

УДК 669.017.3:553.49:004.852

Омурбекова Гулзат Кочкорбаевна,
кандидат технических наук, доцент

**КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ СИНТЕЗА
ТЕХНИЧЕСКОГО КРЕМНИЯ С ПРИМЕНЕНИЕМ АЛГОРИТМОВ
МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ**

Өмүрбекова Гүлзат Кочкорбаевна,
техника илимдердин кандидаты, доцент

**КЫРГЫЗ РЕСПУБЛИКАСЫНДАГЫ КУМ КЕНДЕРИНИН ХИМИЯЛЫК КУРАМЫ ЖАНА
ГРАНУЛОМЕТРИЯСЫНЫН НЕГИЗИНДЕ КРЕМНЕЗЕМДИН ТАЗАЛЫГЫН АЛДЫН АЛА
БОЛЖОЛДООҮЧҮН МАШИНАЛЫК ОКУУ**

Omurbekova Gulzat Kochkorbaevna,
Candidate of Technical Sciences, Associate Professor

**MACHINE LEARNING FOR PREDICTING SILICA PURITY BASED
ON THE CHEMICAL COMPOSITION AND GRANULOMETRY OF SAND
IN THE KYRGYZ REPUBLIC**

*Кыргызско-Узбекский Международный университет им.
Б. Сыдыкова, Ош, Кыргызская Республика*

*Б. Сыдыков ат. Кыргыз-Өзбек Эл аралык университети,
Ош, Кыргыз Республикасы*

*Kyrgyz-Uzbek International University named by B. Sydykov,
Osh, Kyrgyz Republic*

Аннотация. В статье представлены результаты исследования влияния химического состава и гранулометрических характеристик кварцевого сырья различных месторождений Кыргызстана (Таш-Кумыр, Сулюкта, Озгур) на чистоту технического кремния с использованием методов математического моделирования и элементов машинного обучения. Проведён элементный анализ показал существенные различия между месторождениями: содержание SiO_2 в Таш-Кумыре составляет ~94,3 %, тогда как в Сулюкте оно не превышает 85 %, при заметно более высоком уровне Al_2O_3 и других примесей. Разработанная модель сочетает линейное влияние оксидов-примесей (Al_2O_3 , Fe_2O_3 , MgO , CaO , K_2O) и квадратичную зависимость от размера частиц с последующей калибровкой весовых коэффициентов на основе алгоритмов машинного обучения. Моделирование подтвердило, что оптимальный размер фракций (0,05 мм) обеспечивает максимальную чистоту, а отклонения снижают её на 2–5 %. Построенные прогнозные кривые выявили преимущество Таш-Кумырского сырья (до 98 % чистоты). Полученные результаты демонстрируют потенциал интеграции машинного обучения для повышения точности прогнозов и обоснованного выбора месторождений.

Ключевые слова: технический кремний, кварцевый песок, машинное обучение, моделирование, гранулометрия, примеси, прогнозирование.

Аннотация. Бул макалада Кыргызстандын ар кандай кендеринин (Таш-Кумыр, Сүлүктү, Озгур) кварц чийки затынын химиялык курамы менен гранулометриялык өзгөчөлүктөрүнүн техникалык кремнийдин тазалыгына тийгизген таасирин математикалык моделдөө ыкма-

лары жана машиналык окутуунун элементтери аркылуу изилденди. Жүргүзүлгөн элементтик анализ кендердин ортосунда олуттуу айырмачылыктар бар экенин көрсөттү: Таш-Кумыр кварцында SiO_2 үлүшү $\sim 94,3\%$ түзсө, Сүлүктүдө ал 85% дан ашпайт жана кошумча түрдө Al_2O_3 жана башка аралашмалардын деңгээли жогору. Иштелип чыккан модель аралашмалардын оксиддеринин (Al_2O_3 , Fe_2O_3 , MgO , CaO , K_2O) түз таасирин жана бөлүкчөлөрдүн өлчөмүнө болгон квадратикалык көз карандылыкты бириктирип, салмак коэффициенттерин машиналык окутуу алгоритмдеринин негизинде калибрлөө мүмкүнчүлүгүн берет. Моделдөө көрсөткөндөй, бөлүкчөлөрдүн оптималдуу өлчөмү ($0,05\text{ мм}$) эң жогорку тазалыкты камсыз кылат, ал эми четтөөлөр тазалыкты $2\text{--}5\%$ га төмөндөтөт. Прогноздук ийри сызыктар Таш-Көмүр кумунун артыкчылыгын ачып көрсөттү (тазалык 98% га чейин). Алынган натыйжалар машиналык окутууну интеграциялоо аркылуу божомолдордун тактыгын жогорулатуунун жана кендерди негиздүү тандоонун мүмкүнчүлүгүн далилдейт.

