

Методический подход к исследованию магнитного взаимодействия тонкодисперсных частиц в водной суспензии методом компьютерного моделирования

С.П. Остапенко, А.С. Опалев ✉

Горный институт Кольского научного центра Российской академии наук, г. Апатиты, Российская Федерация
✉ a.opalev@ksc.ru

Резюме: Повышение эффективности горного производства обуславливает актуальность исследования свойств тонкодисперсных частиц минералов для их извлечения и снижения загрязнения природной среды. Разработка подходов к изучению магнитного взаимодействия тонкодисперсных частиц имеет научно-практическое значение и связана со сложностью расчета суперпозиции их полей при решении задачи управления магнитными свойствами суспензии. Для прогнозирования магнитных свойств суспензии на примере магнетита месторождений Заимандровского железорудного района разработана компьютерная модель динамики взаимодействия магнитных частиц, учитывающая их агрегацию под влиянием магнитного диполь-дипольного взаимодействия и разрушения агрегатов при тепловом (броуновском) движении. Расчетом показано, что электростатическое и дисперсионные взаимодействия не оказывают существенного влияния на динамику взаимодействия микронных и субмикронных частиц магнетита с учетом измеренных экспериментально дзета-потенциала и константы Гамакера.

Разработана процедура калибровки компьютерной модели динамики взаимодействия магнитных частиц с использованием температурной зависимости коэффициента трансляционной диффузии частиц магнетита и концентрационной зависимости магнитной восприимчивости суспензии. Сформирован массив расчетных значений коэффициента диффузии модельных частиц и начальной магнитной восприимчивости их системы в широком диапазоне изменения параметров компьютерной модели. Разработана процедура увязки расчетных и экспериментальных данных варьированием нормировочных параметров размера частиц, вязкости среды, тепловой энергии для минимизации расхождения значений. Установлена необходимость учета изменения магнитных свойств с уменьшением размера частиц магнетита при калибровке магнитной восприимчивости модельной системы.

Разработанный методический подход обеспечивает хорошую сходимость расчетных и экспериментальных данных и позволяет визуализировать агрегацию модельных частиц в результате их магнитного диполь-дипольного взаимодействия. Разработанная компьютерная модель динамики взаимодействия магнитных частиц может быть применена для изучения воздействия внешнего магнитного поля на агрегационную способность тонких частиц магнетита с целью управления их извлечением в сепарационных процессах.

Ключевые слова: железные руды, магнетит, тонкодисперсные частицы, суспензия, агрегация, модель компьютерная динамическая, имитационная модель, коэффициент диффузии, магнитная восприимчивость, константа Гамакера, дзета-потенциал

Благодарности: Работа выполнена в рамках госзадания №FMEZ-2022-0003 «Развитие физических, физико-химических и цифровых основ разработки и промышленной адаптации эффективных технологий обогащения различных видов минерального сырья».

Для цитирования: Остапенко С.П., Опалев А.С. Методический подход к исследованию магнитного взаимодействия тонкодисперсных частиц в водной суспензии методом компьютерного моделирования. *Горная промышленность*. 2023;(5S):142–149. <https://doi.org/10.30686/1609-9192-2023-5S-142-149>

Methodical approach to studies of magnetic interaction of fine particles in an aqueous suspension using computer simulation

S.P. Ostapenko, A.S. Opalev ✉

Mining Institute of the Kola Science Centre of the Russian Academy of Science; Apatity, Russian Federation
✉ a.opalev@ksc.ru

Abstract: The need to increase the efficiency of mining operations determines the relevance of studying the properties of fine mineral particles for their extraction and reduction of environmental pollution. The development of approaches to studying magnetic interaction of fine particles is of scientific and practical importance and is associated with the complexity of calculating

the superposition of their fields when solving the problem of controlling the magnetic properties of a suspension. A computer model of the dynamics of magnetic particle interaction was developed with account for their aggregation under the impact of the magnetic dipole-dipole interaction and the destruction of aggregates during thermal (Brownian) motion in order to predict the magnetic properties of the suspension using the example of magnetite deposits of the Zaimandrovsky iron ore region. The calculation shows that the electrostatic and dispersion interactions do not have a significant effect on the interaction dynamics of micron and submicron particles of magnetite with account of the experimentally measured zeta potential and the Hamaker's constant.

A procedure has been developed for calibrating a computer model of the interaction dynamics of magnetic particles using the temperature dependence of the coefficient of translational diffusion of magnetite particles and the concentration dependence of the magnetic susceptibility of a suspension. An array of calculated values of the diffusion coefficient of the model particles and the initial magnetic susceptibility of their system is formed in a wide range of computer model parameters. A procedure has been developed for linking the calculated and experimental data by varying the normalization parameters of the particle size, viscosity of the medium, and thermal energy in order to minimize the maximum discrepancy between the values. The necessity is established of taking into account the change in magnetic properties with a decrease in the size of magnetite particles during the calibration of the magnetic susceptibility of a model system.

The developed methodological approach ensures good convergence of the calculated and experimental data and makes it possible to visualize the aggregation of the model particles as the result of dipole-dipole interactions. The developed computer model of the interaction dynamics of magnetic particles can be used to study the effect of an external magnetic field on the aggregation ability of fine magnetite particles in order to control their extraction in separation processes.

