

Научная статья

УДК 51-74:631.812.12

doi: 10.55186/25876740_2024_67_5_594

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ПРОЦЕССА ГРАНУЛИРОВАНИЯ МИНЕРАЛЬНЫХ УДОБРЕНИЙ

Т.В. Папаскири, В.К. Саранчин, А.П. Климов, С.В. Суслов, Б.С. Кривошея

Государственный университет по землеустройству, Москва, Россия

Аннотация. В статье приведены результаты построения математической модели процесса гранулирования минеральных удобрений методом окатывания при гидродинамическом воздействии в грануляторе барабанного типа или в виброгрануляторе и методы идентификации модели (оценивания неизвестных параметров). Разработанная математическая модель является детерминированной и ее структура основывалась на физико-химических закономерностях процессов, происходящих в системе. Рассмотрен механизм образования гранул из тонкодисперсных частиц, взвешенных в жидкой среде, состоящий в том, что в суспензию вводится и равномерно распределяется в ней жидкость, обладающая большей смачиваемостью по отношению к твердым частицам (связующая жидкость), чем среда суспензии и на систему накладываются гидродинамические воздействия. При столкновении капель происходит их коалесценция и накопление в них частиц, которые при контакте в хорошо смачиваемой жидкости слипаются, образуя гранулы. В статье приведены различные зависимости прочности образующихся гранул, которые показывают, что нагрузка разрушения гранулы зависит от диаметра гранулы, ее порозности и размеров твердых частиц. Для оценки неизвестных параметров математической модели процесса гранулирования был проведен ряд лабораторных экспериментов. В результате идентификации математической модели были уточнены представления о механизме процесса гранулирования, принятых при построении математической модели, и определены оценки неизвестных параметров. Представлен метод и алгоритм оценивания параметров в случае нелинейной модели и приближенного вычисления интегралов.

Ключевые слова: Гранулирование, математическая модель, гидродинамическое воздействие, размер и прочность гранул, метод максимального правдоподобия

Original article

MATHEMATICAL MODEL OF THE PROCESS OF GRANULATION OF MINERAL FERTILIZERS

T.V. Papaskiri, V.K. Saranchin, A.P. Klimov, S.V. Suslov, B.S. Krivosheya

State University of Land Use Planning, Moscow, Russia

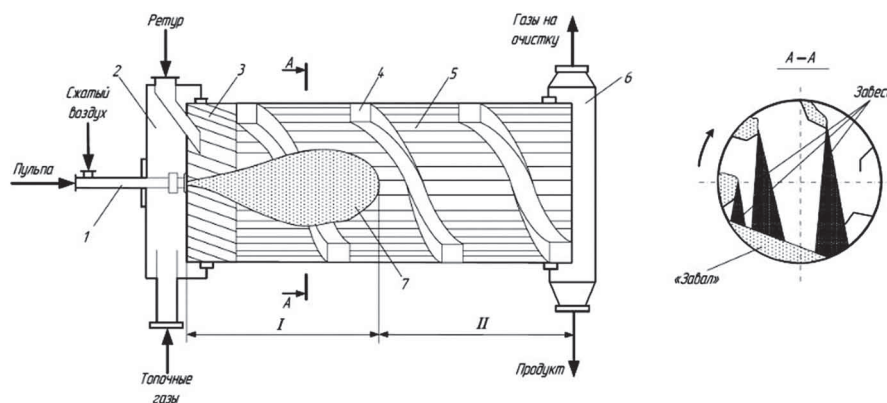
Abstract. The article presents the results of constructing a mathematical model of the granulation process of mineral fertilizers by the pelletizing method under hydrodynamic action in a drum-type granulator or in a vibrating granulator and methods for identifying the model (estimating unknown parameters). The developed mathematical model is deterministic and its structure was based on the physico-chemical laws of the processes occurring in the system. The mechanism of formation of granules from fine particles suspended in a liquid medium is considered, consisting in the fact that a liquid with greater wettability relative to solid particles (binder liquid) is introduced into the suspension and evenly distributed in it, and hydrodynamic effects are applied to the system. When droplets collide, they coalesce and accumulate particles in them, which, upon contact in a well-wetted liquid, stick together to form granules. Various dependences of the strength of the image are given.