Ачкыч сөздөр: техникалык кремний, кварц куму, машиналык окутуу, моделдөө, гранулометрия, аралашмалар, прогноздоо.

Abstract. This article presents the results of a study on the influence of chemical composition and granulometric characteristics of quartz raw materials from various deposits in Kyrgyzstan (Tash-Kumyr, Sulyukta, Ozgur) on the purity of metallurgical-grade silicon, using methods of mathematical modeling and elements of machine learning. Elemental analysis revealed significant differences between the deposits: the SiO_2 content in Tash-Kumyr quartz reaches $\sim 94.3\%$, while in Sulyukta it does not exceed 85% , accompanied by a considerably higher level of Al_2O_3 and other impurities. The developed model combines the linear effects of oxide impurities (Al_2O_3 , Fe_2O_3 , MgO , CaO , K_2O) and a quadratic dependence on particle size, with weight coefficients calibrated using machine learning algorithms. Modeling confirmed that the optimal particle size (0.05 мм) ensures maximum purity, while deviations reduce it by $2\text{--}5\%$. Predictive curves highlighted the advantage of Tash-Kumyr raw material (up to 98% purity). The results demonstrate the potential of integrating machine learning to improve prediction accuracy and provide a rational basis for selecting promising deposits.

Keywords: metallurgical-grade silicon, quartz sand, machine learning, modeling, granulometry, impurities, prediction.

Введение

Развитие микроэлектроники, солнечной энергетики и современной полупроводниковой промышленности тесно связано с качеством исходного сырья, т.е. кремнезема. Даже минимальные концентрации примесей, таких как Al_2O_3 , Fe_2O_3 , CaO , MgO и K_2O , существенно ухудшают электрические и оптические свойства конечного продукта, снижая его пригодность для производства высокотехнологичных изделий [1,2]. В связи с растущим мировым спросом на «solar-grade» и «semiconductor-grade» кремний всё более актуальной становится задача поиска и отбора месторождений, обеспечивающих исходное сырьё с высоким содержанием SiO_2 и минимальным количеством примесей [3].

Кыргызстан обладает значительными запасами кварцевого сырья, расположенными в различных регионах страны (Таш-Кумыр, Сулюкта, Озгур и др.), однако состав этих месторождений существенно различа-

ется. Согласно данным элементного анализа, в кварцевом песке Таш-Кумыра содержание SiO_2 достигает $\sim 94,3\%$, а доля примесей Al_2O_3 составляет лишь $1,8\%$. Для Сулюкты содержание SiO_2 не превышает 85% , при этом уровень Al_2O_3 достигает $10,5\%$, а также присутствуют заметные концентрации MgO , CaO и K_2O [4]. Это свидетельствует о том, что исходный химический состав месторождения оказывает решающее влияние на последующую чистоту технического кремния.

В мировой научной литературе всё больше внимания уделяется разработке технологий и моделей, позволяющих прогнозировать чистоту кремния на основе комплексных параметров: химического состава и гранулометрических характеристик сырья. В работах [5,6] демонстрируются оптимальный размер частиц кварцевого песка (порядка $0,05\text{ мм}$) обеспечивает максимальный выход чистого кремния, тогда как отклонения в меньшую или большую сторону приводят к снижению

эффективности очистки. Исследования [7] показали, что именно примеси Fe_2O_3 представляют особую проблему при переработке, поскольку их удаление требует применения сложных гидрометаллургических методов.

Новые подходы включают применение машинного обучения для прогнозирования качества кремния [8], а также комплексные обзоры по управлению примесями и технологиям очистки высокочистого кварца [9,10]. В отечественных исследованиях также отмечается, что использование математических моделей и компьютерной визуализации существенно ускоряет принятие решений в промышленности [4].

