

ISSN 1991-3494

ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ
ҰЛТТЫҚ ҒЫЛЫМ АКАДЕМИЯСЫНЫҢ

Х А Б А Р Ш Ы С Ы

ВЕСТНИК

НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК
РЕСПУБЛИКИ КАЗАХСТАН

THE BULLETIN

OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES
OF THE REPUBLIC OF KAZAKHSTAN

1944 ЖЫЛДАН ШЫҒА БАСТАҒАН
ИЗДАЕТСЯ С 1944 ГОДА
PUBLISHED SINCE 1944

6

АЛМАТЫ
АЛМАТЫ
ALMATY

2015

ҚАРАША
НОЯБРЬ
NOVEMBER

Б а с р е д а к т о р

ҚР ҰҒА академигі

М. Ж. Жұрынов

Р е д а к ц и я а л қ а с ы:

биол. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА академигі **Айтхожина Н.А.**; тарих ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА академигі **Байпақов К.М.**; биол. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА академигі **Байтулин И.О.**; биол. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА академигі **Берсімбаев Р.И.**; хим. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА академигі **Газалиев А.М.**; а.-ш. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА академигі **Дүйсенбеков З.Д.**; а.-ш. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА академигі **Елешев Р.Е.**; физ.-мат. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА академигі **Қалменов Т.Ш.**; фил. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА академигі **Нысанбаев А.Н.**; экон. ғ. докторы, проф., ҰҒА академигі **Сатубалдин С.С.**; тарих ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА корр. мүшесі **Әбжанов Х.М.**; физ.-мат. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА корр. мүшесі **Әбішев М.Е.**; техн. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА корр. мүшесі **Әбішева З.С.**; техн. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА корр. мүшесі **Абсадықов Б.Н.** (бас редактордың орынбасары); а.-ш. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА корр. мүшесі **Баймұқанов Д.А.**; тарих ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА корр. мүшесі **Байтанаев Б.А.**; физ.-мат. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА корр. мүшесі **Давлетов А.Е.**; физ.-мат. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА корр. мүшесі **Қалимолдаев М.Н.**; геогр. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА корр. мүшесі **Медеу А.**; техн. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА корр. мүшесі **Мырхалықов Ж.У.**; биол. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА корр. мүшесі **Огарь Н.П.**; техн. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА корр. мүшесі **Таткеева Г.Г.**; а.-ш. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА корр. мүшесі **Үмбетаев И.**

Р е д а к ц и я к е ñ е с і:

Ресей ҒА академигі **Велихов Е.П.** (Ресей); Әзірбайжан ҰҒА академигі **Гашимзаде Ф.** (Әзірбайжан); Украинаның ҰҒА академигі **Гончарук В.В.** (Украина); Армения Республикасының ҰҒА академигі **Джрбашян Р.Т.** (Армения); Ресей ҒА академигі **Лаверов Н.П.** (Ресей); Молдова Республикасының ҰҒА академигі **Москаленко С.** (Молдова); Молдова Республикасының ҰҒА академигі **Рудик В.** (Молдова); Армения Республикасының ҰҒА академигі **Сагиян А.С.** (Армения); Молдова Республикасының ҰҒА академигі **Тодераш И.** (Молдова); Тәжікстан Республикасының ҰҒА академигі **Якубова М.М.** (Тәжікстан); Молдова Республикасының ҰҒА корр. мүшесі **Лупашку Ф.** (Молдова); техн. ғ. докторы, профессор **Абиев Р.Ш.** (Ресей); техн. ғ. докторы, профессор **Аврамов К.В.** (Украина); мед. ғ. докторы, профессор **Юрген Аппель** (Германия); мед. ғ. докторы, профессор **Иозеф Банас** (Польша); техн. ғ. докторы, профессор **Гарабаджиу** (Ресей); доктор PhD, профессор **Ивахненко О.П.** (Ұлыбритания); хим. ғ. докторы, профессор **Изабелла Новак** (Польша); хим. ғ. докторы, профессор **Полещук О.Х.** (Ресей); хим. ғ. докторы, профессор **Поняев А.И.** (Ресей); профессор **Мохд Хасан Селамат** (Малайзия); техн. ғ. докторы, профессор **Хрипунов Г.С.** (Украина)

Главный редактор

академик НАН РК

М. Ж. Журинов

Редакционная коллегия:

доктор биол. наук, проф., академик НАН РК **Н.А. Айтхожина**; доктор ист. наук, проф., академик НАН РК **К.М. Байпаков**; доктор биол. наук, проф., академик НАН РК **И.О. Байтулин**; доктор биол. наук, проф., академик НАН РК **Р.И. Берсимбаев**; доктор хим. наук, проф., академик НАН РК **А.М. Газалиев**; доктор с.-х. наук, проф., академик НАН РК **З.Д. Дюсенбеков**; доктор сельскохоз. наук, проф., академик НАН РК **Р.Е. Елешев**; доктор физ.-мат. наук, проф., академик НАН РК **Т.Ш. Кальменов**; доктор фил. наук, проф., академик НАН РК **А.Н. Нысанбаев**; доктор экон. наук, проф., академик НАН РК **С.С. Сатубалдин**; доктор ист. наук, проф., чл.-корр. НАН РК **Х.М. Абжанов**; доктор физ.-мат. наук, проф., чл.-корр. НАН РК **М.Е. Абишев**; доктор техн. наук, проф., чл.-корр. НАН РК **З.С. Абишева**; доктор техн. наук, проф., чл.-корр. НАН РК **Б.Н. Абсадыков** (заместитель главного редактора); доктор с.-х. наук, проф., чл.-корр. НАН РК **Д.А. Баймуканов**; доктор ист. наук, проф., чл.-корр. НАН РК **Б.А. Байтанаев**; доктор физ.-мат. наук, проф., чл.-корр. НАН РК **А.Е. Давлетов**; доктор физ.-мат. наук, проф., чл.-корр. НАН РК **М.Н. Калимолдаев**; доктор геогр. наук, проф., чл.-корр. НАН РК **А. Медеу**; доктор техн. наук, проф., чл.-корр. НАН РК **Ж.У. Мырхалыков**; доктор биол. наук, проф., чл.-корр. НАН РК **Н.П. Огарь**; доктор техн. наук, проф., чл.-корр. НАН РК **Г.Г. Таткеева**; доктор сельскохоз. наук, проф., чл.-корр. НАН РК **И. Умбетаев**