Keywords: Granulation, mathematical model, hydrodynamic effect, size and strength of granules, maximum likelihood method

Введение. Гранулирование методом окатывания на движущийся поверхность заключается в образовании агломератов из равномерно смоченных частиц или в наслаивании сухих частиц на смоченные ядра — центры образования гранул. Данный процесс обусловлен действием капиллярно-адсорбционных сил сцепления между частицами в слое, подвергающимся гидродинамическому воздействию в грануляторе барабанного типа или в виброгрануляторе. Высокую эффективность при гранулировании удобрений показывает широко используемый в настоящее время барабанный гранулятор-сушилка (БГС), который представляет собой вращающийся барабан с внутренней подъемно-лопастной насадкой, установленный с наклоном к горизонту в сторону выгрузки под углом от 1 до 3° (рис.). Этот угол определяет производительность барабана-гранулятора, причем его оптимальное значение устанавливается экспериментально для конкретного гранулометрического состава продукта. При вращении барабана лопатки специального профиля, установленные внутри барабана, проходят через слой продукта в нижней части («завал»), захватывая его и затем ссылая, образуя при этом «завесу» по всему сечению. На эту завесу с помощью форсунки наносится перерабатываемая пульпа, диспергируемая

с помощью сжатого воздуха (или за счет образующегося пара при работе с трубчатым реактором). В головную часть барабана также подаются топочные газы и вводят внешний ретур, для перемещения которого в зону образования завесы головная часть БГС оснащена винтовой

насадкой. При нанесении пульпы на частицы завесы происходит образование гранул, которые затем досушиваются. Максимальное количество пульпы, подаваемое на завесу, зависит от предельной влажности гранул, при которой начинается образование агломератов в «завале».



1 — форсунка; 2 — загрузочная камера; 3 — винтовая питающая насадка; 4 — обратный шнек; 5 — подъемно-лопастная насадка; 6 — разгрузочная камера; 7 — факел; I — зона гранулирования; II — зона досушки

Рисунок. Барабанный гранулятор-сушилка (БГС)

Figure. Drum Granulator Dryer (BGS)



В барабане-грануляторе происходит окатывание исходной шихты, после чего отгранулированная шихта поступает на досушку, а затем, при помощи транспортирующих механизмов, в барабан-холодильник, после чего элеватором доставляется в грохот. Крупную фракцию измельчат в дробилке. Дробленый материал вместе с мелкой фракцией в качестве ретура возвращают в технологический процесс, а готовый продукт обрабатывается в барабане-кондиционере антислеживателем. В процессе гранулирования минеральных удобрений присутствуют почти все виды физико-химических и физико-химических связей между частицами (капиллярные и поверхностно-активные силы, на границе раздела твердой и жидкой фаз; адгезионные силы, возникающие в адсорбционных слоях; силы притяжения между твердыми частицами (Ван-дер-Ваальса, электростатического притяжения), силы связи за счет связующего при химической реакции, плавлении и кристаллизации, спекания и др.) [1,15,16]. Построение математической модели процесса позволит провести выбор и расчет параметров оборудования для гранулирования и определить выходные параметры процесса. Теоретические исследования проводились авторским коллективом в 2024 году на кафедре Высшей математики, физики и информатики Государственного университета по землеустройству.

Целью работы являлось построение математической модели процесса гранулирования минеральных удобрений и сформулировать как задачу определения правила преобразования внешних (совокупность входных и управляющих) воздействий на объект в реакцию (выход) объекта на эти воздействия. Для выполнения этой задачи необходимо построить оператор А, который для заданной совокупности исходных данных, определяемых состоянием внешних факторов, действующих на процесс, давал бы результат, максимально совпадающий с действительной реакцией объекта на эти воздействия. Знание математической модели позволяет при известных входных переменных рассчитать реакцию объекта на любое изменение в различные моменты времени и тем самым быстро исследовать свойства объекта и определить оптимальный режим его работы.

Известно [2,17, 18], что при построении математических моделей таких сложных процессов, как гранулирование, малоэффективны чисто статистические методы, которые не касаются внутренних закономерностей процесса и устанавливая связи между наблюдаемыми входами и выходами путем статистической обработки экспериментальных данных. Наиболее эффективны в этих случаях детерминированные модели, при построении которых на первом этапе, на основании физико-химических закономерностей исследуемого процесса определяют структуру его математической модели, а затем проводят ограниченное число направленных экспериментов и по их результатам уточняют значения коэффициентов и отдельные связи модели.

Получение достаточно прочных гранул из тонкодисперсных частиц, взвешенных в жидкой среде, возможно при введении третьей фазы — связующей жидкости и наложении гидродинамических воздействий. Многофазность системы обуславливает сложную до настоящего времени недостаточно разработанную зависимость кинетики процесса от многих факторов. В общем виде механизм образования гранул представляется следующим образом. В суспензию вводится

и равномерно распределяется в ней жидкость, обладающая большей смачиваемостью по отношению к твердым частицам (связующая жидкость), чем среда суспензии. При этом на систему накладываются гидродинамические воздействия. В результате столкновения капель происходит их коалесценция и накопление в них частиц, которые при контакте в хорошо смачиваемой жидкости слипаются, образуя довольно прочные гранулы. Оптимальный режим гранулирования может быть охарактеризован тремя показателями: средним размером или фракционным составом, прочностью и формой гранул.

Построение математической модели процесса даст возможность прогнозировать значения этих показателей в зависимости от влияющих факторов и позволит выбирать режим гранулирования для получения гранул с заданным размером и прочностью.

Объектом исследования является математическая модель процесса гранулирования в производстве минеральных удобрений для предприятий сельского хозяйства.