Keywords: iron ores, magnetite, fine particles, suspension, aggregation, computer dynamic model, simulation model, diffusion coefficient, magnetic susceptibility, Hamaker constant, zeta potential

Acknowledgments: The work was carried out within the framework of the State Assignment No. FMEZ-2022-0003 "Development of physical, physicochemical and digital bases for the development and industrial adaptation of effective technologies for processing of various types of mineral raw materials".

For citation: Ostapenko S.P., Opalev A.S. Methodical approach to studies of magnetic interaction of fine particles in an aqueous suspension using computer simulation. *Russian Mining Industry*. 2023;(5S):142–149. <https://doi.org/10.30686/1609-9192-2023-5S-142-149>

Введение

Образование частиц магнетита микронного и субмикронного размера неизбежно сопровождает процессы переработки железных руд, что обуславливает актуальность исследования свойств тонкодисперсных отходов горного производства с целью их выделения, снижения загрязнения природной среды и воздействия на человека [1; 2]. Изучение магнитного взаимодействия тонкодисперсных частиц магнетита представляет теоретический и практический интерес ввиду значительного объема отходов переработки железных руд [3; 4]. Однако прогнозирование структурообразования при магнитном взаимодействии частиц до сих пор остается нерешенной задачей из-за сложной конфигурации результирующего магнитного поля, что обусловлено его дальностью действия [5]. В связи с невозможностью аналитического описания суперпозиции полей системы магнитных частиц представляется перспективным применение методов расчетного моделирования их динамики, что соответствует современному подходу к компьютеризации исследований [6; 7].

В настоящее время только программные пакеты моделирования молекулярной динамики могут обеспечить расчет магнитного взаимодействия в суспензии численным решением системы уравнений движения частиц с временным шагом меньшим, чем интервал между их соударениями [8; 9]. Вместе с тем расчет молекулярной динамики имеет ряд особенностей, требующих учета при моделировании движения тонкодисперсных частиц минералов. Во-первых, при расчетах по умолчанию принимается сферическая форма и определенный размер модельных частиц,

что малоприменимо к тонкодисперсным частицам отходов горного производства, для которых характерно непрерывное распределение по форме и по размеру. Во-вторых, моделирование молекулярной динамики определяет фундаментальную роль теплового (броуновского) движения, что накладывает ограничение на размер модельных частиц. Третьей особенностью программной реализации моделей молекулярной динамики является нормировка времени, массы, размера, энергии взаимодействия, температуры, что связано с обеспечением устойчивости и максимальной производительности вычислительного процесса, но представляет проблему при задании параметров модели, соответствующих суспензии минеральных частиц. Таким образом, применение методов молекулярной динамики для компьютерного моделирования суспензии определяет необходимость калибровки расчетной модели экспериментальными данными.

Известные подходы к калибровке компьютерных моделей основываются на сравнении прогнозных и экспериментальных результатов и уточнении параметров модели для уменьшения различия. Процедура калибровки модели может быть реализована планом с заранее определенным числом проводимых экспериментов или итеративной последовательностью сравнения прогнозных и экспериментальных значений [10; 11]. Применительно к компьютерным моделям молекулярной динамики критерием выбора процедуры калибровки является продолжительность вычислительного эксперимента, что связано с большим объемом расчетов парного взаимодействия частиц. Поскольку итеративный подход к калибровке характеризуется не-

предсказуемостью шагов, для контроля продолжительности вычислений при компьютерном моделировании представляется уместным планирование оптимальных экспериментов. Однако из-за сложности математического описания взаимодействия тонкодисперсных частиц минералов в суспензии оптимизация планов эксперимента проблематична, что обуславливает необходимость разработки новых подходов к калибровке компьютерных моделей.

Предлагаемый методический подход к исследованию магнитного взаимодействия тонкодисперсных частиц предполагает поэтапную разработку компьютерной модели на примере суспензии магнетита. На первом этапе определяются необходимые для построения адекватной модели потенциалы взаимодействия частиц. С этой целью исследуется баланс сил взаимодействия тонкодисперсных частиц магнетита в суспензии, причем помимо магнитной учитывается действие кулоновской электростатической и ван-дер-ваальс-лондоновских дисперсионных сил за счет параметризации парного взаимодействия намагниченностью, электростатическим потенциалом поверхности, константой Гамакера частиц [12; 13]. На втором этапе разработки компьютерной модели динамики магнитных частиц выполняется калибровка базовых модельных параметров – размера, вязкости среды, температуры – по температурной зависимости коэффициента трансляционной диффузии тонкодисперсных частиц магнетита. На заключительном этапе выполняется калибровка магнитных свойств модельных частиц по экспериментальной зависимости магнитной восприимчивости суспензии магнетита от концентрации, что определяет компьютерную модель динамики магнитных частиц как модель суспензии тонкодисперсных частиц магнетита.

Объект исследований и пробоподготовка

Разработка компьютерной модели динамики магнитных частиц проводилась на примере магнетита месторождений Заимандровского железорудного района (Мурманская область). В качестве исходного продукта использована фракция магнетитового концентрата крупностью $-25+17$ мкм с содержанием железа 72%. Для определения константы Гамакера магнетита из руд месторождений, разрабатываемых предприятиями Колского горнопромышленного комплекса, отбирались образцы нефелина, кварца, гематита, пирита. Исходные образцы минералов измельчались в планетарной мельнице Fritsch Pulverisette 7 premium line (Fritsch GmbH., Германия) в размольных стаканах с футеровкой из оксида циркония с использованием дистиллированной воды без добавления реагентов. Выделение образцов тонкодисперсных частиц минералов узких фракций крупности проводилось седиментационным методом в центробежном поле с использованием лабораторной центрифуги. Гранулометрический состав суспензий анализировался методом лазерной дифракции на приборе Fritsch Analysette 22 (Fritsch GmbH., Германия) в приближении Фраунгофера.