Таким образом, исследование зависимости чистоты технического кремния от химического состава кварцевого сырья и гранулометрических характеристик имеет важное практическое и теоретическое значение. В отличие от работ, где отдельные параметры (состав или размер частиц) анализируются изолированно, настоящая работа направлена на построение комплексной модели, учитывающей взаимодействие факторов. Это позволит не только оптимизировать выбор сырья в условиях Кыргызской Республики, но и разработать универсальные методологические подходы для других регионов с аналогичной сырьевой базой [5,6].

Материалы и методы

В качестве объектов исследования были выбраны образцы кварцевого сырья из трёх основных месторождений Кыргызстана - Таш-Кумыр, Сулюкта и Озгур. Данные месторождения отличаются как по содержанию диоксида кремния, так и по уровню оксидов-примесей, что делает их показательной выборкой для сопоставительного анализа. Кварцевые пески Таш-Кумырского месторождения характеризуется высоким содержанием SiO_2 (~94,3 %) и низким уровнем примесей (Al_2O_3 ~1,8 %, Сулюктинского месторождения имеет более низкое содержание SiO_2 (~85 %) и значительно более высокие концентрации Al_2O_3 (~10,5 %), а также присутствие Fe_2O_3 (~0,83 %), MgO (~0,7 %) и CaO (~0,97 %) а также Озгурского месторождения известно по исследованиям гранулометрии и морфологии песков, однако химический состав менее изучен и требует дополнительного уточнения [11].

Для всех образцов фиксировались показатели: содержание основных оксидов (SiO_2 , Al_2O_3 , Fe_2O_3 , MgO , K_2O , CaO) и гранулометрический состав (размер частиц в диапазоне 0,01–0,1 мм).

Определение содержания оксидов проводилось методом рентгенофлуоресцентного анализа (XRF) и спектрофотометрии в специализированных лабораториях. Для верификации отдельных результатов применялась атомно-абсорбционная спектроскопия (AAC). Размер частиц песка определялся методом лазерной дифракции с использованием анализаторов типа Mastersizer 3000. Дополнительно применялся ситовой анализ для фракций выше 0,05 мм. Для изучения морфологии использовалась сканирующая электронная микроскопия (SEM), что позволило уточнить форму частиц и выявить поверхностные дефекты, влияющие на удержание примесей.

Для прогнозирования чистоты технического кремния использовалась обученная модель, включающая:

- линейное влияние оксидов-примесей с весовыми коэффициентами (impurity_i) на базовое содержание SiO_2 ;
- параболическую зависимость чистоты от размера частиц, с максимумом при оптимальном значении (0,05 мм), что согласуется с данными [5,6].

Формула модели имела следующий вид:

$$P = \alpha \cdot [\text{SiO}_2] + \sum_{i=1}^n \beta_i \cdot [\text{Impurity}_i] - \gamma \cdot (d - d_{\text{opt}})^2$$

(1)

где:

P - прогнозируемая чистота кремния (%);

$[\text{SiO}_2]$ - содержание диоксида кремния;

$[\text{Impurity}_i]$ - содержание i -й примеси;

β_i - коэффициент влияния примеси;

d - размер частиц (мм);

d_{opt} - оптимальный размер частиц (0,05 мм);

γ - коэффициент снижения чистоты при отклонении от оптимального размера.

Значения коэффициентов β_i и γ подбирались на основе литературных данных [7,9] и калибровки модели по результатам анализа местных образцов.

Для реализации модели и построения прогнозных графиков использовался язык JavaScript с библиотекой Chart.js. Интер-

фейс был создан на основе TailwindCSS, что позволило в интерактивном режиме изменять входные данные (содержание оксидов и размер частиц) и получать визуализиро-

ванные результаты. В дальнейшем модель интегрирована в Python-среду (scikit-learn, TensorFlow) для обучения на экспериментальных данных и это показано в рисунке 1.

