r i in range(Nr-1):
          r left = r i*delta r + r min
          r right = (r i+1)*delta r + r min
            left = -1.0 * f[t][r_i] * r_left * (f[t][r_i]*arr_A[r_i] -
P*SumInegral(f, t, r i, arr A, arr B, delta r) )
          right = -1.0 * f[t][r_i+1] * r_right * (f[t][r_i+1]*arr_A[r_i+1]
- P*SumInegral(f, t, r_i+1, arr_A, arr_B, delta_r) )
          sum dr = left + right
        return sum dr*delta r/2.0
     #z1 = 3.0, d_sphere = 5.0
           run calculation(params: list, averStartSize =
     def
                                                                    34.6,
alter eps function = None, f=None, P = 0.0256, L = 6.4, prog bar = None,
array B = None, n=None):
```

return run_calculation_volume(params, averStartSize, alter_eps_function, f, P , L, prog_bar, array_B)

def refilling_control_params(L, P):
 return (L * (0.0705/610.32) , P * (1/0.018))

def run_calculation_volume(params: list, averStartSize = 34.6, alter_eps_function = None, f=None, P = 0.018, L = 610.32, prog_bar = None, array_B = None, n=None):

"Расчёт по объёмам но распределение используется по радиусам"

if prog_bar is None:

prog_bar = st.progress(0, 'Прогресс расчёта')

mass_correction_enabled = False # устанавливает нормировку кривой распределения для достижения стабильной массы

```
L, P = refilling_control_params(L, P)
```

Константы Nr = 3*pow(10, 3) # количество отрезков разбиения t0 = 3600 if normalize enabled else 1.0 # размер временного шага if False:#pacчёт при секундном шаге по времени $T_max = 1.5*60 * 60 / t0$ delta t = 5.0/t0 #временной шаг Nt = math.ceil(T_max/delta_t)+1 # количество временных шагов else:#pacчёт 200х шагах по времени T max = 1.5*60 * 60 / t0Nt = 201 # количество временных шагов delta t = T max/Nt# временной шаг r_min = 0.00000001*pow(10, -6) # минимальный радиус частицы r max = 50*pow(10, -6) # максимальный радиус частицы r0 = r_max if normalize_enabled else 1.0 # средний радиус частицы # Инициализация r max /= r0r min /= r0delta r = (r max - r min) / Nr # шаг по радиусу ps = 3900.0 # плотность порошка (кг/м^3) #z2 = (10.0**-3) / (d_sphere*(10**(-3))) # отнесённая к 1 миллиметру размер мелющих шаров (метр) f0 = (2.7*pow(10,7)/(r0)) if normalize_enabled else 1.0 V0 = ((4.0 / 3.0)* 3.141596 * pow(r0, 3.0)) if normalize_enabled

else 1.0

Коэффициенты
a0 = -93279971, a1 = -6658820, a2 = 783271474, a12 = 191562000
gammaBabk = 1.2
#P = 0.0256
K_vol = pow(3.0, 1.0/3.0)
A0 = 1 / t0 if normalize_enabled else 1.0
Barrier_A = 50
M = 0.1 #масса частиц(кг)

```
aver v = math.pi* (4.0/3.0) * (averStartSize if averStartSize else
(r max - r min))**3.0
        particle amount = 4e14 #M / (aver v*ps)
        #L = 6.4 #феноменологический коэфф. пропорционален эффективности
дробления
        # Инициализация массивов
        array_A = np.zeros(Nr)
        f half = np.zeros(Nr)
        r array = np.array([r0*(r*delta r + r min) for r in range(Nr)])
        print('-*- '*20)
        print('volume calculation! ','L = ', L, 'P= ', P, 'params= ' + '
'.join(map(str, params)) , ' date= ', datetime.datetime.now())
         array A = A0 * init_A(t0, r0, delta_r, r_min, ps, gammaBabk,
Barrier A, Nr, L, params, alter eps function)
        print("sum of all A elements: ", np.sum(array A))
        prog bar.progress(0.15, 'Инициализация исходных данных')
        isSynt = True
        if f is None:
          f = np.zeros((Nt, Nr))
          for r in range(Nr):
            f[0][r] = f_start(r,delta_r,r_min,r0,averStartSize)
                 prog bar.progress(r/Nr, 'Инициализация исходных данных,
стартовое распределение')
          f all = np.sum(f[0])
          f[0] = f[0] / f all
          f[0] = f[0]^*particle amount
          print("sum of all F elements: ", np.sum(f[0]))
          plot 1D([(r_min+ x*delta_r)/r0 for x in range(0,Nr)], f[0],
'начальное распределение')
        start time = time.time()
```