Редакционный совет:

академик РАН **Е.П. Велихов** (Россия); академик НАН Азербайджанской Республики **Ф. Гашимзаде** (Азербайджан); академик НАН Украины **В.В. Гончарук** (Украина); академик НАН Республики Армения **Р.Т. Джрбашян** (Армения); академик РАН **Н.П. Лаверов** (Россия); академик НАН Республики Молдова **С. Москаленко** (Молдова); академик НАН Республики Молдова **В. Рудик** (Молдова); академик НАН Республики Армения **А.С. Сагиян** (Армения); академик НАН Республики Молдова **И. Тодераш** (Молдова); академик НАН Республики Таджикистан **М.М. Якубова** (Таджикистан); член-корреспондент НАН Республики Молдова **Ф. Лупашку** (Молдова); д.т.н., профессор **Р.Ш. Абиев** (Россия); д.т.н., профессор **К.В. Аврамов** (Украина); д.м.н., профессор **Юрген Аппель** (Германия); д.м.н., профессор **Иозеф Банас** (Польша); д.т.н., профессор **А.В. Гарабаджиу** (Россия); доктор PhD, профессор **О.П. Ивахненко** (Великобритания); д.х.н., профессор **Изабелла Новак** (Польша); д.х.н., профессор **О.Х. Полещук** (Россия); д.х.н., профессор **А.И. Поняев** (Россия); профессор **Мохд Хасан Селамат** (Малайзия); д.т.н., профессор **Г.С. Хрипунов** (Украина)

«Вестник Национальной академии наук Республики Казахстан». ISSN 1991-3494

Собственник: РОО «Национальная академия наук Республики Казахстан» (г. Алматы)

Свидетельство о постановке на учет периодического печатного издания в Комитете информации и архивов Министерства культуры и информации Республики Казахстан №5551-Ж, выданное 01.06.2006 г.

Периодичность: 6 раз в год

Тираж: 2000 экземпляров

Адрес редакции: 050010, г. Алматы, ул. Шевченко, 28, ком. 219, 220, тел. 272-13-19, 272-13-18.

www: nauka-nanrk.kz, bulletin-science.kz

© Национальная академия наук Республики Казахстан, 2015

Адрес типографии: ИП «Аруна», г. Алматы, ул. Муратбаева, 75

Editor in chief

M. Zh. Zhurinov,
academician of NAS RK

Editorial board:

N.A. Aitkhozhina, dr. biol. sc., prof., academician of NAS RK; **K.M. Baipakov**, dr. hist. sc., prof., academician of NAS RK; **I.O. Baitulin**, dr. biol. sc., prof., academician of NAS RK; **R.I. Bersimbayev**, dr. biol. sc., prof., academician of NAS RK; **A.M. Gazaliyev**, dr. chem. sc., prof., academician of NAS RK; **Z.D. Dyusenbekov**, dr. agr. sc., prof., academician of NAS RK; **R.Ye. Yeleshev**, dr. agr. sc., prof., academician of NAS RK; **T.Sh. Kalmenov**, dr. phys. math. sc., prof., academician of NAS RK; **A.N. Nysanbayev**, dr. phil. sc., prof., academician of NAS RK; **S.S. Satubaldin**, dr. econ. sc., prof., academician of NAS RK; **Kh.M. Abzhanov**, dr. hist. sc., prof., corr. member of NAS RK; **M.Ye. Abishev**, dr. phys. math. sc., prof., corr. member of NAS RK; **Z.S. Abisheva**, dr. eng. sc., prof., corr. member of NAS RK; **B.N. Absadykov**, dr. eng. sc., prof., corr. member of NAS RK (deputy editor); **D.A. Baimukanov**, dr. agr. sc., prof., corr. member of NAS RK; **B.A. Baytanayev**, dr. hist. sc., prof., corr. member of NAS RK; **A.Ye. Davletov**, dr. phys. math. sc., prof., corr. member of NAS RK; **M.N. Kalimoldayev**, dr. phys. math. sc., prof., corr. member of NAS RK; **A. Medeu**, dr. geogr. sc., prof., corr. member of NAS RK; **Zh.U. Myrkhalykov**, dr. eng. sc., prof., corr. member of NAS RK; **N.P. Ogar**, dr. biol. sc., prof., corr. member of NAS RK; **G.G. Tatkeeva**, dr. eng. sc., prof., corr. member of NAS RK; **I. Umbetayev**, dr. agr. sc., prof., corr. member of NAS RK

Editorial staff:

E.P. Velikhov, RAS academician (Russia); **F. Gashimzade**, NAS Azerbaijan academician (Azerbaijan); **V.V. Goncharuk**, NAS Ukraine academician (Ukraine); **R.T. Dzhrbashian**, NAS Armenia academician (Armenia); **N.P. Laverov**, RAS academician (Russia); **S.Moskalenko**, NAS Moldova academician (Moldova); **V. Rudic**, NAS Moldova academician (Moldova); **A.S. Sagiyan**, NAS Armenia academician (Armenia); **I. Toderas**, NAS Moldova academician (Moldova); **M. Yakubova**, NAS Tajikistan academician (Tajikistan); **F. Lupaşcu**, NAS Moldova corr. member (Moldova); **R.Sh. Abiyev**, dr.eng.sc., prof. (Russia); **K.V. Avramov**, dr.eng.sc., prof. (Ukraine); **Jürgen Appel**, dr.med.sc., prof. (Germany); **Joseph Banas**, dr.med.sc., prof. (Poland); **A.V. Garabadzhiu**, dr.eng.sc., prof. (Russia); **O.P. Ivakhnenko**, PhD, prof. (UK); **Isabella Nowak**, dr.chem.sc., prof. (Poland); **O.Kh. Poleshchuk**, chem.sc., prof. (Russia); **A.I. Ponyaev**, dr.chem.sc., prof. (Russia); **Mohd Hassan Selamat**, prof. (Malaysia); **G.S. Khripunov**, dr.eng.sc., prof. (Ukraine)

Bulletin of the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan.
ISSN 1991-3494

Owner: RPA "National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan" (Almaty)

The certificate of registration of a periodic printed publication in the Committee of Information and Archives of the Ministry of Culture and Information of the Republic of Kazakhstan N 5551-Ж, issued 01.06.2006

Periodicity: 6 times a year

Circulation: 2000 copies

Editorial address: 28, Shevchenko str., of. 219, 220, Almaty, 050010, tel. 272-13-19, 272-13-18,
<http://nauka-nanrk.kz/>, <http://bulletin-science.kz>

© National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan, 2015

Address of printing house: ST "Aruna", 75, Muratbayev str, Almaty

**BULLETIN OF NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES
OF THE REPUBLIC OF KAZAKHSTAN**

ISSN 1991-3494

Volume 6, Number 358 (2015), 52 – 59

UDC 530.1

**MATHEMATICAL MODELS OF BINARY AGGREGATION IN SYSTEMS
WITH CHEMICAL SOURCES OF DISPERSE PHASE**

D. Dayrabay, V.G. Golubev, O.S. Balabekov, A.M. Brener

din_303@mail.ru

¹ South Kazakhstan State University named after M. Auezov, Shymkent,

²South Kazakhstan State Pedagogical Institute, Shymkent

Key words: binary aggregation, chemical reaction, insoluble phase, sedimentation.

Abstract. Work is devoted to the analysis of the mechanism of formation and evolution of solid particles in chemical devices with formation of an insoluble phase in a reaction zone. In the paper the system analysis of processes is carried out and their basic stages are proved. The theoretical foundation for calculating the kinetics of the aggregation of insoluble products in chemical apparatus in terms of joint chemical reactions and coagulation processes in the working zone of reactors has been submitted. The models of aggregation of a disperse phase in systems with chemical reactions of first and second orders have been developed. Regularities of aggregation process in systems with a chemical source of first and second orders of insoluble phase monomers have been studied. The paper deals with the modified equations for calculating the kinetics of aggregation of the dispersed phase in the chemical reaction system based on the Smoluchowski equation for the binary coagulation. The exact solutions of kinetic equations for total concentrations of different orders clusters have been obtained. The basic process control parameters of the aggregation process in the systems with a chemical source of insoluble monomer phase of first and second-orders have been determined. Their validity has been confirmed with the help of numerical experiment. It was shown that order of chemical reaction did not change the character of aggregation process of insoluble product

of the reaction. Particularly, in both cases the time moment, which is corresponded to the peak of the total number clusters of insoluble phase in the system, is determined by the one control parameter. Relations for calculating this parameter however are different depending on the order of chemical reaction.

УДК 530.1

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ БИНАРНОЙ АГРЕГАЦИИ В СИСТЕМАХ С ХИМИЧЕСКИМИ ИСТОЧНИКАМИ ДИСПЕРСНОЙ ФАЗЫ

Д. Дайрабай¹, В.Г. Голубев¹, О.С. Балабеков², А.М. Бренер¹
din_303@mail.ru

¹Южно-Казахстанский государственный университет им. М.Ауэзова, г. Шымкент

²Южно-Казахстанский государственный педагогический институт, г. Шымкент

Ключевые слова: бинарная агрегация, химическая реакция, нерастворимая фаза, седиментация

Аннотация. Работа посвящена анализу механизма формирования и эволюции частиц твердой фазы в химических аппаратах в процессах с образованием нерастворимого фазе в реакционной зоне. Осуществлен системный анализ процессов и рассмотрены их основные этапы. Дано теоретическое обоснование расчета кинетики агрегации нерастворимых продуктов в химическом аппарате при совместном протекании химических реакций и процессов коагуляции в рабочей зоне реакторов. Разработаны модели агрегации дисперсной фазы в системах с химическими реакциями первого и второго порядков. Изучены закономерности процесса агрегации в системах с химическим источником нерастворимых мономеров для реакций первого и второго порядков. Предложены модифицированные уравнения для расчета кинетики агрегации частиц дисперсной фазы в химической реакционной системе, основанные на уравнении Смолуховского для бинарной коагуляции. Точные решения кинетических уравнений для полных концентраций кластеров различных порядков также были получены. Выделены основные управляющие параметры процесса агрегации в системах с химическим источником нерастворимой фазы мономеров первого и второго порядков. Важность этих параметров подтверждена с помощью численного эксперимента. Было показано, что порядок химической реакции не изменяет характер процесса агрегации нерастворимого продукта реакции. В частности, в обоих случаях момент, который соответствует пику общего числа кластеров нерастворимой фазы в системе, определяется одним параметром управления. Отношения для расчета этого параметра, однако, различны в зависимости от порядка химической реакции.