Методы исследования

На первом этапе разработки компьютерной модели динамики магнитных частиц для изучения баланса сил взаимодействия определялись физико-химические параметры частиц магнетита в суспензии.

Определение коэффициента трансляционной диффузии частиц магнетита выполнялось методом динамического

рассеяния света (фотонной корреляционной спектроскопии) на установке «Фотокор Compact Z» (ООО «Фотокор», Москва), снабженной лазером с длиной волны 637,5 нм мощностью 25 мВт. Коэффициент трансляционной диффузии частиц магнетита и связанный с ним пропорционально гидродинамический диаметр рассчитывались с использованием программного обеспечения прибора по распределению скоростей броуновского движения на основе регистрируемых флуктуаций интенсивности лазерного излучения, рассеянного суспензией под углами 90 и 160 град. Дзета-потенциал поверхности частиц измерялся на этой же установке методом динамического рассеяния света в режиме измерения скорости потока по скорости движения частиц магнетита в наложенном электрическом поле.

Для параметризации дисперсионных взаимодействий частиц магнетита применялся разработанный ранее подход экспериментально-расчетной оценки эффективных констант Гамакера по агрегации тонкодисперсных частиц в равновесных условиях [14]. Исследовалась степень заполнения поверхности частиц нефелина, кварца, гематита, пирита размером от 15 до 80 мкм частицами магнетита размером 1 мкм методом лазерной дифракции на 4 двухкомпонентных системах. Поиск согласованной оценки константы Гамакера магнетита проводился по массиву данных, полученных при исследовании агрегации в двухкомпонентных системах, минимизацией квадрата разности расчетных и экспериментальных оценок.

На втором этапе разработки компьютерной модели динамики магнитных частиц для расчета магнитного взаимодействия тонкодисперсных частиц в суспензии использован программный пакет молекулярной динамики ESPResSo (Институт вычислительной физики, Штутгартский государственный университет, Германия) [9]. При параметризации и калибровке модели учитывался результат расчета баланса сил, действующих между частицами магнетита в суспензии.

Для калибровки компьютерной модели динамики магнитных частиц на третьем этапе разработки определялась магнитная восприимчивость суспензий тонкодисперсных частиц магнетита разной крупности на приборе MS3 с датчиком MS2G (Bartington Instruments, Великобритания). Прибор калибровался с использованием растворов солей кобальта, никеля, железа с концентрацией 0,5 моль/кг. Измерения магнитной восприимчивости суспензий магнетита проводились в пластиковой виае объемом 1 см³ после размагничивания образцов в переменном магнитном поле с частотой 50 Гц. При расчете магнитной восприимчивости суспензий магнетита учитывался аддитивный вклад в результат измерений материала вials и водной среды.

Статистическая обработка результатов и калибровка компьютерной модели динамики магнитных частиц проводилась с использованием программного пакета статистических расчетов R (R Development Core Team, R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria).

Исследование баланса взаимодействий между частицами в суспензии

На первом этапе разработки компьютерной модели с использованием системы уравнений рассчитывался баланс взаимодействий между двумя частицами магнетита в суспензии при расстоянии между их центрами, равном удвоенному диаметру:

$$\left\{ \begin{aligned} u_{m1}(\vec{m}, L) &= \frac{\mu_0}{16\pi} \frac{m^2}{L^5} \\ u_{m2}(\vec{m}, L) &= \frac{\mu_0}{32\pi} \frac{m^2}{L^5} \\ u_d &= \frac{A_H a}{12L} \\ u_q &= \pi a \varepsilon \varepsilon_0 \psi^2 e \sqrt{\frac{\varepsilon \varepsilon_0 k_B T N_A}{2F^2 I}} \\ u_B &= \frac{3}{2} k_B T \\ L &= 2a \end{aligned} \right. \quad (1)$$

где u_{m1} , u_{m2} – энергия магнитного диполь-дипольного притяжения частиц магнетита в последовательной и антипараллельной конфигурации магнитных моментов соответственно; u_d – энергия дисперсионных взаимодействий частиц магнетита; u_q – энергия электростатического взаимодействия частиц магнетита; u_B – оценка средней кинетической энергии частицы магнетита, обусловленной тепловым движением молекул среды; \vec{m} – магнитный дипольный момент (намагниченность) частицы магнетита; A_H – константа Гамакера системы «частица магнетита-водная прослойка-частица магнетита»; ψ – дзета-потенциал поверхности частиц магнетита; I – ионная сила раствора; μ_0 – магнитная постоянная; ε_0 – диэлектрическая постоянная вакуума; ε – относительная диэлектрическая проницаемость воды; k_B – постоянная Больцмана; N_A – число Авогадро; T – температура; F – постоянная Фарадея; L – расстояние между центрами частиц магнетита; a – размер частицы магнетита.