При построении модели приняли следующие допущения:

- капли эмульсии и частицы суспензии имеют форму шара;
- все капли эмульсии имеют одинаковые размеры;
- относительная скорость движения частиц в среде не зависит от их концентрации;
- концентрация капель эмульсии не изменяется в процессе;
- капли эмульсии и твердые частицы перемещаются случайным образом.

При данных допущениях время образования гранул будет равно времени образования отдельной гранулы.

Исходя из принятых представлений о механизме протекания процесса, скорость гранулирования определяется частотой столкновения частиц при их движении и тогда для описания процесса можно использовать уравнение, подобное уравнению частоты столкновения молекул при химической реакции [3]:

$$f = -\frac{dn_t}{dt} = \sqrt{2} \cdot S \cdot u \cdot (n_0 + n_t)^2, \quad (1)$$

где f — частота столкновения частиц, $c \cdot m^{-3}$;
 n_t — концентрация твердых частиц, m^{-3} ;
 t — время образования гранулы, c ;
 S — эффективное сечение соударений, m^2 ;
 u — средняя относительная скорость движения частиц, $m \cdot c^{-1}$;

n_0 — концентрация капель эмульсии, m^{-3} .
 Раскрывая скобки и учитывая, что скорость гранулирования есть частота столкновения между каплями эмульсии и частицами суспензии (твердого) получим:

$$-\frac{dn_t}{dt} = \sqrt{2} \cdot S \cdot u \cdot n_0 \cdot n_t. \quad (2)$$

Среднюю скорость движения частиц при гидродинамическом воздействии в грануляторе барабанного типа можно определить по формуле Стокса для ламинарного режима движения:

$$u = \frac{A \cdot d_t^2 \cdot (2\pi\omega)^2 \cdot (\rho_T - \rho)}{18 \cdot \mu},$$

где A — амплитуда колебаний мешалки, m ;
 ω — частота вибрации, c^{-1} ;
 ρ, ρ_T — плотность дисперсионной среды и твердых частиц (кажушаяся), соответственно, $kg \cdot m^{-3}$;

μ — вязкость дисперсионной среды, $Pa \cdot c$;
 d_t — диаметр твердых частиц, m .

Так как не всякое столкновение частиц суспензии с каплей эмульсии приводит к захвату ею твердой частицы, введем коэффициент, учитывающий вероятность захвата. Исходя из физической сущности процесса, вероятность захвата пропорциональна величине краевого угла смачивания жидкой эмульсии твердым веществом суспензии может быть представлена в виде:

$$p = b \cdot \cos^2 \frac{\theta}{2}, \quad (3)$$

где θ — краевой угол смачивания, град;
 b — константа.

Тогда уравнение (2) преобразуется в следующее:

$$-\frac{dn_t}{dt} = \sqrt{2} \cdot S \cdot u \cdot n_0 \cdot n_t \cdot b \cdot \cos^2 \frac{\theta}{2}. \quad (4)$$

Если принять допущение, что эффективное сечение соударений не изменяется в процессе гранулирования, то уравнение (4) можно легко проинтегрировать

$$t = -\frac{1}{b \cdot c_1} \cdot \ln n_t + C, \quad (5)$$

где $C_1 = \sqrt{2} \cdot S \cdot u \cdot n_0 \cdot b \cdot \cos^2 \frac{\theta}{2}$.

Константа интегрирования определяется из начальных условий $n_t(0) = n_t^0$ при $t=0$, и уравнение (5) запишется в виде:

$$t = \frac{1}{b \cdot c_1} \cdot \ln \frac{n_t^0}{n_t}, \quad (6)$$

где n_t^0 — начальная концентрация суспензии;
 n_t — изменение концентрации твердых частиц за счет их захвата каплями эмульсии в процессе гранулирования.

Время окончания процесса гранулирования t_w , т. е. время полного заполнения капли эмульсии твердыми частицами будет равно

$$t_k = \frac{1}{b \cdot c_1} \cdot \ln \frac{n_t^0}{n_t^k}, \quad (7)$$

где n_t^k — концентрация твердых частиц по окончании процесса их захвата каплями эмульсии.

Запишем изменение концентрации твердых частиц в процессе гранулирования (уравнение материального баланса)

$$n_t^k = n_t^0 - n_t^n, \quad (8)$$

где n_t^n — изменение концентрации твердых частиц за счет их захвата каплями эмульсии в процессе гранулирования.

Изменение концентрации можно выразить через размеры сталкивающихся частиц эмульсии и суспензии и порозность полученных гранул

$$1 - \varepsilon = \frac{N_t \cdot V_t}{N_t \cdot V_t + V_0} = \frac{N_t \cdot d_t^3}{N_t \cdot d_t^3 + d_0^3}, \quad (9)$$

где ε — порозность гранулы;
 N_t — число твердых частиц, захваченных одной каплей;
 d_t, d_0 — диаметр частиц суспензии и капель эмульсии, соответственно.

