

УДК 532.529

Л.М. Мусабекова*, А.С. Муратов, Г.Ш. Досанова, О. Жантасов

т.ғ.д., профессор, М.Әуезов атындағы ОҚУ, Шымкент, Қазақстан

т.ғ.д., профессор, М.Әуезов атындағы ОҚУ, Шымкент, Қазақстан

оқытушы, М.Әуезов атындағы ОҚУ, Шымкент, Қазақстан

оқытушы, М.Әуезов атындағы ОҚУ, Шымкент, Қазақстан

*Корреспондент автор: mleyla@bk.ru

ҚҰБЫРЛЫҚ ЖӘНЕ АҒЫНДЫ РЕАКТОРЛАРДАҒЫ АГРЕГАЦИЯЛЫҚ ПРОЦЕСТЕРДІҢ КОМПЬЮТЕРЛІК МОДЕЛІН ӘЗІРЛЕУ

Түйін

Гетерогенді полидисперсті ортадағы агрегацияны сипаттау үшін бөлшектердің кездейсоқ жүрісін және үш өлшемді стохастикалық торлардағы агрегацияны пайдалана отырып, дискретті оқиғаларды модельдеу (DES) парадигмасына негізделген кластерлік агрегацияны модельдеудің жаңа тәсілі қолданылды. Ұсынылған тәсіл бөлшектердің дрейфінің кездейсоқ уақыттарының әр түрлі иерархиясын және аппараттың жұмыс көлемінің әртүрлі облыстарындағы әртүрлі ретті кластерлердің жинақтау уақыттарын есепке алуға мүмкіндік береді.

Әзірленген есептеу әдісі бұл процесті тиімді модельдейді: ол бір кластердің пайда болуымен екі немесе одан да көп бөлшектердің соқтығысу ықтималдығын анықтаудан тұрады. Дегенмен, бұл ықтималдықты есептеу жеке тапсырма болып табылады, ол бөлшектерді кластерге біріктірудің физикалық механизмінің ерекшеліктерін ескеруді талап етеді. Физикалық механизм әр түрлі жүйелерде әр түрлі болуы мүмкін екенін ескере отырып (мысалы, зарядталған немесе зарядталмаған бөлшектер, аморфты немесе кристалды кластерлер және т.б.), модельдің басқару параметрлері сенімділігін жоғалтады, бұл модельдеу нәтижелерін түсіндіруді қиындатады.

Кілттік сөздер: кластерлік агрегацияны модельдеу, оқиғаны дискретті модельдеу парадигмасы, полидисперсті орта, үш өлшемді стохастикалық торларда агрегация.

Кіріспе

Жұмыстың мақсаты - сериялық реакторлар мен ағындық реакторлардағы аралас кинетикаға қатысты агрегация процестерін сипаттау үшін авторлар бұрын алған модельдер мен нәтижелерді жалпылау.

Осы саладағы зерттеушілердің көптен бергі қызығушылығына және көптеген көрнекті еңбектерге қарамастан, көптеген мәселелердің теориялық талдауы нашар дамыған күйінде қалып отыр [1].

1.Бірінші көрінетін мәселе-бөлшектердің екілік соқтығысуын есепке алатын Смолуховский немесе Беккер-Деринг теңдеулеріне негізделген классикалық модельдер жоғары тығыздықтағы дисперсті жүйелердегі жылдам процестерге аз қолданылады [2].

Тағы бір ашық мәселе кластерлердің жағдайы мен қазіргі күйінің олардың ішкі және беткі құрылымына әсерін сипаттау болып табылады, бұл өз кезегінде агрегациялық белсенділікке және агрегация кинетикасына әсер етеді [3].

Бұл процесті жақсы модельдейтін тәсіл екі немесе одан да көп бөлшектердің соқтығысуы біріккен кластердің пайда болуымен аяқталу ықтималдығын орнату болып табылады [7]. Алайда, шын мәнінде, бұл ықтималдықты есептеу жеке міндет болып табылатындықтан, оның тұжырымы мен шешімі бөлшектерді бір кластерге байланыстырудың физикалық механизмінің ерекшеліктеріне негізделуі керек [8].

Әртүрлі жүйелердегі физикалық механизм әртүрлі болуы мүмкін болғандықтан (зарядталған немесе зарядсыз бөлшектер, аморфты немесе кристалдық кластерлер және т.б.), сондықтан модельдің басқару параметрлері өзінің сенімділігін жоғалтады, ал модельдеу нәтижелерін түсіндіру қиынға соғады[9].

