

MPHTI 61.13.23 : 61.01.77

Л.М. Мусабекова¹ – основной автор, | ©
Г.Ы. Ермекбаева²



¹Д-р техн. наук, и.о. профессора, ²Ст. преподаватель

ORCID

¹<https://orcid.org/0000-0001-8712-2446> ²<https://orcid.org/0009-0005-5828-5023>



¹Южно-Казахстанская медицинская академия, Шымкент, Казахстан



²Южно-Казахстанский университет им. М. Ауэзова, Шымкент, Казахстан



²ermgulg22@mail.ru

<https://doi.org/10.55956/BYIE3871>

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА АГРЕГАЦИИ В ДИСПЕРСНЫХ СИСТЕМАХ РЕАКТОРОВ ПЕРИОДИЧЕСКОГО И ПРОТОЧНОГО ТИПА

Аннотация. В работе показана разработка методики моделирования процесса агрегации кластеров. Методика основана на теории вероятности случайного блуждания частиц, агрегации в объёме стохастической решетки и концепции моделирования дискретных событий (МДС). На основе методики была разработана программа расчета процесса агрегации и проведены серии численных экспериментов. В качестве начальных данных были рассмотрены разные случаи заполнения частиц случайным образом. В качестве примера была принята неоднородная полидисперсная среда. Разработанная модель позволяет получить зависимости эволюции случайного дрейфа частиц, времени агрегирования кластеров первого-шестого порядков в объёме аппарата.

Ключевые слова: дисперсные системы, случайное блуждание частиц, процессы агрегации, стохастическая решетка, агрегационные кластеры.



Мусабекова, Л.М. Моделирование процесса агрегации в дисперсных системах реакторов периодического и проточного типа [Текст] / Л.М. Мусабекова, Г.Ы. Ермекбаева // Механика и технологии / Научный журнал. – 2026. – №3(93). – С. 421-428. <https://doi.org/10.55956/BYIE3871>

Введение. Процессы агрегации частиц в дисперсных системах играют ключевую роль во многих технологических и природных процессах, включая химические реакторы, системы очистки, нанотехнологии, материалы с заданными структурными свойствами, в медицине и в фармации. Несмотря на длительный интерес исследователей и значительное число фундаментальных работ, теоретическое и численное описание агрегации в плотных полидисперсных средах до настоящего времени остаётся недостаточно развитым [1].

Сложности в задачах по данной теме состоят в том, что теория и модели, составленные по системе Смолуховского и Беккера-Деринга, показывают существование только двойных столкновений частиц. Но они не используются для скоростных процессов в плотных дисперсных системах [2].

В работе были рассмотрены задачи: влияние возраста, состояние процесса сворминга (агрегации) кластера, влияние скорости и кинетики

агрегации на структуру кластера [3]. В задачу моделирования процесса агрегации включены образования кластера при соединении двух, трех и четырех частиц [4].

В среде аппарата происходило столкновение двух и более частиц по определенной вероятности, которую мы моделировали в зависимости от физических свойств частиц [5]. Свойства частиц в разных средах могут различаться и зависят от физических свойств среды. В связи с этим возникали сложности при описании поведения частиц и моделирования процесса агрегации [6-8].

Данная проблема осложняла разработку методики расчета технологических процессов и расчет оптимальных параметров управления для процессов агрегации [9-11].

В работах [2,12] был представлен новый подход к этой задаче, который базировался не на аналитической модели, а на парадигме моделирования дискретных событий (МДС). Здесь рассматривалось случайное блуждание частиц по решеткам с образованием кластеров [9]. Эта методика может быть расширена для описания сворминга (агрегации) в гетерогенных полидисперсных системах.

Условия и методы исследований. В представленной нами модели перемещение всех свободных частиц происходило одновременно, учитывалось быстрое взаимодействие частиц между собой в первой серии эксперимента: «быстрой» агрегации, и также совместные перемещения частиц в ячейки решетки для второго случая: «замедленной» агрегации. Модель описывает трехмерную область и предполагает дрейф частиц в горизонтальном и вертикальном направлениях. Для построения алгоритма трехмерного моделирования к алгоритму для плоского случая был добавлен третий параметр – глубина.

Для построения модели процессов агрегации с диффузией была рассмотрена стохастическая объемная решётка. В модели было выделено изменение структуры фракционного содержания дисперсии в клетках решетки через определённые интервалы времени. Процессы кинетики, сворминга (агрегации), диффузии определялись в единой системе.