```
#array_B = np.apply_along_axis(lambda ij: alterB(ij[0],
ij[1],delta_r, r_min), 2, np.indices((Nr, Nr)).transpose(1, 2, 0))
```

Логирование начальных параметров

if LOGGING_ENABLED:

logging_module.log_initialization(LOG_FOLDER, L, P, params,
datetime.datetime.now())

```
print("sum of all B elements: ", np.sum(array_B))
output = []
s = datetime.datetime.now()
f_time = datetime.datetime.now()
old_time = 0
start_mass = mass_of_all_particle(f, 0 ,ps, f0, V0, delta_r, Nr,
r_min)
balance = verify_balance(array_A, array_B, f, Nr, P, r_min,
delta_r)
```

```
if True: #Вывод информации о параметрах расчёта
```

print('Параметры новго расчёта:',

'\nРаспределение: ', 'Сгенерированное' if isSynt else 'Экспериментальное'

```
'\nКол-во шагов по размеру: ',Nr,
```

- '\пБезразмерный шаг по размеру: ',delta_r,
- '\nМин. размер: ',r_min,
- '\nМакс. размер: ',r_max,
- '\nКол-во шагов по времени: ',Nt,
- '\пБезразмерный шаг по времени: ',delta_t,
- '\nФеноменологический коэфф. L: ',L,
```
'\nПоправочный коэфф. P: ',P,
               '\nДлительность процесса: ',T max,
               '\nХарактеристическое f: ',f0,
               '\nХарактеристическое V: ',V0,
               '\nХарактеристическое А: ',А0,
               '\nХарактеристическое r: ',r0,
               '\nХарактеристическое t: ',t0,
               '\пУправляющие параметры : ',', '.join(map(str, params)),
               '\nКол-во частиц: ', particle amount,
               '\пПлотность частиц: ',ps,
               '\пОбщая масса частиц: ',М,
               '\nБаланс: ', balance,
             )
        message = ''
        for t in range(0,Nt-1):
          s = datetime.datetime.now()
          if t == 2:
            startSize = RadiusMean(f, t,delta r, r min)
          K vol = 1.0
          for r in range(Nr-1):
                                                        #r_integral
                                                                            =
analog_f((delta_r*r+r_min)*D_corrected(t,P),Nr,delta_r,r_min)
            r integral = analog f(delta r*r+r min,Nr,delta r,r min)
            \#r integral = r
             dt_integral = delta_t * SumInegral(f, t, r_integral , array_A,
array B, delta r)
            f_half[r] = f[t][r] + P*dt_integral
            one_plus_dt_A = 1.0 + delta_t*array_A[r]
            f[t + 1][r] = f_half[r] / one_plus_dt_A
          if False: #t%100 == 0:
```

181

```
verify balance(array A, array B, f, Nr, r min, delta r, P=P,
t=t)
          #f all = np.sum(f[t+1])
          #print(f all)
          #f[t+1] = f[t+1] / f all
          if mass correction enabled:
              new_mass = mass_of_all_particle(f,t,ps, f0, V0, delta_r, Nr,
r_min)
            f[t] = start_mass * f[t] / new_mass
            corrected_mass = mass_of_all_particle(f,t,ps, f0, V0, delta_r,
Nr, r_min)
            corrected_mass = start_mass + new_mass
          else:
             corrected_mass = mass_of_all_particle(f,t,ps, f0, V0, delta_r,
Nr, r_min)
            diam temp = r0*RadiusMean(f, t,delta r, r min)*2/pow(10,-6) #
средний размер частиц
           #max chance size = r0*(np.argmax(f[t])*delta r+r min)*2/pow(10,-
6) # наиболее вероятный размер частиц
          if t%5==0:
                      stats = calculate_particle_stats_trapezoidal(f[t],
delta_r=delta_r*r0*2/pow(10,-6), r_min=r_min*r0*2/pow(10,-6))
            stat_element = {
                 'Time' : t*delta t*t0/60,
                'Mean': diam temp,
                 'sizes': [r array,list(f[t+1])],
                'f': list(100 * f[t+1] / f[t+1].sum()),
                        'mass': corrected_mass if normalize_enabled else
corrected mass,# * pow(10,18),
              }
            stat element.update(stats)
            output.append(
              stat element
```