Белгіленген мәселелер көптеген технологиялық процестердің инженерлік есептеулерінің мүмкіндіктерін айтарлықтай шектейді және оңтайлы басқару параметрлерін анықтау бойынша ұсыныстардың сенімділігін төмендетеді [4].

Алдыңғы бірнеше мақалаларда [5] авторлар кинетикалық модельдік теңдеулерге емес, агрегаттарды қалыптастыру үшін стохастикалық торлар арқылы кездейсоқ жүретін бөлшектердің дискретті оқиғаларды модельдеу (DES) парадигмасына негізделген бұл мәселеге жаңа көзқарасты ұсынды [6]. Бұл тәсілді гетерогенді полидисперстік жүйелердегі агрегацияны сипаттау үшін қолдануға болады және белгіленген шектеулерді жоюға болады.

Есептің қойылуы және сандық эксперимент нәтижелері. Тұжырымдама және алгоритм

Тұжырымдама алғаш рет [5]-те ұсынылған, содан кейін [10]-да ағынды құбырлы реакторлар жағдайына бейімделген алгоритмге негізделген. Диффузия және агрегация процестері жүретін аймақ бекітілген кеңістіктік тормен жабылады деген идея тұрады.

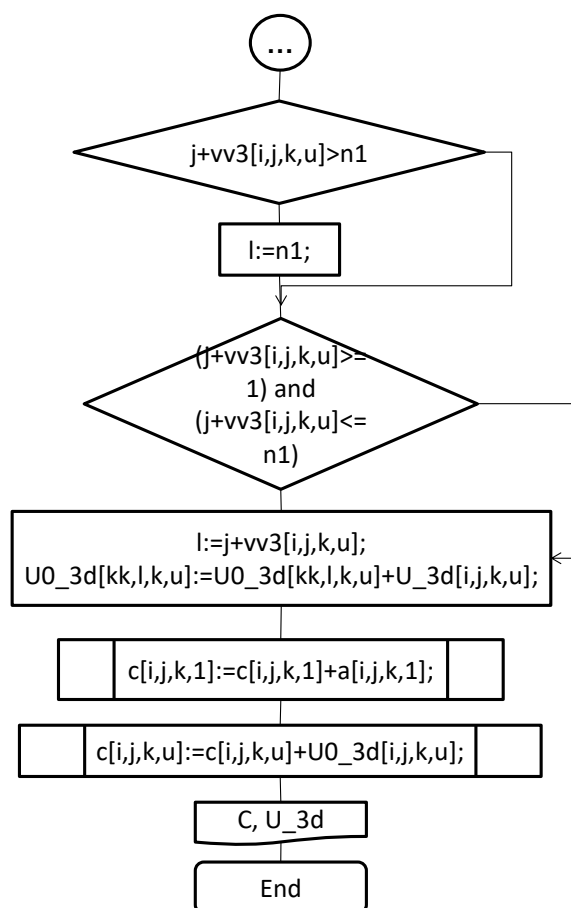
Негізгі ағындағы бөлшектердің кездейсоқ дрейфі немесе миграциясы нәтижесінде пайда болатын торлы ұяшықтардағы фракциялық құрамның жергілікті таралуының өзгерістері, сондай-ақ жинақтау процестері дискретті модельдеу парадигмасына (DES) сәйкес сипатталған [6].

Диффузиямен шектелген агрегация (DLA) жағдайында кластерлік агрегация соқтығысқан сәтте бірден пайда болады. Тор моделі шеңберінде мұны жалпы ұяшыққа түсетін кластерлер деп түсіндіруге болады [5]. Аралас кинетика [12] жағдайында уақыт жылдамдығының шкала бірлігі бір ұяшыққа түсетін кластерлердің коагуляциясының тән уақытына тең деп алынды. Бұл бір ұяшыққа жеткен бөлшектердің міндетті түрде бір кластер құруға уақыты жоқ, бірақ бөлек дрейфті жалғастыра беруі мүмкін дегенді білдіреді. Біздің модельдің негізгі алғышарты бөлшектер ортақ ұяшыққа еніп, келесі уақыт бірлігінде қайтадан ортақ ұяшыққа ауысса ғана коагуляцияланады деген болжам болып табылады [5].