Рассматривали три случая:

1. Все ячейки решетки заполнены частицами;
2. Частицы в решётке расположены в шахматном порядке;
3. Частицы образовали квадратную область.

Начальное состояние- 1 во всех ячейках. Далее на каждом шаге были выбраны компоненты скорости по горизонтали и вертикали из выборки (-3; -2; -1; 0; 1; 2; 3).

Для процесса агрегации, которая сопровождалась диффузией частиц и случайным перемещением частиц и кластеров, объединение частиц в единый кластер происходило моментально, когда частицы соединялись. Для стохастической объемной модели с ячейками, данный момент определяется как появление частиц и кластеров в одной ячейке [5].

Для процесса агрегации со сложной кинетикой [8] масштаб интервала времени принимался равным к характерному времени создания агрегатов, которые приходили в одну ячейку. Здесь можно рассматривать, что движение частиц, которые появлялись одновременно в одной ячейке, могли соединиться в один кластер, но и могли продолжать двигаться раздельно.

В методике расчета движения частицы, мы предполагали, что частица движется в вертикальном и горизонтальном направлении по случайному

закону. Скорость движения частицы зависит от порядка кластера. Более плотные частицы двигаются медленнее, это соответствует физике случайного перемещения частиц по объёму аппарата. Перемещение частиц для порядка 1 и 2 мы выбирали в диапазоне от -3 до 3. Движение частиц в граничных областях мы обнуляли. Начальное состояние частиц предполагалось быть также разреженным в виде шахматного порядка или по квадрату. Рассматривали случаи с периодическим и проточным реактором. В случае проточного реактора в реактор поступал свежий поток частиц с определенной скоростью по горизонтали.

Результаты исследований и их обсуждение. На основе теории, изложенной в предыдущем разделе методики расчета, была разработана на языке Object Pascal программа для реализации модели. Алгоритм и схема расчета в среде RAD Studio, используемого для численных исследований с учетом случайных движений потока, показан ниже:

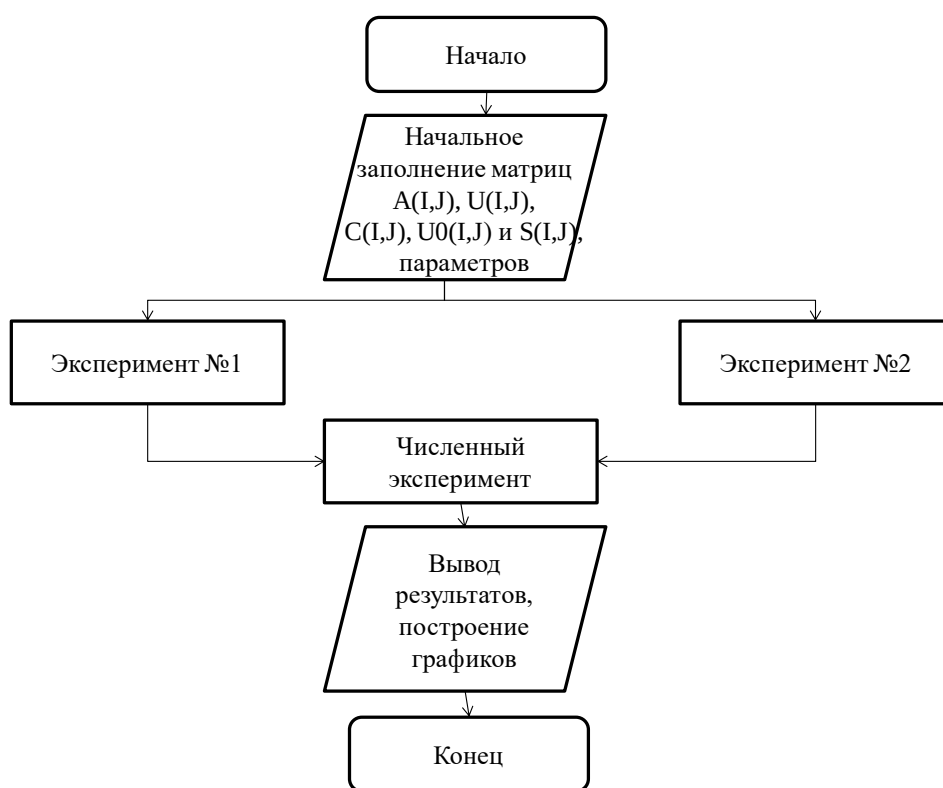


Рис. 1. Схема расчета алгоритма модели процесса агрегации

Было замечено, что для периодического реактора в пространственной решетке агрегаты высоких порядков могут перемещаться в соседние ячейки в определённые интервалы времени. Движение частиц моделировали путем случайного дрейфа в четырех направлениях: вверх, вниз, вправо, влево.