```
)

message = f'{int(t*delta_t*t0/60.0)}мин. ->

{diam_temp:2.2}мкм' #str(t*delta_t*t0/60) + '->' + str(diam_temp)

f_time = datetime.datetime.now()

time_predict = int((old_time + (f_time-s).total_seconds())/2*(Nt

- t))

prog_bar.progress(t/(Nt-1), f'Прогресс расчёта, осталось

{time_predict} секунд, `{message}`')

old_time = (f_time-s).total_seconds()

end_time = time.time()

print("Execution time: ", end_time - start_time, " seconds.")
```

```
prog_bar.progress(1.0 ,f'Расчёт окончен, длился {end_time - start_time}')
```

Логирование всех собранных данных после завершения расчета if LOGGING ENABLED:

```
logging_module.log_output(LOG_FOLDER, output, r_array, f,
"calculation_log.md")
```

return {'stats':output}

def run_calculation_linear(z1 = 3.0 , d_sphere = 5.0, averStartSize =
23.7, alter_eps_function = None, f=None, P = 0.0256, L = 6.4, prog_bar =
None, array_B = None, n=None):

if prog_bar is None: prog_bar = st.progress(0, 'Прогресс расчёта')

mass_correction_enabled = True # устанавливает нормировку кривой распределения для достижения стабильной массы

```
# Константы
Nr = 3*pow(10, 3) # количество отрезков разбиения
Nt = 201 # количество временных шагов
t0 = 3600 if normalize_enabled else 1.0 # размер временного шага
```

T_max = 1.5*60 * 60 / t0 delta_t = T_max/Nt# временной шаг #Nt = Nt + 500 #добавляю дополнительные шаги по времени, c coxpaнeнием шага и нормировки (убрать из продакшена) r_min = 0.0000001*pow(10, -6) # минимальный радиус частицы r_max = 50*pow(10, -6) # максимальный радиус частицы r0 = r_max if normalize_enabled else 1.0 # средний радиус частицы # Инициализация r_max /= r0 r_min /= r0 delta_r = (r_max - r_min) / Nr # шаг по радиусу ps = 2320.0 # плотность порошка (кг/м^3)

z2 = (10.0**-3) / (d_sphere*(10**(-3))) # отнесённая к 1 миллиметру размер мелющих шаров (метр)

f0 = (2.7*pow(10,7)/(r0)) if normalize_enabled else 1.0
V0 = ((4.0 / 3.0)* 3.141596 * pow(r0, 3.0)) if normalize_enabled
else 1.0

size_search = 2.043*pow(10, -6)/(r0*2) # искомый размер частиц particle_amount = V((r_min+r_max)/2) # Коэффициенты

a0 = -93279971, a1 = -6658820, a2 = 783271474, a12 = 191562000
gammaBabk = 1.2
#P = 0.0256
K_vol = pow(3.0, 1.0/3.0)
A0 = 1 / t0 if normalize_enabled else 1.0
Barrier A = 50

#L = 6.4 #феноменологический коэфф. пропорционален эффективности дробления

> # Инициализация массивов array A = np.zeros(Nr)