Введение

В настоящее время, использование химических аппаратов и реакторов, в которых идут процессы образования, агрегации и седиментации нерастворимых фаз в рабочем объеме аппаратов становится все более и более широким, особенно в современных тонких и нано-технологиях [1, 2]. Во многих случаях процессы химических технологий сопровождается образованием новой твердой дисперсной фазы. Это могут быть фазовые переходы, как в случае кристаллизации или десублимации [4, 5], или это могут быть процессы образования слабо растворимых веществ при химических реакциях [6, 7, 8, 9, 10]. В целом, можно выделить целый ряд направлений современной науки о процессах и аппаратах, в которых возникают проблемы расчета кинетики и анализа динамики реакторов с образованием дисперсной твердой фазы в рабочей зоне.

К ним относятся:

1) очистка газов от загрязнений мелких частиц и пыли [11, 12]; 2) производство нанодисперсных порошков для конструкционной и функциональной биокерамики; 3) создание сорбентов, катализаторов, лекарственных препаратов и молекулярных сеток с заданной структурой [12]; 4) создание методов для оптимального проектирования технологических процессов, связанных с методом химического осаждения [2]; 5) разработка полимерных пленок для молекулярно покрытия продукции химической промышленности [2].

В то же время, известные теоретические модели агрегации дисперсной фазы и осаждения мало пригодны для инженерных расчетов, так как они слишком сложны и включают необходимость использовать набор параметров, некоторые из которых трудно найти [13 - 16].

В этой статье мы предлагаем простую математическую модель, которая открывает, на наш взгляд, перспективы для создания способа расчета агрегации нерастворимых твердых веществ в системах с химическими реакциями первого и второго порядков. В результате можно получить выражения для вычисления эволюции и общего количества кластеров в системе, и среднего порядка кластера с учетом кинетических констант данной химической реакции и элементов агрегационной матрицы [17].

Методы исследования

В данном разделе кратко описаны основные методы и модели, применяемые для описания процессов химических превращений с образованием нерастворимой твердой фазы.

Рассмотрим реакцию первого порядка, происходящую в растворе по условной схеме



В соответствии с релаксационным подходом [4, 17] кинетическое уравнение реакции (1) запишем в виде

$$\frac{dA}{dt} = -\int_0^t \eta_c \exp\left(-\frac{t-t_1}{\tau_c}\right) A(t_1) dt_1 \quad (2)$$

Здесь A - концентрация исходного реагента; B - концентрация продукта реакции; $t-t_1$ - временная задержка; τ_c - время релаксации химического превращения; η_c - кинетический коэффициент.

При достаточно малом «химическом» времени релаксации, удовлетворяющем условию

$$\frac{1}{4\tau_c^2} \gg \eta, \quad (3)$$

и получаем решение

$$A = A_0 \exp\left(-\frac{t}{\tau_c}\right), \quad (4)$$

где связь между временем релаксации и коэффициентом скорости реакции k

$$\tau_c = 1/k. \quad (5)$$

Тогда концентрация продукта реакции

$$B = A_0 \left(1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau_c}\right)\right). \quad (6)$$

Далее, пусть в системе осуществляется нуклеация продукта реакции B с образованием нерастворимой дисперсной фазы C .



Процесс первичной нуклеации достаточно сложен и теоретически слабо описан, хотя его анализом занимались и занимаются многие исследователи. В частности, можно отметить работы [2, 18, 19] и многие другие. Однако, если на учитывать время формирования равновесной концентрации продукта, получаем решение

$$\left. \frac{dC}{dt} \right|_n = \frac{d(\Delta B)}{dt} = \frac{dB}{dt} = \frac{A_0}{\tau_c} \exp\left(-\frac{t-\tau_n}{\tau_c}\right), \quad (8)$$

где

$$\Delta B = B - B^{eq}. \quad (9)$$

Результаты исследования

Системы первого порядка

Будем описывать распределение дисперсии нерастворимой фазы по порядкам кластеров, которые характеризуются как мономеры, димеры и т.д. C_i будет обозначать концентрацию i -меров нерастворимой фазы C .

Уравнения Смолуховского для коагуляции нерастворимой фазы с учетом химического источника выглядят следующим образом [3, 7]

$$\frac{dC_i}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{i-1} N_{j,i-j} C_j(t) C_{i-j}(t) - \sum_{j=1}^{\infty} N_{i,j} C_i(t) C_j(t) + \Phi_i(t) \quad (10)$$

$$\frac{dC_1}{dt} = - \sum_{j=1}^{\infty} N_{1,j} C_1(t) C_j(t) + \Phi_1(t) \quad (11)$$

Примем для простоты, что в результате первичной нуклеации возникают только мономеры нерастворимой фазы. Тогда можно записать

$$\frac{dC_1}{dt} = - \sum_{j=1}^{\infty} N_{1,j} C_1(t) C_j(t) + \chi \frac{A_0}{\tau_c} \exp\left(-\frac{t-\tau_n}{\tau_c}\right), \quad (12)$$

где коэффициент χ учитывает массу мономера.