Следующее предположение состояло в том, что кластеры и частицы, которые появились на граничной линии решетки, не двигаются вправо от границы аппарата, они могут только перемещаться вверх, влево и вниз случайным образом.

Наша модель была построена следующим образом: в начальный момент времени частицы размещаются по ячейкам решетки по одной в

каждой ячейке. Далее они двигаются в случайном направлении по четырем сторонам на одну ячейку, либо стоят на месте в каждый такт времени. Соединение частиц происходит быстро для случая агрегации с диффузионным движением при попадании частиц в одну ячейку.

В компьютерной модели были созданы два трехмерных массива. Первая матрица была для всей решетки с кластерами порядков от 1 до 6, которые получились в результате перемещения и сворминга для каждого интервала времени. Во второй матрице показано количество столкновений кластеров всех порядков в каждый момент времени.

Для модели с проточным реактором, в реактор поступал свежий поток частиц со скоростью w , которую принимали равной от двух до десяти. Описание модифицированного алгоритма расчета показано ниже, расширенного по работам [12,13]. Во время расчета сформировались несколько трехмерных и четырехмерных матриц.

Первая матрица показывала объем решетки с кластерами порядков от одного до шести, которые образовались в результате дрейфа и сворминга в каждый интервал времени. Вторая матрица показывала аналогичную решетку с потоком частиц, входящими в проточный реактор со средней горизонтальной скоростью w равной от двух до десяти условных единиц частиц в единицу времени. Третья матрица имитировала структуру частиц в конце одного такта времени и создавала исходную структуру для следующего такта времени. Она создавалась как сумма двух предыдущих матриц. Четвертая матрица показывала количество столкновений кластеров в решетке в каждый момент времени.

Программа расчета по описанному алгоритму модели была реализована нами в среде программирования RAD Studio Delphi 12. Все результаты расчетов по перемещению частиц записаны в текстовый файл (рис. 2). Подсчитаны количество кластеров порядка 1, 2, 3, 4, 5 и 6, количество столкновений, количество кластерных порядков по длине реактора, порядки кластеров в каждой ячейке реактора и порядки кластеров для свежего потока U . Построены графики: количество кластеров по порядкам от дискретного времени, количество столкновений по порядкам от дискретного времени и количество кластеров по порядкам от длины реактора в разные моменты времени.

Численный эксперимент проводили при значениях параметров: скорость потока $w=0,2,4,8,10$, размеры решетки: $n1:=4,5,8$ (кол-во строк, ширина), $n2:=10,20,40,100$ (длина) и $n3=5$ (глубина). Ниже на рисунке 3 показан построенный график по проведенному эксперименту.

Результаты численных экспериментов показали, что количество столкновений частиц порядка выше второго в периодическом реакторе при диффузионной агрегации составляло около 24%, при смешанной агрегации – около 23%. В режиме проточного реактора (скорость свежего потока $w=2$) количество столкновений частиц порядка выше второго при DLA-агрегации составляло около 21%, при смешанной агрегации – около 28%. То есть это подтверждает предположение о вкладе столкновений частиц порядка 2 и выше при образовании кластеров.

Файл	Правка	Формат	Вид	Справка
Numerical experiment 1- All units				
Table 5X20 X5 w=2				
Step 1				
C				
f= 1				
2	1	2	0	3
3	3	5	1	2
2	0	1	4	1
1	0	2	0	0
0	4	7		
0	0	2	1	2
1	1	0	0	2
3	0	2	1	1
3	1	0	3	2
5				
0	0	1	0	0
1	0	0	1	2
0	0	2	0	0
1	0	3	1	1
2				
0	1	0	2	0
0	0	1	0	0
2	2	3	1	0
2	2	2	1	0
4				
0	2	2	4	3
2	2	4	3	2
3	0	2	2	3
2	2	2	0	6
f= 2				
0	1	0	1	1
0	2	1	1	2
1	1	2	1	0
2	0	0	0	1
1	1	0	0	0
0	2	0	0	0
0	0	0	0	0
1	0	1	0	1
0	0	0	0	0
0	1	1	0	1
1	1	0	1	1
0	1	1	0	1