Отсюда
$$N_t = \frac{1 - \varepsilon}{\varepsilon} \cdot \left(\frac{d_0}{d_t}\right)^3 \quad (10)$$

а изменение концентрации будет

$$n_t^n = N_t \cdot n_0. \quad (11)$$

Тогда из уравнений (8-11) следует

$$n_t^k = n_t^0 - n_0 \cdot \left(\frac{d_0}{d_t}\right)^3 \cdot \frac{1 - \varepsilon}{\varepsilon}. \quad (12)$$

И уравнение (7) запишется в виде

$$t = \frac{1}{b \cdot c_1} \ln \left(1 - \frac{n_0}{n_t^0} \left(\frac{d_0}{d_t}\right)^3 \frac{1 - \varepsilon}{\varepsilon} \right). \quad (13)$$

Учитывая, что

$$\frac{n_0}{n_t^0} = \frac{V_0}{V_t} \left(\frac{d_t}{d_0}\right)^3 = \frac{m_0 \rho_t}{m_t \rho_0} \left(\frac{d_t}{d_0}\right)^3 \quad (14)$$





окончательно уравнение (7) можно представить в виде

$$t = -\frac{1}{bC_1} \ln \left(1 - \frac{m_0 \rho_T}{m_T \rho_0} \cdot \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon} \right), \quad (15)$$

где v_0, v_t — объём связующей жидкости и твердого, соответственно;

m_0, m_t — масса связующей жидкости и твердого, соответственно;

Уравнение (15) является некоторым приближением, так как оно не учитывает изменение размеров капель эмульсии по мере захвата ими твердых частиц. Если учитывать изменение диаметра растущей гранулы в процессе гранулирования, то уравнение (4) запишется в виде

$$-\frac{dn_t}{dt} = C_2 S N_T b, \quad (16)$$

$$\text{где } C_2 = \sqrt{2u} n_0 \cos^2 \frac{\theta}{2}.$$

Величина диаметра капли эмульсии (растущей гранулы) меняется во времени при гранулировании. Объём растущей гранулы к некоторому моменту времени будет равен

$$V = (V_0 + N_t V_t) = \frac{\pi}{6} (d_0^3 + N_t d_t^3), \quad (17)$$

где N_t — число твердых частиц, захваченных каплей к некоторому моменту времени.

И, следовательно, диаметр растущей гранулы будет равен:

$$D = \left(\frac{6V}{\pi} \right)^{\frac{1}{3}}. \quad (18)$$

Из уравнений (17) и (18) следует:

$$D = (d_0^3 + N_t d_t^3)^{\frac{1}{3}}. \quad (19)$$

Сечение соударений с учетом того, что

$N_t = \frac{n_t^0 - n_t}{n_0}$ будет равно:

$$S = \frac{\pi}{4} (d_0^3 + \frac{n_t^0 - n_t}{n_0} d_t^3)^{\frac{2}{3}}. \quad (20)$$

Подставляя значение эффективного сечения соударений (20) в уравнение (16), разделяя переменные и интегрируя, с учетом начальных условий получим

$$t = \int_0^t d\tau = \int_{n_t^0}^{\frac{dn_t}{b \cdot C_4 (C_3 + n_t^0 - n_t)^{\frac{2}{3}} n_t}} \frac{dn_t}{n_t^0}, \quad (21)$$

$$\text{где } C_3 = n_0 \left(\frac{d_0}{d_t} \right)^3, \quad C_4 = C_2 \frac{\pi d_t^2}{4 n_0^{\frac{2}{3}}}.$$

Нижний предел интегрирования определяется по уравнению (12). Диаметр образующихся гранул определяется величиной капель связующей жидкости и пористостью гранул. Объем пор в грануле и объем капли связующей жидкости равны, соответственно:

$$V_{nop} = \frac{\pi D^3}{6} \varepsilon \quad (22)$$

$$V_0 = \frac{\pi d_0^3}{6}. \quad (23)$$

Отсюда и из формул (17-19) следует, что диаметр гранулы будет равен:

$$D = \frac{(d_0^3 + N_t d_t^3)^{\frac{1}{3}}}{1-\varepsilon}. \quad (24)$$

Как видно из уравнения (24) диаметр образующихся гранул определяется величиной капель связующей жидкости (центров образования гранул). Увеличение турбулентности потока приводит к более тонкому диспергированию связующей жидкости, что приводит к снижению размеров образующихся гранул. Диаметр капель связующей жидкости зависит от условий перемешивания следующим образом [4,5]:

$$Ad_M = cW_e^{0.5} R_e^{0.1} \alpha^{0.84}, \quad (25)$$

где W_e, R_e — критерии Вебера и Рейнольдса, соответственно;

α — доля дисперсной фазы в системе;

A — поверхность контакта фаз;

c — const, известная для различных типов мешалок, и

$$d_0 = \frac{6\alpha}{A}. \quad (26)$$

Отсюда

$$d_0 = 60 \alpha^{0.16} \rho^{-0.6} \omega^{-1.1} d^{0.1} \sigma^{0.5} \mu^{0.1}. \quad (27)$$