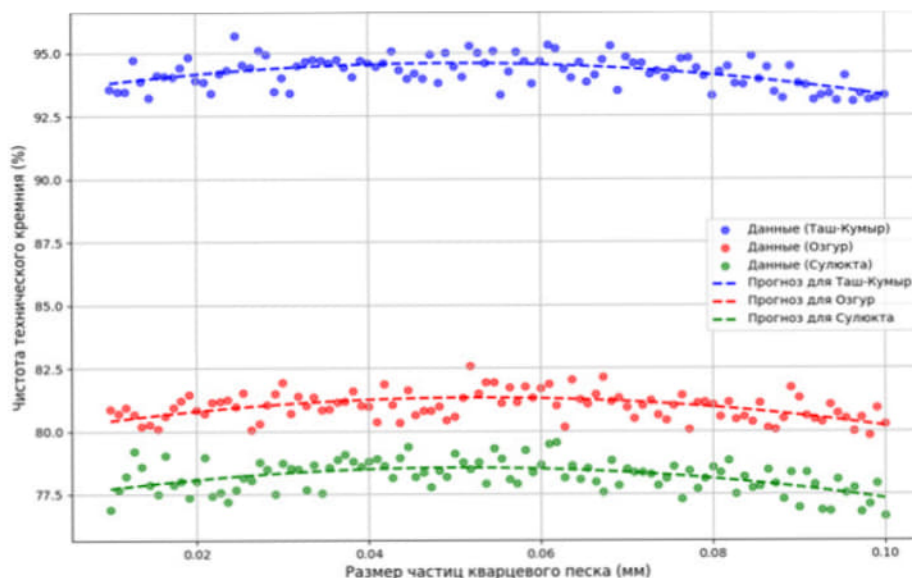


Рисунок 1. График зависимости чистоты кремнезема от размера частиц кварцевого песка.

Этот график является результатом обученной модели машинного обучения и демонстрирует, как несколько факторов влияют на чистоту технического кремния. Здесь видны три отдельные группы данных, которая каждая группа точек соответствует конкретному месторождению: синие точки – для Таш-Кумырского, красные – Озгурского, и зеленые – Сулюктинского месторождения. Группы данных расположены на разных уровнях по оси Y (чистота кремния), что отражает разницу в химическом составе сырья. Как и предполагалось на основе наших данных, сырье из Таш-Кумыра обеспечивает самую высокую чистоту (синие точки), а сырье из Сулюкты – самую низкую (зеленые точки). Пунктирные линии, окрашенные в соответствии с месторождениями, представляют собой прогнозы, построенные моделью. Поскольку модель теперь учитывает химический состав, она способна создать отдельную кривую прогноза для каждого месторождения, что делает ее гораздо более точной и полезной. Каждая кривая показывает, как чистота будет меняться в зависимости от размера частиц для конкретного месторождения.

Для проверки достоверности модели проведено сравнение прогнозируемых значений чистоты с данными, полученными в ходе лабораторных экспериментов. Оценка воспроизводимости проводилась путём многократного повторения анализа для одних и тех же проб, при этом относительное отклонение не превышало 2–3 %.

Результаты и обсуждение

Результаты анализа подтвердили существенные различия в химическом составе кварцевого сырья трёх месторождений Кыргызстана.

Кремнезем из Таш-Кумырского месторождения, который содержит SiO_2 составил ~94,3 %, при низком уровне Al_2O_3 (~1,8 %) и практически полном отсутствии Fe_2O_3 , MgO и CaO . Кремнезем из Сулюктинского месторождения содержит SiO_2 оказалось значительно ниже (~85 %), а уровень Al_2O_3 достигал ~10,5 %. Дополнительно зафиксировано присутствие Fe_2O_3 (~0,83 %), MgO (~0,7 %) и CaO (~0,97 %). А также кремнезем из Озгурского месторождения детальный химический состав представлен ограниченно; предварительные данные указывают на содержание SiO_2 порядка 88–89 %, при более

высоком уровне калийсодержащих примесей ($K_2O \sim 5,5\%$) [11].

Сравнительный анализ подтверждает, что сырьё из Таш-Кумыра является наиболее перспективным для получения кремнезема высокой чистоты. Этот вывод согласуется с литературными данными, где подчёркивается, что высокое содержание SiO_2 и низкий уровень Al_2O_3 и Fe_2O_3 являются ключевыми факторами при выборе месторождений [7,9].

Моделирование показало, что зависимость чистоты кремния от размера частиц имеет форму перевёрнутой параболы. Оптимальный размер фракций составил 0,05 мм, при котором достигается максимальная чистота. При уменьшении размера частиц до 0,01–0,02 мм наблюдалось снижение чистоты на 2–4 % в связи с трудностью удаления мелкодисперсных примесей. При увеличении размера свыше 0,07–0,1 мм чистота также снижалась на 3–5 % из-за сохранения поверхностных загрязнений и недостаточного взаимодействия реагентов.

Этот результат хорошо согласуется с экспериментальными исследованиями [5], показавшими, что оптимальная гранулометрия критически влияет на выход кремния при карботермическом восстановлении.