Рис. 2. Результаты расчетов в файле

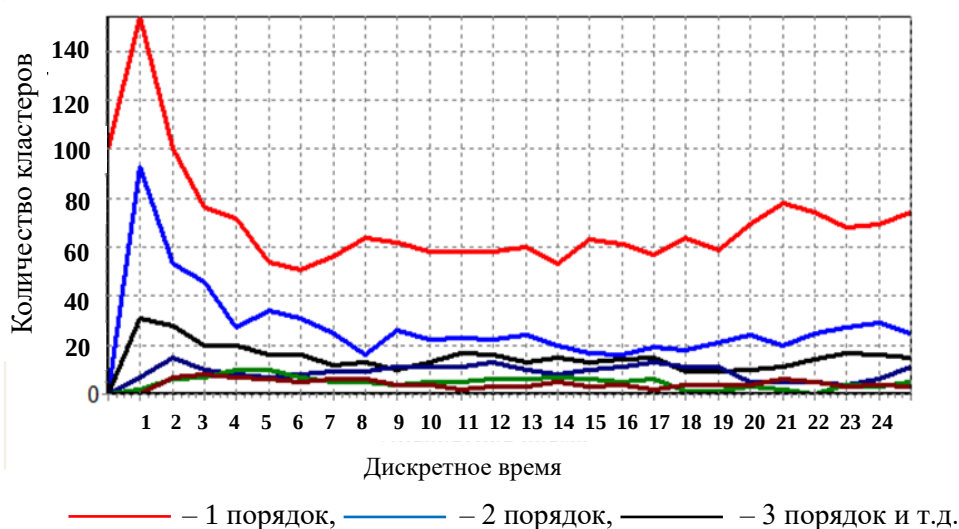


Рис. 3. График количества кластеров порядка 1-6 от времени

На графиках отражалась зависимость порядков образующихся частиц от объемной концентрации и вероятности прилипания, а также динамика столкновений и образования новых частиц с порядком от 2х и выше за единицу временного шага. Как показывают графики и результаты численных экспериментов, вклад многочастичных столкновений особо ощутим в начальный период агрегации.

Закключение. Таким образом, созданная модель агрегации позволяет, регулируя параметры модели, получать структуры для определения порядка соединившихся частиц, как при быстрой агрегации, так и при смешанной кинетике. Полученные результаты позволяют расширить предположения о вкладе многочастичных столкновений в процесс агрегации с учетом микрофизической и кинетической теории. Разработанную модель можно использовать в научно-исследовательских целях при изучении процессов агрегации, допускающих множественные столкновения. Модель можно адаптировать для учета физических и химических условий образования частиц при столкновениях, усовершенствовав её путем введения дополнительных параметров технологического процесса.

Список литературы

1. Черевко В.А., Кизилова Н.Н. Математические модели агрегации частиц в биокolloидах и суспензиях [Текст] // Ученый, Учитель, Человек. К 85-летию со дня рождения И.Е. Тарапова. – Харьков : Новое слово, 2011. – С. 299–320.
2. Тимурбекова С.К., Мусабекова Л.М., Бренер А.М. Компьютерная решеточная модель процессов агрегации в дисперсных системах [Текст] // Оңтүстік Қазақстан ғылым Жаршысы – Вестник науки Южного Казахстана. – 2020. – № 1 (9). – С. 110–114.
3. Shadrack J.B., Klein R., Site L.D. Structural Locality and Early Stage of Aggregation of Micelles in Water: An Adaptive Resolution Molecular Dynamics Study // Advanced Theory and Simulations. – 2018. – No. 1. – DOI: 10.1002/adts.201800025.
4. Wattis J.A. An introduction to mathematical models of coagulation–fragmentation processes: a discrete deterministic mean-field approach // Physica D: Nonlinear Phenomena. – 2006. – Vol. 222, No. 1. – P. 1–20.
5. Yassen S., Mansoori G.A. Asphaltenes aggregation due to waterflooding (A molecular dynamics simulation study) // Journal of Petroleum Science and Engineering. – 2018. – Vol. 170. – P. 177–183.
6. Kébaili N., Benrezzak S., Cahuzac P., Masson A., Bréchnignac C. Diffusion of silver nanoparticles on carbonaceous materials. Cluster mobility as a probe for surface characterization // The European Physical Journal D. – 2009. – Vol. 52, No. 1–3. – P. 115–118.
7. Chen H., Lin L., Li H., Li J., Lin J.M. Aggregation-induced structure transition of protein-stabilized zinc/copper nanoclusters for amplified chemiluminescence // ACS Nano. – 2015. – Vol. 9, No. 2. – P. 2173–2183.
8. Chowdhury I., Mansukhani N.D., Guiney L.M., Hersam M.C., Bouchard D. Aggregation and stability of reduced graphene oxide: complex roles of divalent cations, pH, and natural organic matter // Environmental Science & Technology. – 2015. – Vol. 49, No. 18. – P. 10886–10893.
9. Brenner A.M., Musabekova L.M., Jamankarayeva M.A. Stochastic Lattice Model of Aggregation in Heterogeneous Disperse Media // Chemical Engineering Transactions. – 2017. – Vol. 60. – P. 70–84.
10. Zeigler B.P., Sarjoughian H.S. Guide to Modeling and Simulation of Systems of Systems (Simulation Foundations, Methods and Applications) [Text]. – London, UK : Springer-Verlag, 2012.
11. Zhou X.H., Huang B.C., Zhou T., Liu Y.C., Shi H.C. Aggregation behaviour of engineered nanoparticles and their impact on activated sludge in wastewater treatment // Chemosphere. – 2015. – Vol. 119. – P. 568–576.
12. Musabekova L.M., Zhumataev N.S., Yunussova A.A., Dausheyeva N.N., Zhidebayeva A.N. Development of the Stochastic Lattice Model for Describing Aggregation Processes in the Polydisperse Systems (3D Case) // Chemical Engineering Transactions. – 2019. – Vol. 76. – P. 823–828.
13. Мусабекова Л. Разработка компьютерной стохастической модели агрегации в дисперсных системах [Текст] // 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, 2019. – С. 194–199.

