

materials. Latent heat storage is preferred over sensible heat storage, so these materials, known as phase change materials (PCM), must have some desired features such as suitable melting temperature, high melting enthalpy, good thermal conductivity, chemical stability, and fully reversible fusion-solidification processes. Although in recent years progress has been made in the design of these units, the variety of PCM used is still limited and most are designed based on petroleum paraffin waxes.

Despite the technical advantages of paraffin waxes, the development of green substitute materials has been pursued in recent years. The present work aims to characterise and assess the convenience of different materials of agro-industrial origin such as vegetable oils and fats, waxes, sugar alcohols and fatty alcohols, produced in the Andean Region. Data obtained for melting temperatures, melting enthalpies, composition, heat capacities, density, toxicity, price, and annual production was considered for the evaluation of the potential as heat storage materials. This work contributed to the identification of renewable, economical, and technically feasible materials with the potential for heat storage while contributing to both environmental protection and the development of local economies.

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ АГРЕГАЦИИ В ТРУБЧАТЫХ И ПРОТОЧНЫХ РЕАКТОРАХ

Мусабекова Л. М., Даушеева Н. Н.

Южно-Казахстанский университет им. М.Ауэзова

Шымкент, Казахстан

mleyla@bk.ru

COMPUTER SIMULATION OF AGGREGATION PROCESSES IN BATCH AND FLOW REACTORS

Musabekova L. M., Dausheyeva N. N.

M. Auezov South Kazakhstan University

Shymkent, Kazakhstan

mleyla@bk.ru

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

Ключевые слова: моделирование агрегации кластеров, парадигма моделирования дискретных событий, полидисперсная среда

The novel approach to modeling clusters aggregation which is based on the paradigm of discrete-event simulation (DES) with the help of particles random walk and aggregation on the 3-D stochastic lattices has been applied for describing the aggregation in the heterogeneous poly-dispersive systems. The goal of the work is to generalize the models and results, obtained by the authors earlier for describing aggregation processes, applying to mixed kinetics in batch and flow reactors. The submitted approach allows accounting a different hierarchy of random drift times of particles and aggregation times of clusters of different orders in different areas of the apparatus working volume.

Keywords: *modeling clusters aggregation, paradigm of discrete-event simulation, poly-dispersive systems*

ВВЕДЕНИЕ

Целью работы является обобщение моделей и результатов, полученных авторами ранее для описания процессов агрегации, применительно к смешанной кинетике в реакторах периодического действия и проточных реакторах.

Несмотря на давний интерес исследователей и множество выдающихся работ в этой области, теоретический анализ многих проблем остается слабо развитым [1].

Первая видимая проблема заключается в том, что классические модели, основанные на уравнениях Смолуховского или Беккера-Деринга, учитывающие только бинарные столкновения частиц, мало применимы к быстрым процессам в высокоплотных дисперсных системах [2]. Другая открытая проблема - описание влияния возраста и текущего состояния кластеров на их внутреннюю и поверхностную структуру, что, в свою очередь, влияет на агрегационную активность и кинетику агрегации [3].

Подход, который, хорошо моделирует этот процесс, заключается в установке вероятности завершения столкновения двух или более частиц с образованием объединенного кластера [4]. Однако на самом деле расчет этой вероятности – отдельная задача, постановка и решение которой должны основываться на особенностях физического механизма связывания частиц в единый кластер [5]. Поскольку физический механизм в разных системах может быть разным (заряженные или незаряженные частицы, аморфные или кристаллические кластеры и т. д.), поэтому, управляющие параметры модели теряют свою определенность, а результаты моделирования становятся трудными для интерпретации [6].

Отмеченные проблемы существенно ограничивают возможности инженерного расчета многих технологических процессов и снижают надежность рекомендаций по определению оптимальных параметров управления [7].

В нескольких предыдущих работах [8] авторы представили новый подход к этой проблеме, основанный не на модельных кинетических уравнениях, а на парадигме моделирования дискретных событий (*DES*) при случайном блуждании частиц по стохастическим решеткам с образованием агрегатов [9]. Этот подход может быть применен для описания агрегации в гетерогенных полидисперсных системах, и отмеченные ограничения могут быть устранены.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

1 Концепция и алгоритм

В основе концепции лежит алгоритм, который был впервые представлен в работе [5], а затем адаптирован к случаю проточных трубчатых реакторов в работе [10]. Идея состоит в том, что область, в которой происходят процессы диффузии и агрегации, покрывается фиксированной пространственной решеткой.