Выше рассмотрен случай когда пустоты в гранулах содержат только связующую жидкость. Однако обычно это не так и пустоты в гранулах содержат воздух и суспендирующую жидкость. Если принять, что количество захваченного воздуха и суспендирующей жидкости пропорционально количеству связующей жидкости, то объём растущей гранулы можно представить в виде

$$V = (a V_0 + N_t V_t) = \frac{\pi}{6} (a d_0^3 + N_t d_t^3), \quad (28)$$

где a — константа ($a > 1$). Тогда

$$S = \frac{\pi}{4} (a d_0^3 + \frac{n_t^0 - n_t}{n_0} d_t^3)^{\frac{2}{3}}. \quad (29)$$

И уравнение (21) будет представлено в виде:

$$t = \int_0^t d\tau = \int_{n_t^0}^{\frac{dn_t}{b C_4 (a C_3 + n_t^0 - n_t)^{\frac{2}{3}} n_t}} \frac{dn_t}{n_t^0}. \quad (30)$$

А нижний предел интегрирования (12) будет равен

$$n_t^0 = n_t^0 - n_0 \cdot \left(\frac{d_0}{d_t} \right)^3 \cdot \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon} \cdot a. \quad (31)$$

Одним из основных свойств гранул является их прочность. Исследования зависимости прочности образующихся гранул показали [5-6], что нагрузка разрушения гранулы зависит от диаметра гранулы, ее порозности и размеров твердых частиц, образующих гранулы, и ее можно представить в виде:

$$L = k \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon} \frac{\sigma}{d_T} D^2, \quad (32)$$

где L — нагрузка разрушения, кг;

D — диаметр гранулы, м;

σ — межфазное натяжение, н·м⁻¹;

k — константа;

d_t — диаметр твердых частиц, м.

Оценку прочности можно также провести по представленным ниже формулам. Приближенный расчет сил капиллярного сцепления в предположении, что слой материала состоит из частиц радиуса R и что эти частицы образуют кубическую укладку, приводит к следующему выражению:

$$F = \frac{\pi \sigma}{4R} \left(\frac{\pi \rho_B w}{2 \rho_T} + 1 \right),$$

где w — влажность материала;

σ — поверхностное натяжение.

Тигершельд и Ильмони дают подобное аналитическое выражение для расчета капиллярных сил:

$$F = 0.075 S \rho_T \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon},$$

где S — удельная поверхность материала;

ε — пористость гранулы.

Аналогичная зависимость получена и при определении прочности молекулярной связи между частицами:

$$F = k S \rho_T \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon},$$

где k — константа.

Для определения адекватной зависимости необходимо провести эксперименты по определению прочности гранул и определить

наилучшую структуру уравнения и неизвестные параметры.

Исследования по количеству дисперсионной среды, захватываемой твердыми частицами при проникновении их в капли проводились следующим образом. В емкость наливали аполлярную жидкость в количестве 30 см³. Для порошков минеральных удобрений в качестве аполлярной жидкости использовался четыреххлористый углерод и гептан. Далее в емкость добавляли порошок (5 г) и 0,1 см³ связующей жидкости (силикагеля). Затем емкость подвергалась гидродинамическому воздействию в течение 10-15 минут при частотах 1,5-2,5 с⁻¹ (100-150 об/мин). Полученную гранулу извлекали, определяли ее вес и размер (диаметр). После высушивания гранулы в муфеле, повторно измеряли ее диаметр.

Эксперименты по процессу получения мелкосферических гранул проводили следующим образом. В тефлоновый стакан, (120 +/- 5 см³) заливалась аполлярная жидкость объемом 45 +/- 5 см³. Далее в органическую среду вводили порошок твердого вещества (0,5-3,2 г) и связующую жидкость (0,5-1 см³). Затем эта система подвергалась гидродинамическому воздействию для диспергирования связующего вещества, в капли которых проникали твердые частицы. В результате этого процесса образовывались мелкосферические гранулы, которые отделялись от жидкости и высушивались.

Для проверки адекватности модели образования гранул были проведены следующие экспериментальные исследования:

- по определению времени проникновения одиночной частицы в каплю связующей жидкости (на каплю помещали твердую частицу и процесс ее проникновения наблюдали под микроскопом),
- по определению количества дисперсионной среды, захватываемой твердыми частицами при проникновении их в единичную каплю (при этом на систему налагалось гидродинамическое воздействие при частотах 1,5-2,5 с⁻¹ (100-150 об/мин). Полученную гранулу извлекали, определяли ее вес и диаметр. После высушивания гранулы в муфеле, повторно проводили измерения,
- по процессу получения мелкосферических гранул.

Обсуждение результатов, полученных с помощью математической модели процесса гранулирования, показало, что проблема идентификации модели состоит в определении оператора модели A , минимизирующего меру отклонения выхода, рассчитанного по модели, от действительной реакции объекта.