Введем производящую функцию вида [13]

$$\tilde{C}(t, z) = \sum_{i=1}^{\infty} C_i(t) \exp(-iz) \quad (13)$$

Тогда можно получить следующее уравнение для общей концентрации кластеров различных порядков в системе

$$\frac{dM_0}{dt} = -\frac{1}{2} M_0^2 + \frac{A_0 \exp(\tau_n/\tau_c)}{\tau_c} \exp\left(-\frac{t}{\tau_c}\right). \quad (14)$$

Для аналитического решения уравнения (14) введем параметры

$$\exp\left(-\frac{t}{\tau_c}\right) = s, \quad E_0 = \frac{A_0 \exp(\tau_n/\tau_c)}{\tau_c} \quad (15)$$

Теперь уравнение приобретает вид

$$\frac{dM_0}{ds} = \frac{\tau_c}{2s} M_0^2 - E_0. \quad (16)$$

Для полученного уравнения Риккати произведем замену.

$$U = \exp\left(-\int \frac{\tau_c}{2s} M_0 ds\right) \quad (17)$$

В результате получаем следующее преобразованное кинетическое уравнение для полного числа кластеров

$$\frac{\tau_c}{2s} \frac{d^2 U}{ds^2} + \frac{\tau_c}{2s^2} \frac{dU}{ds} - \frac{\tau_c^2}{4s^2} A_0 U = 0, \quad (18)$$

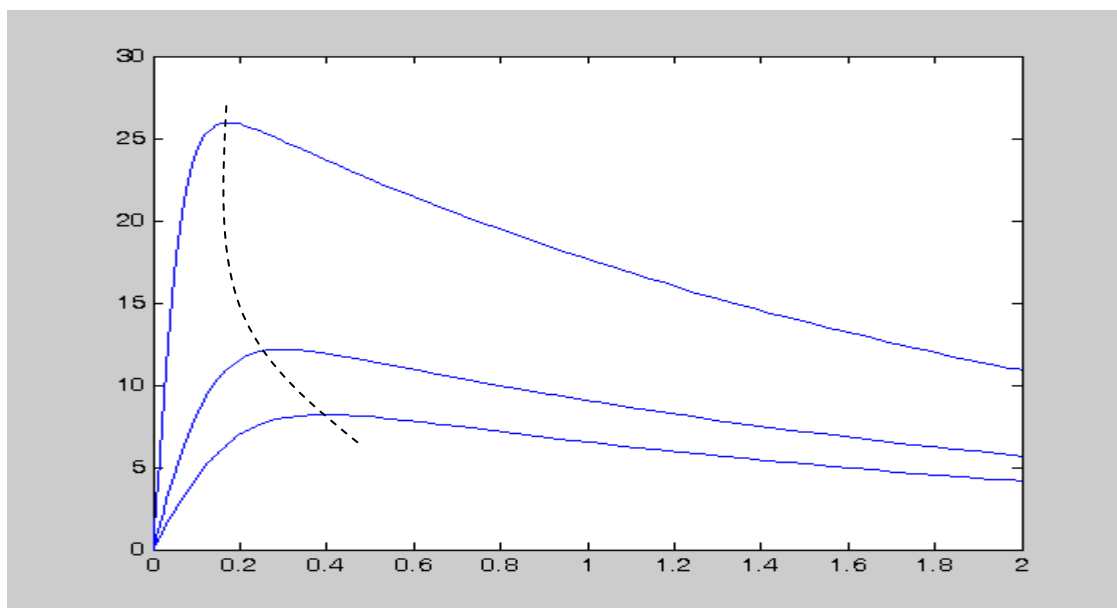
Решение уравнения (18) записывается через Бесселевы функции:

$$U = U_1 I_0\left(\sqrt{2A_0 \tau_c s}\right) + U_2 K_0\left(\sqrt{2A_0 \tau_c s}\right). \quad (19)$$

Отсюда окончательно получаем аналитическое выражение для расчета эволюции полного числа кластеров нерастворимой фазы в системе

$$M_0 = -\frac{2s}{\tau_c} \frac{dU/ds}{U}. \quad (20)$$

На рисунке 1 представлены некоторые результаты расчетов эволюции концентрации общего числа кластеров различных порядков при агрегации в системе с образованием мономеров по схеме реакции первого порядка.



Параметр $E_0 = 1- 80; 2- 200; 3- 800$.

Рисунок 1 – эволюция концентрации общего числа кластеров нерастворимой фазы в системе первого порядка на малых временах

В результате обработки численных расчетов получено следующее уравнение для зависимости экстремумов общего числа кластеров в системе с реакцией первого порядка от параметра E_0

$$(t/\tau)_{\max} = 0,437E_0^{-0,286} \quad (21)$$

Системы второго порядка

Рассмотрим необратимую реакцию второго порядка, происходящую в растворе по условной схеме



Процесс агрегации будем также описывать с помощью уравнения Смолуховского. При нашей постановке задачи можно записать

$$\frac{dC}{dt} = k_2AB, \quad \frac{dA}{dt} = -k_2AB, \quad \frac{dB}{dt} = -k_2AB \quad (23)$$

Начальные условия

$$A(0) = A_0, \quad B(0) = B_0. \quad (24)$$

Введем также обозначения

$$\rho_0 = A_0 + B_0, \quad \theta_0 = k_2A_0B_0. \quad (25)$$

В итоге приходим к кинетическому уравнению для концентрации агрегирующегося реагента:

$$\frac{d^2C}{dt^2} = -k_2 \frac{dC}{dt} (\rho_0 - 2C). \quad (26)$$

Решение уравнения (26) имеет вид

$$\frac{1}{A_0 - B_0} \ln \frac{B_0(C - A_0)}{A_0(C - B_0)} = k_2 t. \quad (27)$$

Если образующийся продукт реакции является нерастворимым, то вновь начинается агрегация первичных мономеров по схеме, изложенной выше, но с учетом иного вида химического источника мономеров:

$$\frac{dC_1}{dt} = - \sum_{j=1}^{\infty} N_{1,j} C_1(t) C_j(t) + \frac{k_2 A_0 B_0 (A_0 - B_0)^2 \exp(k_2 (A_0 - B_0) (t - \tau_n) / \tau_c)}{(B_0 - A_0 \exp(k_2 (A_0 - B_0) (t - \tau_n) / \tau_c))^2}, \quad (28)$$

где $\tau_c = \frac{1}{k_2}$.