Материал поступил в редакцию 07.02.26, принят 12.06.26.

Л.М. Мусабекова¹, Г.Ы. Ермекбаева²

¹Оңтүстік Қазақстан медициналық академиясы, Шымкент, Қазақстан

²М.Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университеті, Шымкент, Қазақстан

ПЕРИОДТЫҚ ЖӘНЕ АҒЫНДЫҚ ТИПТЕГІ РЕАКТОРЛАРДЫҢ ДИСПЕРСТІ ЖҮЙЕЛЕРІНДЕГІ АГРЕГАЦИЯ ПРОЦЕСІН МОДЕЛЬДЕУ

Аннотация. Кластерлерді біріктіру процесін модельдеу әдістемесі жасалды. Бұл әдіс бөлшектердің кездейсоқ жүру ықтималдығы теориясына, стохастикалық тордың көлеміне қарай агрегацияға және дискретті оқиғаларды модельдеу (ДОМ) тұжырымдамасына негізделген. Әдістеме негізінде агрегация процесін есептеу бағдарламасы жасалды және бірқатар сандық эксперименттер жүргізілді. Бөлшектерді кездейсоқ толтырудың әртүрлі жағдайлары бастапқы деректер ретінде қарастырылды. Гетерогенді полидисперсті орта қарастырылды. Әзірленген модель бөлшектердің кездейсоқ дрейфінің тарихына, аппарат көлемі бойынша бірінші ретті алтыншы ретті кластерлерді біріктіру уақытына тәуелділікті алуға мүмкіндік береді.

Түйін сөздер: дисперсті жүйелер, бөлшектердің кездейсоқ жүрісі, агрегация процестері, стохастикалық тор, агрегация кластерлері.

L.M. Musabekova¹, G.Y. Yermekbaeva²

¹South Kazakhstan Medical Academy, Shymkent, Kazakhstan

²M. Auezov South Kazakhstan University, Shymkent, Kazakhstan

MODELING OF THE AGGREGATION PROCESS IN DISPERSED SYSTEMS OF BATCH AND FLOW-TYPE REACTORS

Abstract. A methodology for modeling the cluster aggregation process has been developed. The methodology is based on the probability theory of random particle walks, aggregation across the volume of a stochastic lattice, and the concept of discrete event modeling (DEM). Based on this methodology, a program for calculating the aggregation process was developed, and a series of numerical experiments were conducted. Various cases of random particle filling were considered as initial data. A heterogeneous polydisperse medium was considered. The developed model allows one to obtain dependencies for the history of random particle drift and cluster aggregation times from first to sixth order in the apparatus volume.

Keywords: dispersed systems, random walk of particles, aggregation processes, stochastic lattice, aggregation clusters.