Для оценки неизвестных параметров математической модели процесса гранулирования был проведен ряд экспериментов. В этих экспериментах преследовались две цели: уточнение представлений о механизме процесса гранулирования, принятых при построении модели, и получении исходных данных для проверки адекватности последней. Широкой диапазон режимов, при которых проводились измерения, обеспечил возможность получения исходных данных, необходимых для идентификации математической модели.

Задача идентификации модели состоит в определении оператора модели A , минимизирующего меру отклонения выхода, рассчитанного по модели, от действительной реакции объекта на возмущение. При известной структуре



математической модели, т. е. когда известен вид оператора A , процесс идентификации сводится к определению (оцениванию) неизвестных параметров по результатам наблюдений.

В общем случае задача оценивания приводится к задаче математического программирования, т. е. задаче отыскания экстремума функции многих переменных. При идентификации модели детерминированного объекта входное воздействие X является случайным, а выход объекта Y ввиду ошибок измерения является случайной величиной, представляющей собой сумму истинного выхода объекта и ошибки измерения, которая обычно считается некоррелированной с выходом и распределенной по нормальному закону с нулевым математическим ожиданием и постоянной дисперсией.

При оценивании параметры, обеспечивающие наилучшее приближение к экспериментальным данным, в смысле некоторого критерия адекватности, принимаются за истинные значения этих величин. Задача оценивания параметров математической модели сводится к задаче нахождения экстремума:

$$Q(a) = \text{extr}, \quad (33)$$

где a — неизвестные параметры.

Общим методом статистического оценивания параметров является метод максимального правдоподобия, который при предположении нормального распределения ошибок измерений и их независимости сводится к методу наименьших квадратов (МНК) [7].

Тогда в качестве оценки параметра берут оценку МНК, которая минимизирует сумму квадратов отклонений или взвешенную сумму квадратов (относительно дисперсий), так называемый эмпирический риск [8]:

$$Q(a) = \frac{\sum (y_i - f(a, x_i))^2}{\sigma_i^2}, \quad (34)$$

где y — экспериментальные значения зависимой переменной;

$f(a, x_i)$ — значения зависимой переменной, рассчитанные по модели;

x_i — значения независимой переменной;

i — номер опыта.

Когда функция f не линейна по параметрам, сумма квадратов не является строго выпуклой и может иметь не единственный минимум, а несколько и, кроме того, в случае не компактности априорного множества параметров эта оценка может и не существовать, т. е. минимум $Q(a)$ может не достигаться. Известно [9], что для того чтобы убедиться, что оценка МНК существует, необходимо определить для данной нелинейной функции нижнюю грань суммы квадратов на бесконечности:

$$\bar{Q} = \lim_{r \rightarrow \infty} \inf_{\|a\| > r} Q(a). \quad (35)$$

Если начальное приближение a выбрать так, что $Q(a) < \bar{Q}$, то оценка МНК существует и более того, множество $S = \{a \in R^m : Q(a) < \bar{Q}\}$ является компактом, что гарантирует ограниченность последовательности a , вырабатываемой любым итерационным методом поиска экстремума и, следовательно ее сходимости, причем оценка МНК тоже принадлежит этому множеству.

Характеристикой качества оценивания служат стандартные ошибки оценок МНК:

$$S_j = S \sqrt{(P^T P)^{-1}_{jj}}, \quad j = 1, \dots, m, \quad (36)$$

где S — стандартная ошибка уравнения ($S^2 = \frac{Q_{min}}{(n-m)}$);

P — матрица производных, соответствующая оценке

$$(P_{ij} = \frac{\partial f_i(a)}{\partial a_j});$$

n — число опытов;

m — число параметров.

По стандартным ошибкам можно найти стандартные отношения $t_j = a_j/S_j$ (подобно t -статистикам для линейных функций). Для нелинейного оценивания применение статистического анализа, основанного на этих величинах, не является строгим (также как и использование F -критерия). Обычно [7, 10-11] считают, что если $|t_j| \leq 1$, то параметр a_j — является неустойчивым, а если $|t_j| \geq 2$, то соответствующий параметр оценен устойчиво. Для того чтобы при оценивании определить глобальный минимум, а не локальный, необходимо использовать соответствующие методы поиска и кроме того повторять вычисления из различных начальных точек, что в случае сходимости к одной и той же точке повышает вероятность определения глобального минимума. Одним из наиболее надежных и эффективных методов является метод оврагов [12], который позволяет определять экстремум при наличии областей очень медленного изменения функции (оврагов) и точно находить оценки параметров, варьирование которых слабо влияет на изменение суммы квадратов и тем самым обходить области, близкие к локальным экстремумам. Оценивание параметров математической модели производилось по уравнениям (21) и (30) методом минимизации эмпирического риска. Ошибку измерения в каждом опыте определяли как среднеквадратическое отклонение от среднего значения в каждой серии. Поиск минимума (34) осуществлялся методом оврагов. Для приближенного вычисления интегралов (21) и (30) можно использовать квадратурную формулу Ромберга [13], основанную на экстраполяции Ричардсона [14] и позволяющая вычислять значение интеграла с величиной максимальной погрешности меньше заданной. В результате были получены следующие значения параметров:

$$b = 1.29 \pm 0.22$$

$$a = 1.18 \pm 0.52$$

Результаты оценивания свидетельствуют, что учет изменения размеров капли в процессе гранулирования в структуре математической модели обеспечивает удовлетворительную аппроксимацию экспериментальных кинетических зависимостей.