Бұл мақалада авторлардың алдыңғы жұмыстарынан айырмашылығы, 3D параметрінде DLA үшін де, аралас кинетика үшін де ағын реакторында кластерді біріктіру процесін сипаттайтын алгоритм әзірленді. Сандық эксперимент нәтижелерін физикалық мағыналы интерпретациялау, қатаң айтқанда, тек 3D модельдер үшін физикалық мағынаға ие екенін атап өткен жөн.

Оның үстіне мұнда қолданылған алгоритм өзінің әдістемелік мазмұнында біздің алдыңғы жұмыстарымызда [5, 10, 11] 2D жағдайына арналған әзірленген және егжей-тегжейлі сипатталған алгоритмге сәйкес келеді. Есептеу процесі кезінде төрт үш өлшемді массив қалыптасады

Бірінші массив барлық торды әр уақыт бірлігінде олардың дрейфі мен жинақталуы процесінде алынған әртүрлі ретті кластерлермен модельдейді. Екінші массив реакторға берілген орташа жылдамдықпен түсетін дисперсті қоспаның жаңа ағынымен реакторға кіретін кластерлері бар ұқсас торды модельдейді. Есептеу блок-схемасының негізгі бөлігі 1-суретте көрсетілген.



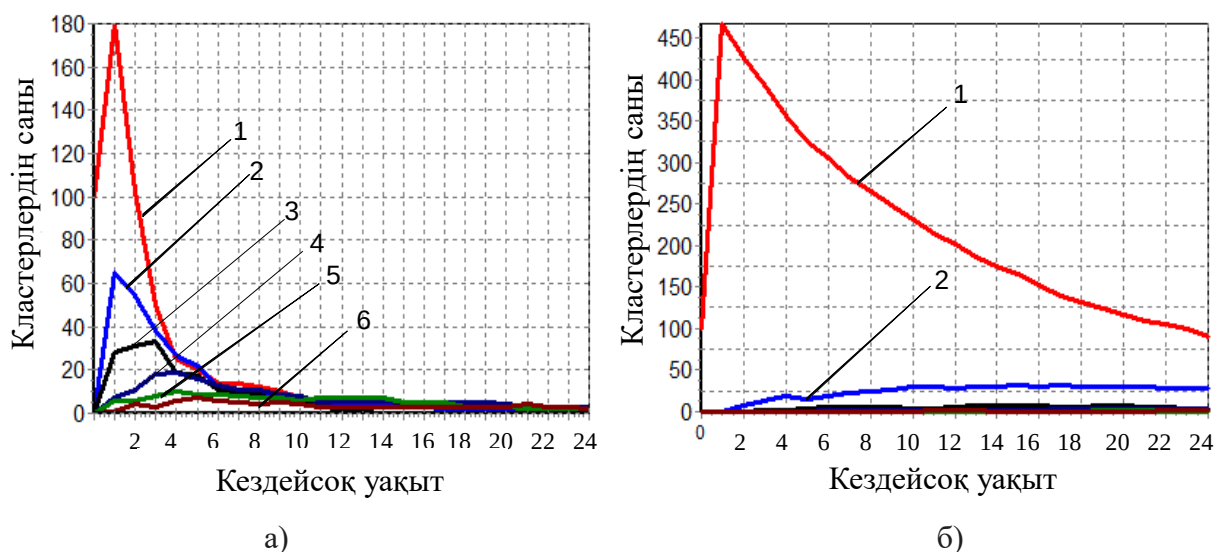
Сурет 1. Есептің сұлбасы

Үшінші массив есептеу циклінің соңындағы жағдайды имитациялайды және келесі цикл үшін бастапқы жағдайды жасайды. Ол алдыңғы екі массивтің қосындысы ретінде қалыптасады. Төртінші массив әрбір уақыт бірлігіндегі әрбір ұяшықтағы бөлшектердің соқтығысу санын көрсетеді. Бұл алгоритм үш өлшемді жағдайға қолданылатын сандық эксперимент үшін пайдаланылды.