References

1. Cherevko V.A., Kizilova N.N. Matematicheskie modeli agregatsii chastits v biokolloidakh i suspenziyakh [Mathematical models of particle aggregation in biocolloids and suspensions] // Uchenyy, Uchitel', Chelovek. K 85-letiyu so dnya rozhdeniya I.E. Tarapova [Scientist, Teacher, Person. Dedicated to the 85th anniversary of the birth of I.E. Tarapov]. – Kharkov: Novoe slovo, 2011. – P. 299–320. [in Russian].
2. Timurabekova S.K., Musabekova L.M., Brener A.M. Komp'yuternaya reshetchnaya model' protsessov agregatsii v dispersnykh sistemakh [Computer lattice model of aggregation processes in dispersed systems] // Bulletin of Science of Southern Kazakhstan. – 2020. – No. 1 (9). – P. 110–114. [in Russian].

3. Shadrack J.B., Klein R., Site L.D. Structural Locality and Early Stage of Aggregation of Micelles in Water: An Adaptive Resolution Molecular Dynamics Study // *Advanced Theory and Simulations*. – 2018. – No. 1. – DOI: 10.1002/adts.201800025.
4. Wattis J.A. An introduction to mathematical models of coagulation–fragmentation processes: a discrete deterministic mean-field approach // *Physica D: Nonlinear Phenomena*. – 2006. – Vol. 222, No. 1. – P. 1–20.
5. Yassen S., Mansoori G.A. Asphaltenes aggregation due to waterflooding (A molecular dynamics simulation study) // *Journal of Petroleum Science and Engineering*. – 2018. – Vol. 170. – P. 177–183.
6. Kébaili N., Benrezzak S., Cahuzac P., Masson A., Bréchnignac C. Diffusion of silver nanoparticles on carbonaceous materials. Cluster mobility as a probe for surface characterization // *The European Physical Journal D*. – 2009. – Vol. 52, No. 1–3. – P. 115–118.
7. Chen H., Lin L., Li H., Li J., Lin J.M. Aggregation-induced structure transition of protein-stabilized zinc/copper nanoclusters for amplified chemiluminescence // *ACS Nano*. – 2015. – Vol. 9, No. 2. – P. 2173–2183.
8. Chowdhury I., Mansukhani N.D., Guiney L.M., Hersam M.C., Bouchard D. Aggregation and stability of reduced graphene oxide: complex roles of divalent cations, pH, and natural organic matter // *Environmental Science & Technology*. – 2015. – Vol. 49, No. 18. – P. 10886–10893.
9. Brener A.M., Musabekova L.M., Jamankarayeva M.A. Stochastic Lattice Model of Aggregation in Heterogeneous Disperse Media // *Chemical Engineering Transactions*. – 2017. – Vol. 60. – P. 70–84.
10. Zeigler B.P., Sarjoughian H.S. *Guide to Modeling and Simulation of Systems of Systems (Simulation Foundations, Methods and Applications)*. – London, UK: Springer-Verlag, 2012.
11. Zhou X.H., Huang B.C., Zhou T., Liu Y.C., Shi H.C. Aggregation behaviour of engineered nanoparticles and their impact on activated sludge in wastewater treatment // *Chemosphere*. – 2015. – Vol. 119. – P. 568–576.
12. Musabekova L.M., Zhumataev N.S., Yunussova A.A., Dausheyeva N.N., Zhidebayeva A.N. Development of the Stochastic Lattice Model for Describing Aggregation Processes in the Polydisperse Systems (3D Case) // *Chemical Engineering Transactions*. – 2019. – Vol. 76. – P. 823–828.
13. Musabekova L. Razrabotka komp'yuternoy stokhasticheskoy modeli agregatsii v dispersnykh sistemakh [Development of a computer stochastic model of aggregation in dispersed systems] // *Sbornik nauchnykh trudov Mezhdunarodnogo Kosygin'skogo foruma. Mezhdunarodnyy nauchno-tekhnicheskii simpozium «Vtorye mezhdunarodnye Kosygin'skie chteniya: "Energoresursoeffektivnye ekologicheski bezopasnye tekhnologii i oborudovanie", priurochennye k 100-letiyu RGU imeni A.N. Kosygina»* [Collection of Scientific Papers of the International Kosygin Forum. International Scientific and Technical Symposium "Second International Kosygin Readings: 'Energy- and Resource-Efficient Environmentally Safe Technologies and Equipment', dedicated to the 100th anniversary of A.N. Kosygin Russian State University"]. – Vol. 2. – Moscow, 2019. – P. 194–199. [in Russian].