В заключении отмечается, что предложенная математическая модель адекватно отражает проведение процесса грануляции минеральных удобрений в соответствии с поставленной целью — (получение гранул заданного размера (удельной поверхности) и обладающих прочностью выше минимально допустимой). По созданной математической модели можно прогнозировать значения этих показателей, при ограничении по времени гранулирования $T < T_{max}$ которые затем используются в инженерных расчетах процессов гранулирования органических и минеральных удобрений в сельском хозяйстве.

Список источников

1. М.Б. Генералов и др. Расчет оборудования для гранулирования минеральных удобрений. М.: Машиностроение, 1984, 192 с.
2. Кафаров В.В., Глебов М.Б. Математическое моделирование основных процессов химических производств. М.: Высшая школа, 1991, 399 с.
3. Панченков Г.М., Лебедев В.П. Химическая кинетика и катализ. М., Химия, 1974, 594 с.
4. Кафаров В.В., Бабанов Б.М. Поверхность фазового контакта взаимонерастворимых жидкостей. ЖПХ, 1959, вып. 4. с.789-796.
5. Лаговьер Ю.В., Устинова Л.И. Пористость и прочность гранул, получаемых из тонкодисперсных порошков методом смешения. ЖПХ, 1979, вып.4, с. 1971-1975.
6. Грибняк Т.Т. и др. О локальных амплитудах колебаний частиц сыпучей массы в процессе вибрационной обработки. ТОХТ, 1972, т. 6, № 1 С. 94- 100.
7. Бард И. Нелинейное оценивание параметров. М.: Статистика. 1979, 441 с.
8. Вапник В.Н. Алгоритмы и программы восстановления зависимостей. М.: Наука. 1984. 816 с.
9. Демиденко И.З. Критерии существования оценки метода наименьших квадратов в некоторых нелинейных регрессиях // Экономика и математические методы, 1982, т. 28, № 1, с. 115-117.
10. Демиденко И.З. Вычислительные вопросы нелинейной регрессии // Заводская лаборатория, 1986, № 3, с. 51-54.
11. Демиденко И.З. Линейная и нелинейная регрессия. М.: Финансы и статистика. 1981, 382 с.
12. Гельфанд И.М. Метод оврагов в задачах рентгеноструктурного анализа. М.: Наука, 1966, 76 с.
13. Бахвалов Н.С. Численные методы. М., 1975
14. Марчук Г.И. Шайдулов В.В. Повышение точности решений разностных схем. М., 1979
15. Высоцкая Н.А., Францевич В.С. Моделирование процесса получения комплексных удобрений методом окатывания и проведение испытаний по их получению в лабораторных условиях // Горная механика и машиностроение. 2024. № 1. с. 77-88.
16. Высоцкая Н.А., Францевич В.С., Дубовский А.А., Салцевич В.В. Гранулирование методом окатывания на движущейся поверхности // Горная механика и машиностроение. 2023. № 1. с. 88-94.
17. Макаренков Д.А., Назаров В.И. Особенности механизма гранулообразования ферментных препаратов // Вестник МГОУ. Серия Естественные науки. 2013. № 4
18. Сковородников П.В., Черепанова М.В. Особенности процесса гранулирования органоминеральных удобрений методом окатывания // Известия Томского Политехнического университета. Инжиниринг георесурсов. 2019. Т. 330. № 51-59.

References

1. M.B. Generalov et al. (1984). Calculation of equipment for granulating mineral fertilizers, Moscow, Mechanical Engineering, 192 p.
2. Kafarov V.V., Glebov M.B. (1991). Mathematical modeling of the main processes of chemical production, Moscow, Higher.school, 399 p.
3. Panchenkov G.M., Lebedev V.P. (1974). Chemical kinetics and catalysis, Moscow, Chemistry, 594 p.
4. Kafarov V.V., Babanov B.M. (1959). The surface of phase contact of mutually insoluble liquids. Housing and Communal Services, vol. 4, pp.789-796.
5. Lagovier Yu.V., Ustinova L.I. (1979). Porosity and strength of granules obtained from fine powders by mixing. Housing and Communal Services, vol. 4, pp.1971-1975.
6. Gribyak T.T. et al. (1972). On the local oscillation amplitudes of bulk particles in the process of vibration treatment. TOXT, vol. 6, no. 1, pp. 94-100.
7. Bard I. (1979). Nonlinear parameter estimation, Moscow, Statistics, 441 p.
8. Vapnik V.N. (1984). Algorithms and dependency recovery programs. Moscow, Nauka, 816 p.
9. Demidenko I.Z. (1982). Criteria for the existence of an evaluation of the least squares method in some nonlinear regressions. Economics and Mathematical Methods, vol. 28, no. 1, pp. 115-117.