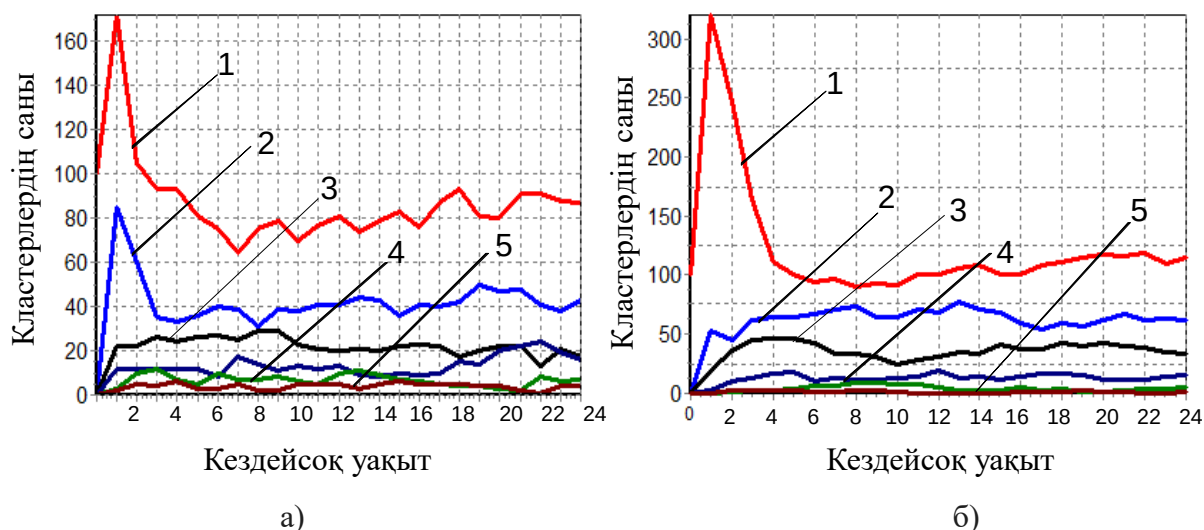
Модельдеу нәтижелері

Есептеу процесінде кластерлер уақыт бойынша және реактордағы ағын жылдамдығына, әртүрлі ретті соқтығыстардың санына (яғни, бір ұяшықта соқтығысатын кластерлердің санына) байланысты реактор көлемінде ағын бағыты бойынша ретпен бөлінді. көлемі. Кез келген кластердің реті оны құрайтын бөлшектердің-ядролардың санын білдіреді, ал кез келген бөлшек-ядроның реті 1-ге тең деп қабылданады [2]. Барлық тәжірибелер сериялық реактор мен ағынды реактор үшін параллельді түрде жүргізілді.

2 және 3-суреттер тығыз үш өлшемді массивтер үшін кейбір сандық нәтижелерді көрсетеді, мұнда әрбір есептеу нүктесі есептеулердің он сериясы бойынша орташаланады.



Сурет 2. Пакеттік реактордағы әртүрлі ретті кластерлер санының уақытқа тәуелділіктері, кластерлік тапсырыстар: 1-бірінші, 2-екінші, 3-үшінші, 4-төртінші, 5-бесінші, 6-алтыншы. а- DLA агрегациясы; б- аралас кинетика



Сурет 3. Ағындық реактордағы әртүрлі ретті кластерлер санының уақытқа тәуелділіктері ($w = 4$), кластерлік реттер: 1-бірінші, 2-секунд, 3-үшінші, 4-төртінші, 5-бесінші. а- DLA агрегациясы; б- аралас кинетика

Сандық эксперименттер шығыны $w = 0$ (кезеңдік реактор) және $w = 2; 4; 6$ ағын жылдамдығы үшін квадрат қимасы 5×5 және ұзындығы 20 параллелепипед пішініндегі ағынды реакторды имитациялайтын үш өлшемді массивтерде жүргізілді; Кластерлердің хаотикалық дрейфтері негізгі ағынның жылдамдығына қойылды және әрбір кластердің қозғалғыштығы оның ретіне байланысты деп есептелді [13]. Массив тығыз деп саналды, өйткені бастапқы кезде бірінші ретті кластерлер әрбір тор ұяшығында бір-бірден орналасты. Сонымен қатар, негізгі ағынды құбырлы реакторға бірінші ретті кластерлер де енгізілді деп болжанған. Бұл кластерлерді біріктіру тек реактор көлемінде басталады [14].

2-суретте кезеңдік реактор үшін жүргізілген сандық тәжірибелердің нәтижелері көрсетілген. Пакеттік реактор үшін үш өлшемді жағдайда алынған нәтижелер екі өлшемді

жағдайдағы нәтижелерден сапалық жағынан ерекшеленбейді. Бұл мәліметтер 3-суреттегі ағындық реактор үшін алынған сандық мәліметтермен салыстыру үшін осында көрсетілген.