При расчете магнитного взаимодействия рассматривались последовательная и антипараллельная ориентации магнитных дипольных моментов частиц, соответствующие глобальному и локальному максимуму притяжения. Оценка намагниченности частиц проводилась по литературным данным о зависимости магнитных свойств от размера тонкодисперсных частиц магнетита, обусловленной их доменной структурой [15]. Расчет энергии электростатического отталкивания и дисперсионных взаимодействий притяжения проводился с использованием экспериментальных данных о дзета-потенциале поверхности магнетита –15 мВ и константе Гамакера системы «магнетит-водная прослойка-магнетит» 11 зептоДж. Радиус экранирования Дебая при расчетах электростатического взаимодействия частиц магнетита рассчитывался для разбавленного раствора с ионной силой 0,001 моль/кг, что в случае одновалентного электролита, например NaCl, соответствует содержанию 60 мг/дм³. Средняя кинетическая энергия частицы магнетита, обусловленная тепловым движением молекул воды, оценивалась при температуре среды 298 К.

Расчетом установлено, что притяжение тонкодисперсных частиц магнетита, обусловленное магнитным диполь-дипольным взаимодействием, превышает энергию теплового (броуновского) движения при размере частиц более 0,6 мкм (рис. 1, А).

Наименьшее влияние на взаимодействие частиц на расстояниях сравнимых с их размером оказывает электро-

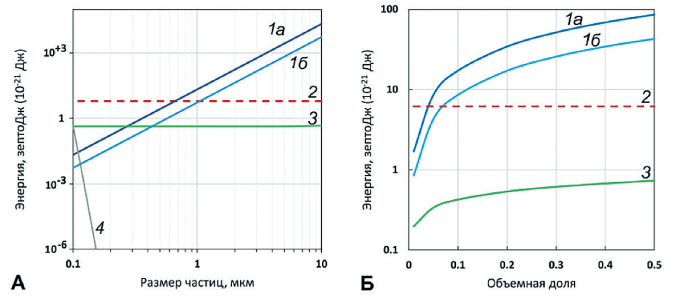


Рис. 1
Зависимость энергии взаимодействия частиц магнетита от их размера при объемной доле в суспензии 0,1 (А), от объемной доли частиц размером 1 мкм (Б): 1 – магнитная диполь-дипольная при последовательной (а) и антипараллельной (б) ориентации частиц; 2 – тепловая; 3 – дисперсионная; 4 – электростатическая

Fig. 1
A dependence of the interaction energy of magnetite particles on their size at the volume fraction in the suspension of 0,1 (А), and on the volume fraction of 1- μ m particles (Б): 1 – a magnetic dipole-dipole at consecutive (а) and antiparallel (б) orientation of particles, 2 – thermal, 3 – dispersion, 4 – electrostatic

статическая кулоновская сила, что обусловлено малым потенциалом поверхности частиц магнетита (–15 мВ) и экранированием электростатического заряда поверхности двойным электрическим слоем. Ван-дер-ваальс-лондоновское взаимодействие из-за быстрого затухания дисперсионных сил вносит заметный вклад в баланс на малых расстояниях, то есть для частиц магнетита размером менее 0,4 мкм. Из рис. 1, А следует, что за счет магнитного взаимодействия для суспензии частиц магнетита крупнее 1 мкм характерно образование структур, устойчивых к тепловому (броуновскому) движению.

Склонность к структурированию суспензии частиц магнетита увеличивается с ростом концентрации (на примере частиц размером 1 мкм, рис. 1Б). Баланс действующих между частицами магнетита сил определяется магнитным взаимодействием из-за незначительного по сравнению с магнитной силой увеличения дисперсионных сил притяжения и силы электростатического отталкивания при сближении частиц с возрастанием концентрации суспензии. Следует отметить уменьшение структурированности суспензии при ее концентрации менее 0,05 (рис. 1, Б), что обусловлено преобладанием кинетической энергии теплового движения над магнитным притяжением с увеличением расстояния между частицами магнетита до трехкратного превышения их размера.

В соответствии с результатом исследования баланса сил в компьютерной модели динамики магнитных частиц предусматривался расчет двух типов взаимодействия: магнитного диполь-дипольного и стерического, этим определялся минимальный размер частиц 0,4 мкм в качестве границы применимости модели для магнетита.

Моделирование динамики магнитных частиц

Расчет взаимодействия магнитных частиц с учетом диполь-дипольного магнитного взаимодействия и стерического отталкивания проводился в соответствии с системой уравнений, реализованных в программном комплексе ESPResSo:

$$\begin{cases} u_m(\vec{r}_{ij}, \vec{m}_i, \vec{m}_j) = \frac{\mu_0}{4\pi} \left(\frac{\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j}{r_{ij}^3} - 3 \frac{(\vec{m}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{m}_j \cdot \vec{r}_{ij})}{r_{ij}^5} \right) \\ u_s(r_{ij}) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] + \varepsilon \\ u(\vec{r}_{ij}, \vec{m}_i, \vec{m}_j) = u_m(\vec{r}_{ij}, \vec{m}_i, \vec{m}_j) + u_s(r_{ij}) \end{cases} \quad (2)$$

где u_m – потенциал (энергия) магнитного диполь-дипольного взаимодействия i -й и j -й частиц; u_s – потенциал (энергия) стерического отталкивания при сближении i -й и j -й частиц; \vec{r}_{ij} – разность радиус-векторов частиц, то есть вектор, соединяющий точечные магнитные диполи; \vec{m}_i, \vec{m}_j – магнитный дипольный момент i -й и j -й частиц; σ – расстояние между частицами, характеризующее радиус действия сил стерического отталкивания; ε – энергия стерического отталкивания частиц, характеризующая интенсивность взаимодействия; остальные обозначения, как в системе уравнений (1).