```
f half = np.zeros(Nr)
        r array = [r0*(r*delta r + r min) for r in range(Nr)]
        print('-*- '*20)
        print('volume calculation! ','L = ', L, 'P= ', P, 'z1 = ', z1, 'z2
= ', z2, 'date= ', datetime.datetime.now())
        array_A = init_A(t0, r0, delta_r, r_min, ps, gammaBabk, Barrier_A,
Nr, L, z1, z2, alter_eps_function)
        print("sum of all A elements: ", np.sum(array_A))
        prog_bar.progress(0.15, 'Инициализация исходных данных')
        if f is None:
          f = np.zeros((Nt, Nr))
          for r in range(Nr):
                     f[0][r] = f_start(r,delta_r,r_min,r0,averStartSize,
isSynt=False)
                 prog bar.progress(r/Nr, 'Инициализация исходных данных,
стартовое распределение')
          f all = np.sum(f[0])
          f[0] = f[0] / f_all
          print("sum of all F elements: ", np.sum(f[0]))
        start_time = time.time()
            #array_B = np.apply_along_axis(lambda ij: alterB(ij[0],
ij[1],delta_r, r_min), 2, np.indices((Nr, Nr)).transpose(1, 2, 0))
        # Логирование начальных параметров
        if LOGGING ENABLED:
             logging module.log initialization(LOG FOLDER, L, P, z1, z2,
datetime.datetime.now())
```

if array_B is None:

```
array B = init B(alterB, delta r, r min, Nr,n)#
np.apply_along_axis(lambda ij: alterB(ij[0], ij[1],delta_r, r_min), 2,
np.indices((Nr, Nr)).transpose(1, 2, 0))
        print("sum of all B elements: ", np.sum(array B))
        output = []
        s = datetime.datetime.now()
        f_time = datetime.datetime.now()
        old time = 0
        start_mass = mass_of_all_particle(f, 0 ,ps, f0, V0, delta_r, Nr,
r min)
        for t in range(0,Nt-1):
          s = datetime.datetime.now()
          if t == 2:
            startSize = RadiusMean(f, t,delta_r, r_min)
          K vol = 1.0
          for r in range(Nr-1):
                                                      #r integral
                                                                          =
analog f((delta r*r+r min)*D corrected(t,P),Nr,delta r,r min)
                                                      #r_integral
                                                                          =
analog_f((delta_r*r+r_min)*D_corrected(t,P),Nr,delta_r,r_min)
            r_integral = r
               dt integral = 4*math.pi*((delta r*r+r min)**2) *delta t *
SumInegral(f, t, r_integral , array_A, array_B, delta_r)
            f_half[r] = f[t][r] + P*dt_integral
            one plus dt A = 1.0 + delta t*array A[r]*A0
            f[t + 1][r] = f_half[r] / one_plus_dt_A
          if t%100 == 0:
              verify_balance(array_A, array_B, f, Nr, r_min, delta_r,P=P,
t=t)
          #f all = np.sum(f[t+1])
```

186

```
#print(f all)
          #f[t+1] = f[t+1] / f all
          if mass correction enabled:
              new_mass = mass_of_all_particle(f,t,ps, f0, V0, delta_r, Nr,
r min)
            f[t] = start_mass * f[t] / new_mass
             corrected_mass = mass_of_all_particle(f,t,ps, f0, V0, delta_r,
Nr, r_min)
          else:
             corrected_mass = mass_of_all_particle(f,t,ps, f0, V0, delta_r,
Nr, r_min)
          diam_temp = r0*RadiusMean(f, t,delta_r, r_min)*2/pow(10,-6)
          stat_element = {
              'time' : t*delta t*t0/60,
               'mean': diam_temp,
               'sizes': [r array,list(f[t+1])],
              'mass': corrected mass * pow(10,18)
            }
          output.append(
            stat element
          )
          f_time = datetime.datetime.now()
           time_predict = int((old_time + (f_time-s).total_seconds())/2*(Nt
- t))
               prog bar.progress(t/(Nt-1), f'Прогресс расчёта, осталось
{time predict} секунд')
          old time = (f time-s).total seconds()
        end time = time.time()
        print("Execution time: ", end_time - start_time, " seconds.")
           prog_bar.progress(1.0 ,f'Расчёт окончен, длился {end_time -
start time}')
          # Логирование всех собранных данных после завершения расчета
        if LOGGING ENABLED:
```

187

logging_module.log_output(LOG_FOLDER, output, r_array, f,
"calculation_log.md")

return {'stats':output}

if __name__ == '__main__':
 run_calculation()