Для анализа этой задачи можно так же, как раньше, использовать производящие функции.

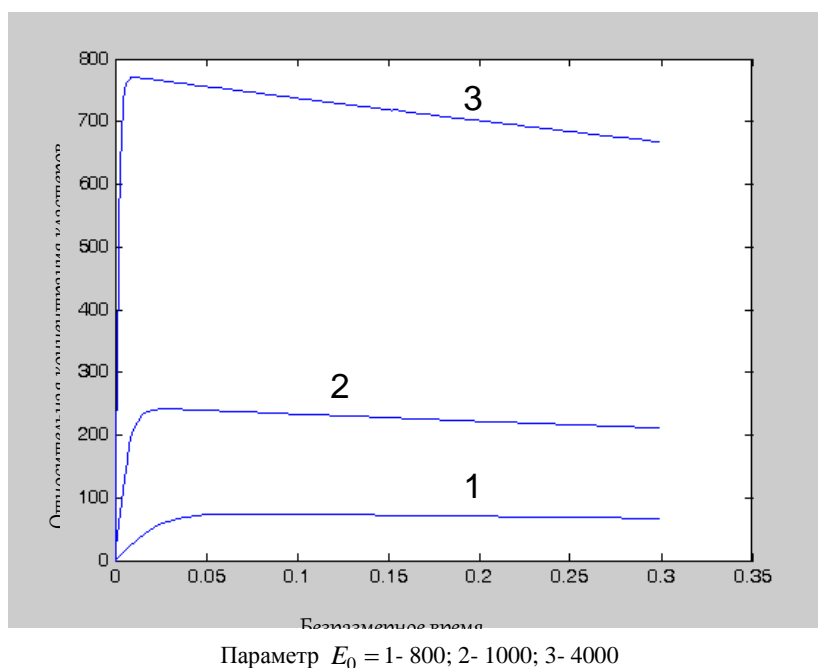
Тогда для эволюции общей концентрации кластеров нерастворимой фазы получаем

$$\frac{dM_0}{dt} = -\frac{1}{2}M_0^2 + \frac{A_0B_0(1 - E_0 \exp((A_0 - B_0)t/\tau_c))}{B_0 - A_0E_0 \exp((A_0 - B_0)t/\tau_c)}, \quad (29)$$

где

$$E_0 = \exp\left(- (A_0 - B_0) \frac{\tau_n}{\tau_c}\right). \quad (30)$$

На рисунке 2 показаны некоторые результаты расчетов концентрации общего числа кластеров нерастворимой фазы в периодическом реакторе при протекании в нем реакции второго порядка



Параметр $E_0 = 1- 800; 2- 1000; 3- 4000$

Рисунок 2 – Эволюция концентрации общего числа кластеров нерастворимой фазы в системе второго порядка на малых временах

Из графиков видно, что порядок реакции не влияет на качественный характер эволюции общего числа кластеров. Этот вывод качественно согласуется с результатами известных работ [20, 21] Можно отметить только более медленное снижение общего числа кластеров после прохождения пика коагуляции.

Выводы

В работе рассмотрены модифицированные кинетические уравнения агрегации дисперсной фазы в системе с химической реакцией на основе уравнений Смолуховского для бинарной коагуляции.