Модельная система включала 500 частиц, концентрация частиц задавалась их объемной долей. Броуновское движение имитировалось с помощью термостата Ланжевена, обеспечивающего поддержание заданной температуры модельной системы. В ходе вычислительных экспериментов определялись траектория, скорость движения частиц, ориентация их магнитных диполей, которые использовались для расчета коэффициента диффузии и магнитной восприимчивости.

Для определения коэффициента трансляционной диффузии по данным моделирования движения частиц применялась формула Эйнштейна–Смолуховского для среднеквадратичного смещения частицы от времени:

$$\langle (\overline{r(t)})^2 \rangle = 6Dt \quad (3)$$

где $\overline{r(t)}$ – зависимость от времени вектора смещения частицы от исходного положения; t – время наблюдения; D – коэффициент трансляционной диффузии. Коэффициент диффузии определялся по углу наклона линеаризованной зависимости среднеквадратичного смещения частицы от времени, при этом из рассмотрения исключался начальный (баллистический) участок зависимости, соответствующий движению частиц без столкновений. Выход на линейный участок зависимости среднеквадратического смещения частицы от времени, соответствующий режиму случайного столкновения частиц, рассматривался в качестве критерия диффузионного равновесия в модельной суспензии.

Магнитная восприимчивость модельной суспензии в отсутствие внешнего магнитного поля рассчитывалась по уравнению, предложенному в работе [16]:

$$\chi_{init} = \frac{\mu_0}{3k_B T V} \left(\langle \mu^2 \rangle - \langle \mu \rangle^2 \right) \quad (4)$$

где χ_{init} – начальная магнитная восприимчивость модельной суспензии; μ_0 – магнитная постоянная; μ – маг-

нитный дипольный момент модельной системы; k_B – постоянная Больцмана; T – температура; V – объем модельной системы.

Линейность зависимости начальной магнитной восприимчивости от концентрации и стационарность диффузии частиц использовались для контроля образования кластеров. Замедленное достижение равновесного состояния модельной системы в этом случае компенсировалось увеличением продолжительности расчетов.

Калибровка компьютерной модели и обсуждение результатов

Для проведения калибровки формировался массив данных, состоящий из 10^3 значений магнитной восприимчивости и 10^5 значений коэффициента диффузии, полученных в результате вычислительных экспериментов. Диапазон нормированных параметров компьютерной модели динамики магнитных частиц задавался в широком интервале изменения объемной доли частиц 0,02–0,5, температуры 0,1–100, параметра Ланжевена (отношения магнитного момента к энергии теплового движения частицы) 0,1–24000, коэффициента трения (параметра термостата Ланжевена, характеризующего вязкость среды) 0,1–10. Представительность данных обеспечивалась изменением начального положения и скорости модельных частиц в повторных вычислительных экспериментах.

В основу калибровки компьютерной модели динамики магнитных частиц экспериментальными данными положена пропорциональность базовых параметров модели: размера модельных и тонкодисперсных частиц магнетита, коэффициента трения модельных частиц и вязкости среды, модельной и экспериментальной температуры, определяющих коэффициент трансляционной диффузии, в соответствии с системой уравнений:

$$\begin{cases} D(a, \eta, T) = \frac{k_B T}{3\pi\eta a} \\ a^{sim} = c_1 \cdot a^{exp} \\ \gamma^{sim} = c_2 \cdot \eta^{exp} \\ T^{sim} = c_3 \cdot T^{exp} \\ \{c_1, c_2, c_3\} = \arg \min \left(\left(D^{sim}(c_1 \cdot a^{exp}, c_2 \cdot \eta^{exp}, c_3 \cdot T^{exp}) - D^{exp}(a^{exp}, \eta^{exp}, T^{exp}) \right)^2 \right) \end{cases} \quad (5)$$

где $D(a, \eta, T)$ – зависимость коэффициента диффузии от размера частицы, вязкости и температуры среды, установленная формулой Стокса–Эйнштейна; D^{sim}, D^{exp} – модельный и экспериментальный коэффициенты трансляционной диффузии; a^{sim}, a^{exp} – модельный и экспериментальный размер частиц; γ^{sim}, η^{exp} – коэффициент трения модельных частиц и вязкость воды; T^{sim}, T^{exp} – температуры модельная и экспериментальная; c_1, c_2, c_3 – коэффициенты, минимизирующие различие модельного и экспериментального коэффициента трансляционной диффузии частиц; остальные обозначения, как в системе уравнений (1).

Калибровка магнитных свойств модельных частиц проводилась учетом экспериментальной зависимости магнитной восприимчивости от объемной доли магнетита в суспензии с использованием соотношения магнитной восприимчивости и параметра Ланжевена, предложенного в работе [16], поиском минимальной невязки по системе уравнений:

$$\begin{cases} \chi_{init}(\lambda, \phi) \approx \frac{N}{V} \cdot \frac{\mu_0 m^2}{3k_B T} = 8\lambda\phi \\ \{\lambda\} = \arg \min \left(\left(\chi^{sim.}(\lambda, \phi^{exp.}) - \chi^{exp.}(\phi^{exp.}) \right)^2 \right) \end{cases} \quad (6)$$

где $\chi_{init}(\lambda, \phi)$ – зависимость начальной магнитной восприимчивости от параметра Ланжевена и объемной доли магнитных частиц в суспензии; $\chi^{sim.}$, $\chi^{exp.}$ – модельная и экспериментальная магнитные восприимчивости суспензии; λ – модельный параметр Ланжевена (отношение магнитного момента к энергии теплового движения частицы); ϕ , $\phi^{exp.}$ – объемная доля соответственно магнитных частиц в модельной системе и магнетита в суспензии; N – количество модельных частиц; V – объем модельной системы, остальные обозначения, как в системе уравнений (1).