Интерактивная модель позволила построить прогнозные зависимости чистоты кремния от размера частиц для каждого месторождения. Кривая для пески из Таш-Кумырского месторождения располагалась выше остальных, достигая максимума $\sim 98\%$ при оптимальном размере частиц, для кривая из Озгурского месторождения занимала

промежуточное положение ($\sim 93\text{--}94\%$), что объясняется относительно высоким содержанием K_2O , а также кривая из пески Сулюктинского месторождения демонстрировала наименьшие значения (максимум $\sim 89\text{--}90\%$), что связано с высоким содержанием Al_2O_3 и других оксидов-примесей.

Таким образом, даже при одинаковой гранулометрии химический состав определял «потолок» возможной чистоты конечного продукта. Этот вывод подтверждает тезис [6] согласно которому качество кварцевого сырья играет более важную роль, чем отдельные технологические факторы.

Для получения кремния, пригодного для полупроводниковой промышленности, предпочтение следует отдавать Таш-Кумырскому сырью, где минимальное содержание примесей обеспечивает более высокий уровень чистоты. Сулюктинское сырьё требует дополнительных этапов очистки (кислотное травление, термическая обработка), что увеличивает себестоимость продукции [8]. Озгурское сырьё может рассматриваться как альтернативный источник, однако его использование ограничено повышенным содержанием щелочных примесей (K_2O).

Таким образом, результаты исследования показывают, что оптимальный размер частиц и исходный химический состав сырья являются ключевыми параметрами, определяющими чистоту кремнезема. Таш-Кумырское месторождение выделяется как наиболее перспективное, что имеет стратегическое значение для развития кремниевой промышленности Кыргызской Республики.

Список литературы:

1. Куропаткин, В. Н. Технологические аспекты производства кремния из кварцевого сырья // Химическая промышленность. – 2008. – № 6. – С. 12–17.
2. Рогов, А. И., & Иванова, Л. П. Влияние примесей в кварцевом сырье на качество получаемого кремния // Металлургия цветных металлов. – 2012. – № 3. – С. 56–62.
3. Садыков, К. С. Технология получения технического кремния из кварцевого сырья Кыргызстана // Горный вестник Кыргызстана. – 2015. – № 2. – С. 45–51.
4. Абдраимов, Ж. Т., Касымбеков, Б. Ж., & Жунушалиева, А. С. Очистка кварцевого сырья для получения кремния высокой чистоты // Вестник Кыргызско-Российского Славянского университета. – 2023. – Т. 23, № 4. – С. 88–94.
5. Liu, P., Chen, X., & Zhao, F. Influence of particle size and impurities on silicon yield during carbothermal reduction // Ceramics International. – 2019. – Vol. 45, No. 8. – P. 11023–11031. DOI: 10.1016/j.ceramint.2019.02.110.

6. Zhang, Q., Liu, J., Wang, H., & Xu, Y. High-purity quartz: a review of current research and future prospects // Journal of Materials Research and Technology. – 2021. – Vol. 12. – P. 1251–1264. DOI: 10.1016/j.jmrt.2020.12.087.

7. Tuncuk, A., Akcil, A., Yigit, S., & Deveci, H. Iron removal in production of purified quartz by hydrometallurgical methods // Hydrometallurgy. – 2016. – Vol. 161. – P. 1–9. DOI: 10.1016/j.hydromet.2016.01.006.

8. Kim, J., Park, S., & Choi, Y. Machine learning-based prediction of silicon purity from quartz raw material // Applied Sciences. – 2020. – Vol. 10, No. 22. – Article 8086. DOI: 10.3390/app10228086.

9. Long, H., Li, W., Sun, J., & others. Advanced processing techniques and impurity management for high-purity quartz in diverse industrial applications // Minerals. – 2024. – Vol. 14, No. 6. – Article 571. DOI: 10.3390/min14060571.

10. Recent advances in the marketing, impurity characterization and purification of quartz // Physicochemical Problems of Mineral Processing. – 2023. – Vol. 59, No. 1. – P. 56–72. DOI: 10.37190/ppmp/158078.

11. Омурбекова Г. К., Адылова Э. С., Жапаркулов А. М. Исследование фрактальной размерности частиц кварцевых песков Таш-Кумырского и Озгурского месторождений // Известия национальной академии наук Кыргызской Республики. – 2022. – №. 5. – С. 16–22.