Изменение локального распределения фракционного состава в ячейках решетки, вызванное случайным дрейфом или миграцией частиц в основном потоке, а также процессы агрегации описываются в соответствии с парадигмой дискретного моделирования (*DES*) [6].

В случае агрегации, кинетика которой лимитируется диффузией (*DLA*), агрегация кластеров происходит практически немедленно в момент столкновения. В рамках решеточной модели это можно интерпретировать как попадание кластеров в общую ячейку [5]. В случае смешанной кинетики [12] масштабная единица временного темпа принималась равной характерному времени коагуляции кластеров, попадающих в одну ячейку. Это означает, что частицы, которые достигают одной ячейки, не обязательно успевают сформировать единый кластер, но могут продолжать дрейфовать отдельно. Ключевая предпосылка нашей модели заключается в предположении, что частицы коагулируются только в том случае, если, попав в общую ячейку, они снова мигрируют в общую ячейку в следующую единицу времени [5].

В данной работе, в отличие от предыдущих работ авторов, разработан алгоритм описания процесса агрегации кластеров в проточном реакторе как для *DLA*, так и для смешанной кинетики в *3D*-постановке. Следует отметить, что физически значимая интерпретация результатов численного эксперимента, строго говоря, имеет физический смысл только для *3D*-моделей.

При этом используемый здесь алгоритм по своему методологическому содержанию следует алгоритму, разработанному и подробно описанному в наших предыдущих работах [5, 10, 11] для *2D*-случая. В процессе расчета формируются четыре трехмерных массива.

Первый массив моделирует всю решетку с кластерами разного порядка, полученными в процессе их дрейфа и агрегации в каждую единицу времени. Второй массив моделирует аналогичную решетку с кластерами, которые попадают в реактор со свежим потоком дисперсной смеси, который втекает в реактор с заданной средней скоростью. Основная часть блок-схемы расчета приведена на рисунке 1.

Третий массив моделирует ситуацию в конце временного такта расчета и генерирует начальную ситуацию для следующего такта. Он формируется как сумма двух предыдущих массивов. Четвертый массив указывает количество столкновений частиц в каждой ячейке в каждую единицу времени. Этот алгоритм использовался для численного эксперимента применительно к трехмерному случаю.

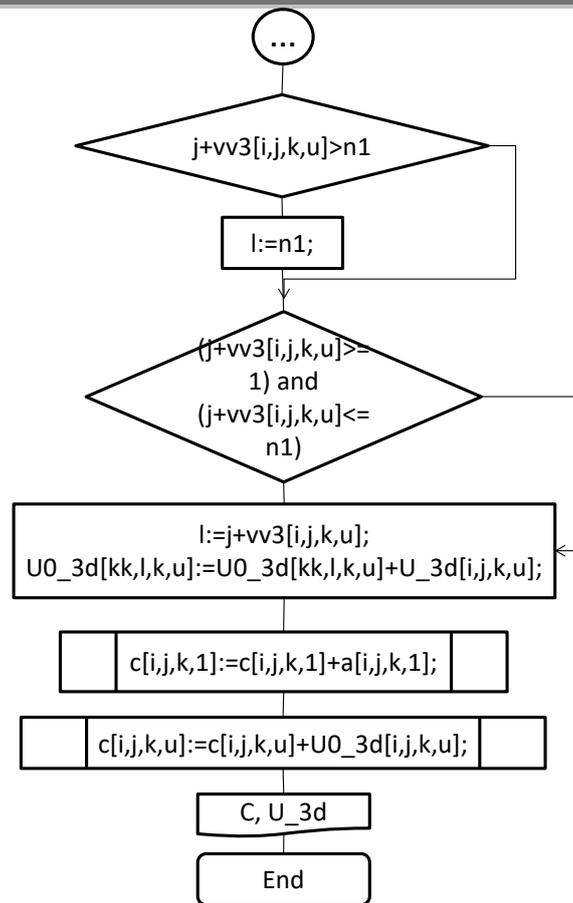


Рис. 1. Блок схема расчета

2 Результаты моделирования

В процессе расчета кластеры распределялись по порядкам в объеме реактора по направлению потока в зависимости от расхода, количества столкновений разных порядков (т.е. количества кластеров, сталкивающихся в одной ячейке) во времени и в объеме реактора. Порядок любого кластера означает количество составляющих его частиц-ядер, а порядок любой частицы-ядра предполагается равным 1 [2]. Все эксперименты проводились параллельно для реактора периодического действия и проточного реактора.