Начальная магнитная восприимчивость суспензии, как видно из первого уравнения системы (6), пропорциональна объемной доле частиц и параметру Ланжевена. Однако калибровка линейного масштаба компьютерной модели (коэффициент c_1 в системе уравнений (5)) фиксирует соотношение размеров частицы и модельной системы и, следовательно, объемную долю частиц, поскольку их количество в модельной системе неизменно. В этой связи для подстройки магнитных свойств модельных частиц целесообразно использовать параметр Ланжевена – входную величину при компьютерном моделировании магнитных взаимодействий в программном пакете ESPResSo.

Проверка соответствия прогнозных и экспериментальных значений показала адекватность компьютерной модели динамики магнитных частиц. Погрешность прогноза коэффициента трансляционной диффузии частиц магнетита размером 0,67 и 1,15 мкм в температурном диапазоне от 281 до 333 К, что соответствует диапазону от 8 до 60 °С, не превышала погрешности измерения, выборочный коэффициент вариации составил 4%.

При валидации разработанной компьютерной модели установлено удовлетворительное соответствие прогнозных и экспериментальных значений магнитной восприимчивости суспензии. Выборочный коэффициент вариации для образцов суспензии частиц магнетита размером 0,67 и 1,15 мкм в диапазоне объемной доли соответственно 0–0,025 и 0–0,08 составил 20%, что вдвое превышало погрешность экспериментального измерения. Возможным объяснением такого расхождения является зависимость магнитных свойств магнетита от дисперсности. Следует отметить, что наблюдаемое уменьшение магнитных свойств тонкодисперсных частиц магнетита подтверждается работами [17; 18], но расходится с результатами исследований, приведенными в работе [15]. Для уточнения компьютерной модели динамики магнитных частиц представляется необходимым снять эту неопределенность в дальнейших исследованиях.

Значимым фактором, влияющим на точность прогноза магнитной восприимчивости, является образование кластеров, как видно по распределению модельных частиц в объеме (рис. 2).

Расчеты показывают, что энергия магнитного диполь-дипольного взаимодействия при размере частиц 1 мкм сравнима с энергией теплового движения, что является в самоорганизации частиц с образованием це-

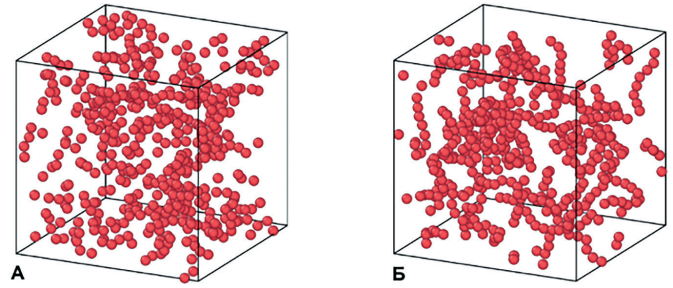


Рис. 2
Распределение в объеме модельных магнитных частиц размером 0,4 мкм (А) и 1 мкм (Б) при объемной доле 0,05, температура 298 К

Fig. 2
Volume distribution of the model magnetic particles of 0.4 μm (A) and 1 μm (B) in size at the volume fraction of 0,05 and the temperature of 298 K

почек (рис. 2, Б). Переход от структурированного к хаотическому состоянию модельной системы, связанный с уменьшением размера частиц до 0,4 мкм, не приводит к равномерному распределению частиц по объему, что свидетельствует о координации их положения действующим магнитным взаимодействием (рис. 2, А). Такая ситуация соответствует переходному состоянию, наблюдаемому в системах с магнитным взаимодействием частиц [16; 19]. Поскольку дальнейшее уменьшение размера модельных частиц требует усложнения модели за счет учета дисперсионных взаимодействий, как это следует из рассмотренного баланса сил, представляется целесообразным использовать для калибровки компьютерной модели тонкодисперсные частицы гематита, характеризующегося меньшей магнитной восприимчивостью, чем магнетит.

Выводы

Разработан методический подход к прогнозированию магнитных свойств суспензии минеральных частиц микронного и субмикронного размера, заключающийся в калибровке динамической компьютерной модели диполь-дипольного магнитного взаимодействия температурной зависимостью коэффициента трансляционной диффузии частиц магнетита и концентрационной зависимостью магнитной восприимчивости суспензии. Разработана компьютерная модель динамики магнитных частиц и выполнена ее калибровка на примере магнетита месторождений Заимандровского железорудного района с учетом экспериментальных данных о коэффициенте трансляционной диффузии, дзета-потенциале поверхности и константе Гамакера частиц. Показана необходимость расширения валидационного базиса компьютерной модели динамики магнитных частиц за счет исследования магнитных свойств тонкодисперсных частиц гематита.

Разработанный методический подход обеспечивает хорошую сходимость расчетных и экспериментальных данных и позволяет визуализировать агрегацию частиц, что может быть использовано при изучении воздействия внешнего магнитного поля на магнитную восприимчивость суспензии с целью извлечения тонкодисперсных частиц магнетита.