Сандық тәжірибелердің нәтижелері аралас кинетика аймағында жүретін агрегация процестері жағдайында жоғары ретті кластерлердің қалыптасу жылдамдығы айтарлықтай төмендейтінін көрсетеді. Ағындық реакторларда бұл тежелу біршама тегістеледі. Бұл құбылысты реактордың ұзындығы бойынша әртүрлі ретті кластерлердің жалпы концентрациясының теңестірілуімен түсіндіруге болады.

Әртүрлі ретті кластерлердің шоғырлануындағы күрт ауытқулар мен шырларды негізгі ағынның w жылдамдығының таңдалған реттері мен кездейсоқ бөлшектердің дрейф амплитудасының салыстырмалы және жақын болуымен түсіндіруге болады. Айта кету керек, бұл құбылыс егжей-тегжейлі зерттеуді қажет етеді.

Қорытындылар

Тәжірибе көрсеткендей, ағынды реакторға қарағанда, процестің бастапқы кезеңінде кезеңдік реакторда агрегация кезінде көп бөлшектердің соқтығысуы айтарлықтай көп болады. Аралас кинетика жағдайында агрегация интенсивтілігіне бірнеше бөлшектердің соқтығысуы әсері де реактордың ұзындығы бойынша таралады және ағындық реакторда мұндай маңызды рөл атқармайды.

Бұл құбылыс әсіресе үш сипаттамалық уақыттың бәсекелестігі салдарынан ағын жылдамдығы артқанда айқын көрінеді: кездейсоқ дрейф уақыты, кинетикалық агрегация уақыты және құрылғының жұмыс аймағында бөлшектердің шоғырлану уақыты. Бұдан шығатыны, ағын жылдамдығы реактордың өнімділігіне ғана емес, сонымен қатар шығыстағы дисперсияның фракциялық құрамына да әсер етеді. Бұл реактор арқылы өтетін орташа ағын жылдамдығы қажетті фракциялық құрамды тұрақтандыру үшін бақылау параметрі ретінде қызмет ете алады деген қорытындыны қолдайды. Ағын жылдамдығының агрегация кинетикасына әсері үш өлшемді жағдайда екі өлшемді модельге қарағанда әлдеқайда анық көрінеді.

Әдебиеттер тізімі

1. Shadrack J.B., Klein R., Site L.D., 2018, Structural Locality and Early Stage of Aggregation of Micelles in Water: An Adaptive Resolution Molecular Dynamics Study, Advanced Theory and Simulations, 1, DOI: 10.1002/adts.201800025.
2. Wattis J.A., 2006, An introduction to mathematical models of coagulation–fragmentation processes: a discrete deterministic mean-field approach, Physica D: Nonlinear Phenomena, 222(1), 1-20.
3. Yassen S., Mansoori G.A., 2018, Asphaltenes aggregation due to waterflooding (A molecular dynamics simulation study), Journal of Petroleum Science and Engineering, 170, 177–183.
4. Chowdhury I., Mansukhani N. D., Guiney L. M., Hersam M. C., Bouchard D., 2015, Aggregation and stability of reduced graphene oxide: complex roles of divalent cations, pH, and natural organic matter, Environmental Science & Technology, 49(18), 10886-10893.
5. Brener A.M., Musabekova L.M., Jamankarayeva M.A., 2017, Stochastic Lattice Model of Aggregation in Heterogeneous Disperse Media, Chemical Engineering Transactions, 60, 70-84.
6. Zeigler B.P., Sarjoughian H.S., 2012, Guide to Modeling and Simulation of Systems of Systems (Simulation Foundations, Methods and Applications), Springer-Verlag, London, UK.
7. Kébaili N., Benrezzak S., Cahuzac P., Masson A., Bréchnignac C., 2009, Diffusion of silver nanoparticles on carbonaceous materials. Cluster mobility as a probe for surface characterization, The European Physical Journal D, 52(1-3), 115-118.
8. Tammet H., 1995, Size and mobility of nanometer particles, clusters and ions, Journal of Aerosol Science, 26(3), 459-475.
9. Morganti P., Del Ciotto P., Stoller M., Chianese A., 2016, Antibacterial and Anti-inflammatory Green Nanocomposites, Chemical Engineering Transactions, 47, 61-66.