Выделены основные управляющие параметры процесса и разработаны методы расчета кинетических характеристик процесса агрегации дисперсий с химическим источником мономеров нерастворимой фазы и с учетом взаимодействия кластеров для случаев химических реакций первого и второго порядков в химическом аппарате. Получены также точные решения кинетических уравнений для полных концентраций кластеров различных порядков в виде суперпозиции функций Бесселя. На основе компьютерного эксперимента показано, что порядок химической реакции не изменяет характер процесса агрегации нерастворимого продукта реакции. В частности, в обоих случаях момент, который соответствует пику общего числа кластеров нерастворимой фазы в системе, определяется одним параметром управления.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Волощук В.М., Седунов Ю.С. Процессы коагуляции в дисперсных системах.- Л.: Гидрометеиздат.- 1975, с. 435.
- [2] Sonntag H., Strenge K. Coagulation Kinetics and Structure Formation, Springer Science + Business media, LLC, 1987, New York, 192 p.
- [3] Levin S.A., Segel L.A., Pattern generation in space and aspect, 1985, SIAM. Rev., 27, 45-67.
- [4] Menon G., Pego R.L., Kinetics of a precipitation from supersaturated solid solutions, 2004, Comm. on Pure and Appl. Math, vol. LVII, 1197-1232.
- [5] Blackman J.A., Marshall A., Coagulation and Fragmentation in cluster-monomer reaction models, 1994, J. Phys. A.: Math. Gen. 27, 725-740.
- [6] Boehm A.B., Poor C., Grant S.B., Particle coagulation and the memory of initial conditions, 1998, J. Phys. A 31, 9241.
- [7] Бекаулова А.А., Ташимов Л.Т., Балабеков Б.Ч. Особенности моделирования химических реакторов с образованием дисперсной фазы в рабочей зоне// Оралдың ғылым жаршысы.- Уральск-2009.-С.83-88.
- [8] Бекаулова А.А., Ташимов Л.Т. Особенности моделирования и расчет осаждения полидисперсных суспензий// Вестник МКТУ им. Х.А. Ясави- Туркестан-2009.-С.3-9.
- [9] A. Brener, B. Balabekov and A. Kaugaeva, Non_Local Model of Aggregation in Uniform Polydispersed Systems, Chem. Eng. Trans. 17, 783 (2009).
- [10] Бекаулова А.А., Махатова А., Балабеков Б., Балабеков О.С. Моделирование процессов агрегации в физико-химических системах с химическими источниками нерастворимой фазы//Известия НАН РК.- Алматы-2008.№1.- С.69-72.
- [11] Feinn D., Ortoleva P., Scalf W., Schmidt S. Spontaneous pattern formation in precipitating systems //J.Chem. Phys. - 1978. – No. 1.- P. 27 - 39.
- [12] Kraft M. Modelling of Particulate Processes //KONA. - 2005. - No. 23. - P. 18 - 35.
- [13] J.A.D. Wattis. An introduction to mathematical models of coagulation-fragmentation processes: a discrete deterministic mean-field approach// Physica D: Nonlinear Phenomena, 2006, V.222, No 1-2, P. 1-20.
- [14] Ernst M.H., Kinetics of clustering in irreversible aggregation, 1986, in Fractal in Physics, Pietronero L., Tosatti E., Eds., North-Holland, Amsterdam.
- [15] Davies S.C., King J.R., Wattis J.A.D., The Smoluchowski coagulation equations with continuous injection, 1999, J. Phys. A 32, 7745.
- [16] Brener A.M., 2014, Model of many particle aggregation in dense particle systems, Chem. Eng. Trans. (CET), Vol 38, 145-150.
- [17] Brener A.M., Nonlocal Model of Aggregation in Polydispersed Systems, 2011, Theor. Found. Chem. Eng, Vol. 45, 349-353.
- [18] Durlofsky Louis J., Brady John F. Dynamic simulation of bounded suspensions of hydrodynamically interacting particles //J. Fluid Mech. – 1989. – C. 39 - 67.
- [19] Brener A.M., Balabekov B.Ch., Golubev V.G., Bekaulova A.A. Modeling of aggregation processes in physico-chemical systems //ESAT 2008 Proceeding of the 23 European Symposium on Applied Thermodynamics. - France. - 2008. – C. 485 - 488.
- [20] F.P. da Costa, H.J. van Roessel, J.A.D. Wattis. Long - Time Behaviour and Self-Similarity in a Coagulation Equation With Input of Monomers. - 2006. - p. 244.
- [21] Robin Blumberg Selinger, Johann Nittmann, H.E.Stanley. Inhomogeneous diffusion-limited aggregation //Phys Rev. A. - 1989. - P. 2590 - 2601.

REFERENCES

- [1] Voloshuk V.M., Sedunov Ju.S. Processy Coagulation process in disperse sistemah. - L. : Gidrometeoizdat - 1975, p. 435. (In Russ.).
- [2] Sonntag H., Strenge K. Coagulation Kinetics and Structure Formation, Springer Science + Business media, LLC, 1987, New York, 192 p.
- [3] Levin S.A., Segel L.A., Pattern generation in space and aspect, 1985, SIAM. Rev., 27, 45-67.
- [4] Menon G., Pego R.L., Kinetics of a precipitation from supersaturated solid solutions, 2004, Comm. on Pure and Appl. Math, vol. LVII, 1197-1232.
- [5] Blackman J.A., Marshall A., Coagulation and Fragmentation in cluster-monomer reaction models, 1994, J. Phys. A.: Math. Gen. 27, 725-740.
- [6] Boehm A.B., Poor C., Grant S.B., Particle coagulation and the memory of initial conditions, 1998, J. Phys. A 31, 9241.
- [7] Bekaulova A.A., Tashimov L.T., Balabekov B.Ch. Features of modeling of chemical reactors to form a dispersed phase in the work area // Oralдын Gylym жаршысы.- Uralsk-2009-p.83-88. (In Russ.).
- [8] Bekaulova A.A., Tashimov L.T. Features of modeling and calculation of precipitation of polydisperse suspensions // Herald of IKTU n/a H.A. Yasavi- Turkestan-2009 - p.3-9. (In Russ.).
- [9] A. Brener, B. Balabekov and A. Kaugaeva, Non_Local Model of Aggregation in Uniform Polydispersed Systems, Chem. Eng. Trans. 17, 783 (2009).
- [10] Bekaulova A.A., Mahatova A., Balabekov B., Balabekov O.S. Modelling of processes of aggregation in physical

and chemical systems with chemical sources of insoluble phase // News of NAS RK. - Almaty-2008. №1.- p.69-72. (In Russ.).

[11] Feinn D., Ortoleva P., Scaif W., Schmidt S. Spontaneous pattern formation in precipitating systems //J.Chem. Phys. - 1978. – No. 1.- P. 27 - 39.

[12] Kraft M. Modelling of Particulate Processes //KONA. - 2005. - No. 23. - P. 18 - 35.

[13] J.A.D. Wattis. An introduction to mathematical models of coagulation-fragmentation processes: a discrete deterministic mean-field approach// Physica D: Nonlinear Phenomena, 2006, V.222, No 1-2, P. 1-20.