Список литературы

1. Александрова Т.Н., Чантурия А.В., Кузнецов В.В. Минералого-технологические особенности и закономерности селективного разрушения железистых кварцитов Михайловского месторождения. *Записки Горного института*. 2022;256:517–526. <https://doi.org/10.31897/PMI.2022.58>
2. Zhang J., Chen Z., Shan D., Wu Y., Zhao Y., Li C. et al. Adverse effects of exposure to fine particles and ultrafine particles in the environment on different organs of organisms. *Journal of Environmental Sciences*. 2024;135:449–473. <https://doi.org/10.1016/j.jes.2022.08.013>
3. Эрикссон М., Лёф А., Лёф О. Обзор мирового рынка железной руды за 2019–2020 годы. *Горная промышленность*. 2021;(1):74–82. <https://doi.org/10.30686/1609-9192-2021-1-74-82>
4. Kalisz S., Kibort K., Mioduska J., Lieder M., Małachowska A. Waste management in the mining industry of metals ores, coal, oil and natural gas – A review. *Journal of Environmental Management*. 2022;304:114239. <https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2021.114239>
5. Anthonys G. Mathematical model to investigate the behaviour of the systems of ferromagnetic particles under the magnetic fields. *Applied Mathematics and Computation*. 2018;320:654–676. <https://doi.org/10.1016/j.amc.2017.09.050>
6. Лукичев С.В. Цифровое прошлое, настоящее и будущее горнодобывающих предприятий. *Горная промышленность*. 2021;(4):73–79. <https://doi.org/10.30686/1609-9192-2021-4-73-79>
7. Ghorbani Y., Zhang S.E., Nwaila G.T., Bourdeau J.E., Safari M., Hadi Hoseinie S. et al. Dry laboratories – Mapping the required instrumentation and infrastructure for online monitoring, analysis, and characterization in the mineral industry. *Minerals Engineering*. 2023;191:107971. <https://doi.org/10.1016/j.mineng.2022.107971>
8. Tranchida J., Plimpton S.J., Thibaut P., Thompson A.P. Massively parallel symplectic algorithm for coupled magnetic spin dynamics and molecular dynamics. *Journal of Computational Physics*. 2018;372:406–425. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2018.06.042>
9. Limbach H.J., Arnold A., Mann B.A., Holm C. ESPResSo – an extensible simulation package for research on soft matter systems. *Computer Physics Communications*. 2006;174(9):704–727. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2005.10.005>
10. Liu X., Wang Q., Wang Y., Dong Q. Review of calibration strategies for discrete element model in quasi-static elastic deformation. *Scientific Reports*. 2023;13:13264. <https://doi.org/10.1038/s41598-023-39446-2>
11. Bu P., Li Y., Zhang X., Wen L., Qiu W. A calibration method of discrete element contact model parameters for bulk materials based on experimental design method. *Powder Technology*. 2023;425:118596. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2023.118596>
12. Guo Y., Tang N., Guo J., Lu L., Li N., Hu T. et al. The aggregation of natural inorganic colloids in aqueous environment: A review. *Chemosphere*. 2023;310:136805. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2022.136805>
13. Filippov A.V., Starov V. Interaction of nanoparticles in electrolyte solutions. *Journal of Physical Chemistry B*. 2023;127(29):6562–6572. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.3c01220>
14. Остапенко С.П., Месяц С.П. Методический подход к характеристике загрязнения природных водоемов по спутниковым данным с учетом агрегации тонкодисперсных отходов переработки минерального сырья. *Горная промышленность*. 2021;(6):110–116. <https://doi.org/10.30686/1609-9192-2021-6-110-116>
15. Dunlop D.J. The rock magnetism of fine particles. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*. 1981;26(1-2):1–26. [https://doi.org/10.1016/0031-9201\(81\)90093-5](https://doi.org/10.1016/0031-9201(81)90093-5)
16. Wang Z., Holm C., Muller H.W. Molecular dynamics study on the equilibrium magnetization properties and structure of ferrofluids. *Physical Review E*. 2002;66(2):021405. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.66.021405>
17. Опалев А.С., Марчевская В.В. Исследование влияния крупности зерен магнетита на магнитную восприимчивость железорудных концентратов. *Физико-технические проблемы разработки полезных ископаемых*. 2023;(1):161–167. <https://doi.org/10.15372/FTPRPI20230115>
18. Kharitonskii P., Bobrov N., Gareev K., Kosterov A., Nikitin A., Ralin A. et al. Magnetic granulometry, frequency-dependent susceptibility and magnetic states of particles of magnetite ore from the Kovdor deposit. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 2022;553:169279. <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2022.169279>
19. Martín-Molina A., Quesada-Pérez M. A review of coarse-grained simulations of nanogel and microgel particles. *Journal of Molecular Liquids*. 2019;280:374–381. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2019.02.030>