10. Chen H., Lin L., Li H., Li J., Lin J.M., 2015, Aggregation-induced structure transition of protein-stabilized zinc/copper nanoclusters for amplified chemiluminescence, *ACS Nano*, 9(2), 2173-2183.
11. Musabekova L.M., Zhumataev N.S., Yunussova A.A., Dausheyeva N.N., Zhidebayeva A.N., 2019, Development of the Stochastic Lattice Model for Describing Aggregation Processes in the Polydisperse Systems (3D Case), *Chemical Engineering Transactions*, 76, 823-828.
12. Мусабекова Л. Разработка компьютерной стохастической модели агрегации в дисперсных системах//Сборник научных трудов Международного Косыгинского форума. Международного научно-технического симпозиума «Вторые международные Косыгинские чтения: «Энергоресурсоэффективные экологически безопасные технологии и оборудование», приуроченные к 100-летию РГУ имени А.Н. Косыгина».Т.2., Москва. Ноябрь, 2019. с.194-199.
13. Zhou X.H., Huang B.C., Zhou T., Liu Y.C., Shi H.C., 2015, Aggregation behavior of engineered nanoparticles and their impact on activated sludge in wastewater treatment, *Chemosphere*, 119, 568-576.
14. Zatevakhin M.A., Ignatyev A.A., Govorkova V.A., 2015, Numerical simulation of Brownian coagulation under turbulent mixing conditions, *Izvestiya, Atmospheric and Oceanic Physics*, 51(2), 148-155.

References

1. Shadrack J.B., Klein R., Site L.D., 2018, Structural Locality and Early Stage of Aggregation of Micelles in Water: An Adaptive Resolution Molecular Dynamics Study, *Advanced Theory and Simulations*, 1, DOI: 10.1002/adts.201800025.
2. Wattis J.A., 2006, An introduction to mathematical models of coagulation–fragmentation processes: a discrete deterministic mean-field approach, *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 222(1), 1-20.
3. Yassen S., Mansoori G.A., 2018, Asphaltenes aggregation due to waterflooding (A molecular dynamics simulation study), *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 170, 177–183.
4. Chowdhury I., Mansukhani N. D., Guiney L. M., Hersam M. C., Bouchard D., 2015, Aggregation and stability of reduced graphene oxide: complex roles of divalent cations, pH, and natural organic matter, *Environmental Science & Technology*, 49(18), 10886-10893.
5. Brener A.M., Musabekova L.M., Jamankarayeva M.A., 2017, Stochastic Lattice Model of Aggregation in Heterogeneous Disperse Media, *Chemical Engineering Transactions*, 60, 70-84.
6. Zeigler B.P., Sarjoughian H.S., 2012, *Guide to Modeling and Simulation of Systems of Systems (Simulation Foundations, Methods and Applications)*, Springer-Verlag, London, UK.
7. Kébaili N., Benrezzak S., Cahuzac P., Masson A., Bréchnignac C., 2009, Diffusion of silver nanoparticles on carbonaceous materials. Cluster mobility as a probe for surface characterization, *The European Physical Journal D*, 52(1-3), 115-118.
8. Tammet H., 1995, Size and mobility of nanometer particles, clusters and ions, *Journal of Aerosol Science*, 26(3), 459-475.
9. Morganti P., Del Ciotto P., Stoller M., Chianese A., 2016, Antibacterial and Anti-inflammatory Green Nanocomposites, *Chemical Engineering Transactions*, 47, 61-66.
10. Chen H., Lin L., Li H., Li J., Lin J.M., 2015, Aggregation-induced structure transition of protein-stabilized zinc/copper nanoclusters for amplified chemiluminescence, *ACS Nano*, 9(2), 2173-2183.
11. Musabekova L.M., Zhumataev N.S., Yunussova A.A., Dausheyeva N.N., Zhidebayeva A.N., 2019, Development of the Stochastic Lattice Model for Describing Aggregation Processes in the Polydisperse Systems (3D Case), *Chemical Engineering Transactions*, 76, 823-828.
12. Musabekova L. Razrabotka komp'yuternoj stohasticheskoy modeli agregacii v dispersnyh sistemah//Сbornik nauchnyh trudov Mezhdunarodnogo Kosygin'skogo foruma. Mezhdunarodnogo

nauchno-tehnicheskogo simpoziuma «Vtorye mezhdunarodnye Kosyginские chteniya: «Jenergoresursojeffektivnye jekologicheski bezopasnye tehnologii i oborudovanie», priurochennye k 100-letiju RGU imeni A.N. Kosygina». T.2., Moskva. Nojabr', 2019. c.194-199.