[14] Ernst M.H., Kinetics of clustering in irreversible aggregation, 1986, in Fractal in Physics, Pietronero L., Tosatti E., Eds., North-Holland, Amsterdam.

[15] Davies S.C., King J.R., Wattis J.A.D., The Smoluchowski coagulation equations with continuous injection, 1999, J. Phys. A 32, 7745.

[16] Brenner A.M., 2014, Model of many particle aggregation in dense particle systems, Chem. Eng. Trans. (CET), Vol 38, 145-150.

[17] Brenner A.M., Nonlocal Model of Aggregation in Polydispersed Systems, 2011, Theor. Found. Chem. Eng, Vol. 45, 349-353.

[18] Durlofsky Louis J., Brady John F. Dynamic simulation of bounded suspensions of hydrodynamically interacting particles //J. Fluid Mech. – 1989. – С. 39 - 67.

[19] Brenner A.M., Balabekov B.Ch., Golubev V.G., Bekaulova A.A. Modeling of aggregation processes in physico-chemical systems //ESAT 2008 Proceeding of the 23 European Symposium on Applied Thermodynamics. - France. - 2008. – С. 485 - 488.

[20] F.P. da Costa, H.J. van Roessel, J.A.D. Wattis. Long - Time Behaviour and Self-Similarity in a Coagulation Equation With Input of Monomers. - 2006. - p. 244.

[21] Robin Blumberg Selinger, Johann Nittmann, H.E.Stanley. Inhomogeneous diffusion-limited aggregation //Phys Rev. A. - 1989. - P. 2590 - 2601.

ДИСПЕРСТІ ФАЗАНЫҢ ХИМИЯЛЫҚ КӨЗДЕРІ БАР ЖҮЙЕЛЕРДЕГІ БИНАРЛЫҚ АГРЕГАЦИЯЛАУДЫҢ МАТЕМАТИКАЛЫҚ ҮЛГІЛЕРІ

Д. Дайрабай¹, В.Г. Голубев¹, О.С. Балабеков², А.М. Бренер¹
din_303@mail.ru

¹М. Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан мемлекеттік университеті, Шымкент қаласы

²Оңтүстік Қазақстан мемлекеттік педагогикалық институты, Шымкент қаласы

Түйін сөздер: бинарлық агрегация, химиялық реакция, ерімейтін фаза, седиментация.

Аннотация. Жұмыс химиялық аппараттарда реакциялық аумақта ерімейтін фазаның түзілу процестерінде қатты фаза бөлшектерінің құрылу және даму механизмін талдауға арналған. Жұмыста процестердің жүйелік талдауы жүргізілді және олардың негізгі кезендері қарастырылды. Реакторлардың жұмыс аумағында химиялық реакциялар мен үю процестерінің бірге өту кезінде химиялық аппаратта ерімейтін өнімдердің агрегация кинетикасының есебіне теориялық дәйектеме берілді. Бірінші және екінші тәртіптік химиялық реакциялары бар жүйелерде дисперстік фаза агрегацияларының үлгілері әзірленді. Бірінші және екінші тәртіптік реакциялар үшін ерімейтін мономерлер химиялық көздері бар жүйелердегі агрегация процестерінің заңдылықтары зерттелді. Смолуховскидің бинарлық үюға арналған теңдеуге негізделген химиялық реакциялық жүйелерде дисперстік фаза бөлшектерінің агрегация кинетикасын есептеу үшін түрлендірілген теңдеулер ұсынылды. Сонымен қатар, түрлі тәртіптік кластерлердің толық шоғырлануына қажетті кинетикалық теңдеулердің дәл шешімдері де алынды. Бірінші және екінші тәртіпті мономерлердің ерімейтін фазасы химиялық көзі бар жүйелеріндегі агрегация процесінің негізгі басқару параметрлері белгіленді. Бұл параметрлердің маңыздылығы сандық эксперимент көмегімен дәлелденді. Химиялық реакция тәртібі ерімейтін өнім реакциясының агрегация процесінің сипатын өзгертпейтіні көрсетілді. Негізінде, жүйедегі ерімейтін фаза кластерлерінің жалпы санының ең жоғарғы нәтижесіне сәйкес келетін кезең екі жағдайда да бір басқару параметрімен анықталады. Бірақ, химиялық реакция тәртіптеріне байланысты осы параметрді есептеуге қатысы басқаша.

Сведения об авторах

ФИО	ученая степень	звание	место работы	e-mail
Д. Дайрабай		магистр	ЮКГУ им.М.Ауэзова	din_303@mail.ru 87788880188
В.Г. Голубев	д.т.н.	профессор	ЮКГУ им.М.Ауэзова	golubev_50@mail.ru 87017356145
О.С. Балабеков	д.т.н.	Академик НАН РК	ЮКГПИ Шымкент	87024419133
А.М. Бренер	д.т.н.	профессор	ЮКГУ им.М.Ауэзова	amb_52@mail.ru 87017198939

Поступила 22.09.2015 г.

Правила оформления статьи для публикации в журнале смотреть на сайте:

[www:nauka-nanrk.kz](http://www.nauka-nanrk.kz)

<http://www.bulletin-science.kz/index.php/ru/>

Редакторы *М.С. Ахметова, Д.С. Аленов, Т.А. Апендиев*
Верстка на компьютере *С.К. Досаевой*

Подписано в печать 11.12.2015.
Формат 60x881/8. Бумага офсетная. Печать – ризограф.
15,2 п.л. Тираж 2000. Заказ 6.