References

1. Aleksandrova T.N., Chanturiya A.V., Kuznetsov V.V. Mineralogical and technological features and patterns of selective disintegration of ferruginous quartzites of the Mikhailovskoye deposit. *Journal of Mining Institute*. 2022;256:517–526. <https://doi.org/10.31897/PMI.2022.58>
2. Zhang J., Chen Z., Shan D., Wu Y., Zhao Y., Li C. et al. Adverse effects of exposure to fine particles and ultrafine particles in the environment on different organs of organisms. *Journal of Environmental Sciences*. 2024;135:449–473. <https://doi.org/10.1016/j.jes.2022.08.013>
3. Ericsson M., Löf A., Löf O. Iron ore market report 2019–2020. *Russian Mining Industry*. 2021;(1):74–82. (In Russ.) <https://doi.org/10.30686/1609-9192-2021-1-74-82>
4. Kalisz S., Kibort K., Mioduska J., Lieder M., Małachowska A. Waste management in the mining industry of metals ores, coal, oil and natural gas – A review. *Journal of Environmental Management*. 2022;304:114239. <https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2021.114239>
5. Anthonys G. Mathematical model to investigate the behaviour of the systems of ferromagnetic particles under the magnetic fields. *Applied Mathematics and Computation*. 2018;320:654–676. <https://doi.org/10.1016/j.amc.2017.09.050>
6. Lukichev S.V. Digital past, present, and future of mining industry. *Russian Mining Industry*. 2021;(4):73–79. (In Russ.) <https://doi.org/10.30686/1609-9192-2021-4-73-79>

7. Ghorbani Y., Zhang S.E., Nwaila G.T., Bourdeau J.E., Safari M., Hadi Hoseinie S. et al. Dry laboratories – Mapping the required instrumentation and infrastructure for online monitoring, analysis, and characterization in the mineral industry. *Minerals Engineering*. 2023;191:107971. <https://doi.org/10.1016/j.mineng.2022.107971>
8. Tranchida J., Plimpton S.J., Thibaudeau P., Thompson A.P. Massively parallel symplectic algorithm for coupled magnetic spin dynamics and molecular dynamics. *Journal of Computational Physics*. 2018;372:406–425. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2018.06.042>
9. Limbach H.J., Arnold A., Mann B.A., Holm C. ESPResSo – an extensible simulation package for research on soft matter systems. *Computer Physics Communications*. 2006;174(9):704–727. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2005.10.005>
10. Liu X., Wang Q., Wang Y., Dong Q. Review of calibration strategies for discrete element model in quasi-static elastic deformation. *Scientific Reports*. 2023;13:13264. <https://doi.org/10.1038/s41598-023-39446-2>
11. Bu P., Li Y., Zhang X., Wen L., Qiu W. A calibration method of discrete element contact model parameters for bulk materials based on experimental design method. *Powder Technology*. 2023;425:118596. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2023.118596>
12. Guo Y., Tang N., Guo J., Lu L., Li N., Hu T. et al. The aggregation of natural inorganic colloids in aqueous environment: A review. *Chemosphere*. 2023;310:136805. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2022.136805>
13. Filippov A.V., Starov V. Interaction of nanoparticles in electrolyte solutions. *Journal of Physical Chemistry B*. 2023;127(29):6562–6572. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.3c01220>
14. Ostapenko S.P., Mesyats S.P. Methodological approach to characterizing pollution of natural water bodies using satellite data with account of aggregation of finely dispersed mineral processing waste. *Russian Mining Industry*. 2021;(6):110–116. (In Russ.) <https://doi.org/10.30686/1609-9192-2021-6-110-116>
15. Dunlop D.J. The rock magnetism of fine particles. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*. 1981;26(1-2):1–26. [https://doi.org/10.1016/0031-9201\(81\)90093-5](https://doi.org/10.1016/0031-9201(81)90093-5)
16. Wang Z., Holm C., Muller H.W. Molecular dynamics study on the equilibrium magnetization properties and structure of ferrofluids. *Physical Review E*. 2002;66(2):021405. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.66.021405>
17. Opalev A.S., Marchevskaya V.V. Influence of magnetite grain size on magnetic susceptibility of iron ore concentrates. *Journal of Mining Science*. 2023;59(1):142–147. <https://doi.org/10.1134/S1062739123010155>
18. Kharitonskii P., Bobrov N., Gareev K., Kosterov A., Nikitin A., Ralin A. et al. Magnetic granulometry, frequency-dependent susceptibility and magnetic states of particles of magnetite ore from the Kovdor deposit. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 2022;553:169279. <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2022.169279>
19. Martín-Molina A., Quesada-Pérez M. A review of coarse-grained simulations of nanogel and microgel particles. *Journal of Molecular Liquids*. 2019;280:374–381. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2019.02.030>

Информация об авторах

Остапенко Сергей Павлович – кандидат технических наук, ведущий научный сотрудник, Горный институт Кольского научного центра Российской академии наук, г. Апатиты, Российская Федерация; e-mail: s.ostapenko@ksc.ru

Опалев Александр Сергеевич – кандидат технических наук, заместитель директора, Горный институт Кольского научного центра Российской Академии наук, г. Апатиты, Российская Федерация; e-mail: a.opalev@ksc.ru

Information about the authors

Sergey P. Ostapenko – Cand. Sci. (Eng.), Leading Researcher, Mining Institute Kola Science Centre of the Russian Academy of Science, Apatity, Russian Federation; e-mail: s.ostapenko@ksc.ru

Aleksandr S. Opalev – Cand. Sci. (Eng), Deputy Director of Science, Mining Institute Kola Science Centre of the Russian Academy of Sciences, Apatity, Russian Federation; e-mail: a.opalev@ksc.ru

Информация о статье

Поступила в редакцию: 23.10.2023

Поступила после рецензирования: 22.11.2023

Принята к публикации: 29.11.2023

Article info

Received: 23.10.2023

Revised: 22.11.2023

Accepted: 29.11.2023