На рисунках 2, 3 показаны некоторые численные результаты для плотных трехмерных массивов, где каждая расчетная точка усредняется по десяти сериям расчетов.

Численные эксперименты проводились на трехмерных массивах, моделирующих проточный реактор в форме параллелепипеда с квадратным поперечным сечением 5×5 и длиной 20 для расходов $w = 0$ (реактор периодического действия) и $w = 2; 4; 6$. Хаотические дрейфы кластеров накладывались на скорость основного потока, и предполагалось, что подвижность каждого кластера зависит от его порядка [13]. Массив считался плотным, так как в начальный момент кластеры первого порядка размещались по одному в каждой ячейке решетки. Кроме того, предполагалось, что кластеры первого порядка также вводятся в трубчатый реактор с основным потоком. Агрегация этих кластеров начинается только в объеме реактора.

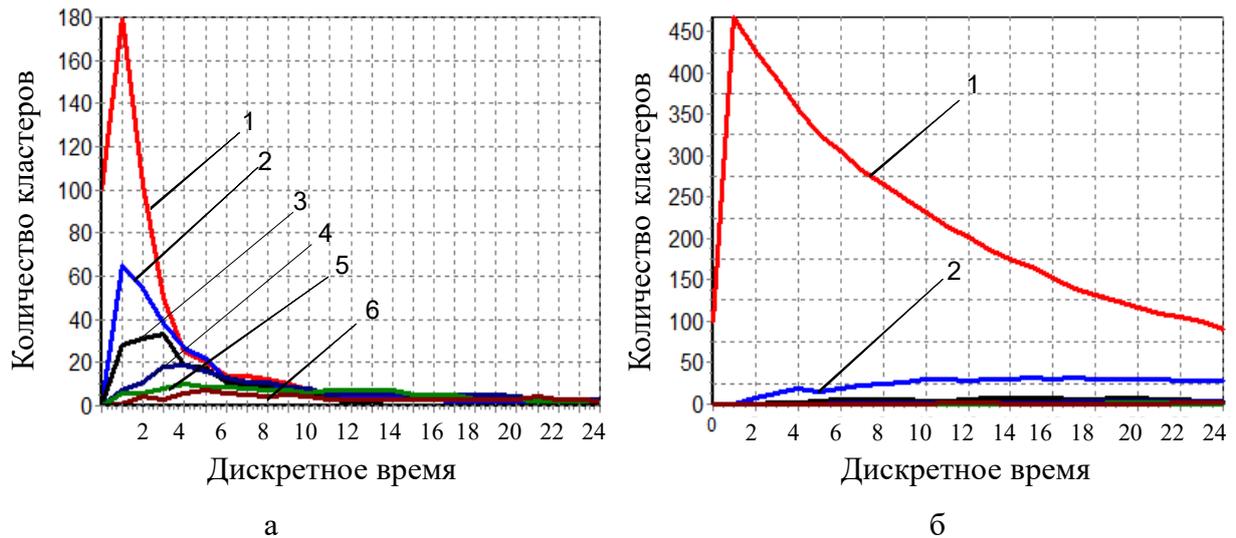


Рис. 2. Временные зависимости количества кластеров разного порядка в реакторе периодического действия, порядки кластеров: 1-первый, 2-второй, 3-третий, 4-четвертый, 5-пятый, 6-шестой. а- агрегация *DLA*; б- смешанная кинетика