13. Zhou X.H., Huang B.C., Zhou T., Liu Y.C., Shi H.C., 2015, Aggregation behavior of engineered nanoparticles and their impact on activated sludge in wastewater treatment, Chemosphere, 119, 568-576.

14. Zatevakhin M.A., Ignatyev A.A., Govorkova V.A., 2015, Numerical simulation of Brownian coagulation under turbulent mixing conditions, Izvestiya, Atmospheric and Oceanic Physics, 51(2), 148-155.

Л.М. Мусабекова*, А.С. Муратов, Г.Ш. Досанова, О. Жантасов

д.т.н., профессор, ЮКУ имени М. Ауэзова, Шымкент, Казахстан

д.т.н., профессор, ЮКУ имени М. Ауэзова, Шымкент, Казахстан

преподаватель, ЮКУ имени М. Ауэзова, Шымкент, Казахстан

преподаватель, ЮКУ имени М. Ауэзова, Шымкент, Казахстан

*Автор для корреспонденции: mleyla@bk.ru

РАЗРАБОТКА КОМПЬЮТЕРНОЙ МОДЕЛИ ПРОЦЕССОВ АГРЕГАЦИИ В ТРУБЧАТЫХ И ПРОТОЧНЫХ РЕАКТОРАХ

Аннотация

Новый подход к моделированию агрегации кластеров, основанный на парадигме моделирования дискретных событий (DES) с помощью случайного блуждания частиц и агрегации на трехмерных стохастических решетках, был применен для описания агрегации в неоднородной полидисперсной среде. Представленный подход позволяет учитывать различную иерархию случайных времен дрейфа частиц и времен агрегирования кластеров разного порядка в разных областях рабочего объема аппарата.

Разработанная методика расчета эффективно моделирует данный процесс: она заключается в определении вероятности столкновения двух или более частиц с образованием единого кластера. Тем не менее, расчет этой вероятности представляет собой отдельную задачу, которая требует учета особенностей физического механизма объединения частиц в кластер. Учитывая, что физический механизм может различаться в различных системах (например, заряженные или незаряженные частицы, аморфные или кристаллические кластеры и т.д.), управляющие параметры модели теряют свою определенность, что делает результаты моделирования трудными для интерпретации.

Ключевые слова: моделирование кластерной агрегации, парадигма дискретного моделирования событий, полидисперсная среда, агрегация в трехмерных стохастических решетках.

L.M. Musabekova*, A.S. Muratov, G.Sh. Dosanova, O. Zhantasov

Dr.Tech.Scie., Professor, M.Auezov South Kazakhstan University, Shymkent, Kazakhstan

Dr.Tech.Scie., Professor, M.Auezov South Kazakhstan University, Shymkent, Kazakhstan

Lecturer, M.Auezov South Kazakhstan University, Shymkent, Kazakhstan

Lecturer, M.Auezov South Kazakhstan University, Shymkent, Kazakhstan

*Corresponding author's email: mleyla@bk.ru

DEVELOPMENT OF A COMPUTER MODEL OF AGGREGATION PROCESSES IN TUBE AND FLOW REACTORS

Abstract

A new approach to modeling cluster aggregation based on the discrete event simulation (DES) paradigm using random particle wandering and aggregation on three-dimensional stochastic lattices has been applied to describe aggregation in a heterogeneous polydisperse medium. The presented approach allows taking into account different hierarchy of random particle drift times and aggregation times of clusters of different order in different regions of the working volume of the apparatus.

The developed calculation technique effectively models this process: it consists in determining the probability of collision of two or more particles with the formation of a single cluster. Nevertheless, the calculation of this probability is a separate problem, which requires taking into account the peculiarities of the physical mechanism of particle clustering. Given that the physical mechanism may differ in different systems (e.g., charged or uncharged particles, amorphous or crystalline clusters, etc.), the governing parameters of the model lose their certainty, which makes the modeling results difficult to interpret.

Keywords: cluster aggregation modeling, the paradigm of discrete event modeling, polydisperse environment, aggregation on three-dimensional stochastic lattices.