10. Demidenko I.Z. (1986). Computational issues of non-linear regression. *Factory Laboratory*, no.3, pp. 51-54.
 11. Demidenko I.Z. (1981). Linear and nonlinear regression, Moscow, Finance and Statistics, 382 p.
 12. Gelfand I.M. (1966). The ravine method in problems of X-ray diffraction analysis, Moscow, *Nauka*, 76 p.
 13. Bakhvalov N.S. (1975). Numerical methods, Moscow.
 14. Marchuk G.I. Shaidurov V.V. (1979). Improving the accuracy of solutions of difference schemes, Moscow.

15. Vysotskaya N.A., Frantskevich V.S. (2024). Modeling of the process of obtaining complex fertilizers by rolling and conducting tests to obtain them in laboratory conditions. *Mining mechanics and mechanical engineering*, no. 1, pp. 77-88.
 16. Vysotskaya N.A., Frantskevich V.S., Dubovsky A.A., Saltsevich V.V. (2023). Pelletizing by rolling on a moving surface. *Mining mechanics and mechanical engineering*, no. 1, pp. 88-94.

17. Makarenkov D.A., Nazarov V.I. (2023). Features of the mechanism of granulation of enzyme preparations. *Bulletin of the Moscow State University. Series Natural sciences*, no. 4.

18. Skovorodnikov P.V., Cherepanova M.V. (2019). Features of the process of granulation of organomineral fertilizers by the pelletizing method. *Bulletin of Tomsk Polytechnic University, Engineering of georesources*, vol. 330, no. 51-59.

Информация об авторах:

Папаскири Тимур Валикович, кандидат сельскохозяйственных наук, доктор экономических наук, профессор, врио ректора, заведующий кафедрой цифрового земледелия и ландшафтной архитектуры, ORCID: <http://orcid.org/0000-0002-3780-9060>, t_papaskiri@mail.ru

Саранчин Владимир Кимович, кандидат технических наук, доцент кафедры высшей математики, физики и информатики, ORCID: <http://orcid.org/0000-0003-3417-7501>, saranchin@yandex.ru

Суслов Сергей Владимирович, кандидат географических наук, доцент кафедры цифрового земледелия и ландшафтной архитектуры, ORCID: <http://orcid.org/0000-0001-7286-042X>, sus2014.sus@yandex.ru

Климов Александр Петрович, кандидат технических наук, доцент кафедры высшей математики, физики и информатики, Государственный университет по землеустройству, alpetkl@yandex.ru

Кривошея Богдан Сергеевич, старший преподаватель кафедры высшей математики, физики и информатики, Государственный университет по землеустройству, bodyakr@yandex.ru

Information about the author (authors):

Timur V. Papaskiri, candidate of agricultural sciences, doctor of economic sciences, professor, acting rector, head of the department of digital agriculture and landscape architecture, ORCID: <http://orcid.org/0000-0002-3780-9060>, t_papaskiri@mail.ru

Vladimir K. Saranchin, candidate of technical sciences, associate professor of the department of higher mathematics, physics and computer science, ORCID: <http://orcid.org/0000-0003-3417-7501>, saranchin@yandex.ru

Sergey V. Suslov, candidate of geographical sciences, associate professor, associate professor of the department of digital agriculture and landscape architecture, ORCID: <http://orcid.org/0000-0001-7286-042X>, sus2014.sus@yandex.ru

Alexander P. Klimov, candidate of technical sciences, associate professor of the department of higher mathematics, physics and computer science, alpetkl@yandex.ru

Bogdan S. Krivosheya, senior lecturer at the department of higher mathematics, physics and computer science, bodyakr@yandex.ru

✉ saranchin@yandex.ru

РЕКЛАМА 0+

СИБИРСКАЯ АГРАРНАЯ НЕДЕЛЯ
Международная агропромышленная выставка

6 - 8 НОЯБРЯ 2024

РАЗДЕЛЫ ВЫСТАВКИ:

- Сельхозтехника / Запчасти / Расходные материалы
- Оборудование и материалы для животноводства
- Агрохимия / Удобрения / Семена
- Оборудование и материалы для переработки агропромышленной продукции

ПРИМИТЕ УЧАСТИЕ В ВЕДУЩЕМ ОТРАСЛЕВОМ СОБЫТИИ СИБИРИ И ДАЛЬНЕГО ВОСТОКА!

sibagroweek.ru

📍 @sibagroweek

📍 sibagroweek

☎ +7 (383) 304-83-88

🔥 СИБИРСКАЯ ВЫСТАВОЧНАЯ КОМПАНИЯ

📍 НОВОСИБИРСК ЭКСПО ЦЕНТР