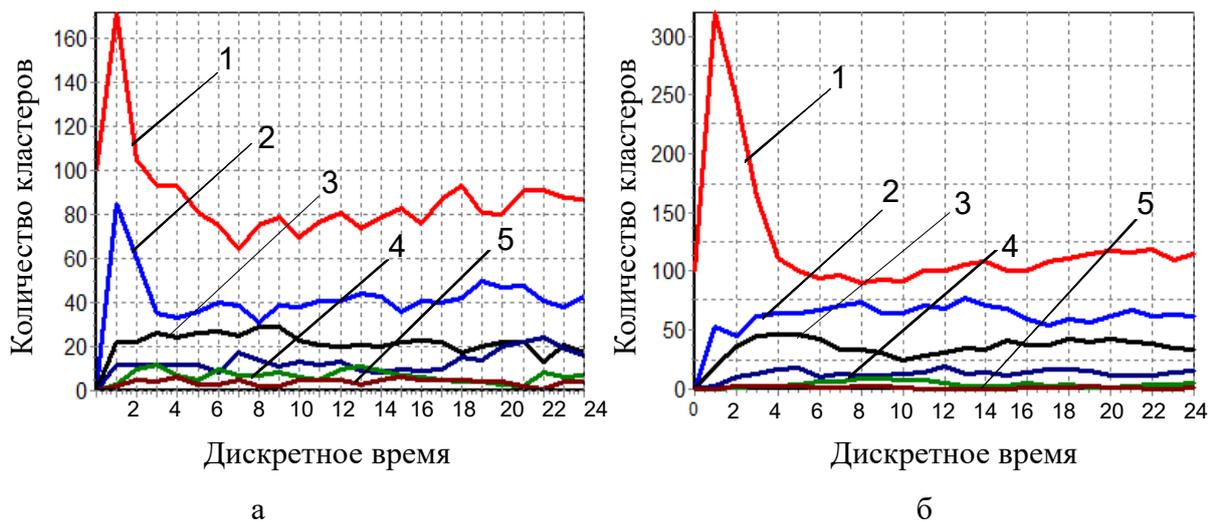


Рис. 3. Временные зависимости количества кластеров разного порядка в проточном реакторе ($w = 4$), порядки кластеров: 1-первый, 2-второй, 3-третий, 4-четвертый, 5-пятый. а- агрегация *DLA*; б- смешанная кинетика

На рис. 2 представлены результаты численных экспериментов, проведенных для реактора периодического действия. Результаты, полученные в трехмерном случае для реактора периодического действия, качественно не отличаются от результатов для двумерного случая. Эти данные показаны здесь для сравнения с численными данными, полученными для проточного реактора на рис. 3.

Результаты численных экспериментов показывают, что в случае процессов агрегации, протекающих в области смешанной кинетики, скорость образования кластеров высокого порядка существенно снижается. В проточных реакторах это торможение несколько сглажено. Это явление можно объяснить выравниванием полной концентрации кластеров разного порядка по длине реактора.

Резкие флуктуации и пики концентрации кластеров разного порядка можно объяснить тем, что выбранные порядки скорости основного потока w и амплитуды дрейфа случайных частиц сравнимы и близки. Следует отметить, что это явление требует более детального изучения.

ВЫВОДЫ

Эксперименты показали, что количество многочастичных столкновений заметно больше при агрегации в реакторе периодического действия на начальной стадии процесса, чем в проточном реакторе. В случае смешанной кинетики влияние столкновений множества частиц на интенсивность агрегации также размывается по длине реактора и не играет такой важной роли в проточном реакторе.

Это явление особенно очевидно при увеличении скорости потока из-за конкуренции трех характерных времен: времени случайного дрейфа, кинетического времени агрегации и времени пребывания частиц в рабочей зоне устройства. Отсюда следует, что расход влияет не только на производительность реактора, но и на фракционный состав дисперсии на выходе. Это подтверждает вывод о том, что средняя скорость потока через реактор может служить параметром управления для стабилизации желаемого фракционного состава. Влияние скорости потока на кинетику агрегации проявляется в трехмерном случае гораздо ярче, чем в двухмерной модели [10].

ЛИТЕРАТУРА

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. 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.
5. Tammet H., 1995, Size and mobility of nanometer particles, clusters and ions, *Journal of Aerosol Science*, 26(3), 459–475.
6. Morganti P., Del Ciotto P., Stoller M., Chianese A., 2016, Antibacterial and Anti-inflammatory Green Nanocomposites, *Chemical Engineering Transactions*, 47, 61–66.
7. 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.
8. 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.
9. 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.

10. 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.

11. 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.

12. 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.

13. 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.

ENSURING EFFECTIVE GOVERNING FOR REGIONAL DEVELOPMENT

Didmanidze Ibraim Sh.¹, Motskobili Ia R.², Didmanidze Manana I.³

¹Batumi Shota Rustaveli State University,
Batumi, Georgia
ibraimd@mail.ru

²Batumi State Maritime Academy,
6010 Batumi, Georgia
i.motskobili@bsma.edu.ge

³Georgian Technical University,
Tbilisi, Georgia
mdidmanidze92@mail.ru

ОБЕСПЕЧЕНИЕ ЭФФЕКТИВНОГО УПРАВЛЕНИЯ ДЛЯ РЕГИОНАЛЬНОГО РАЗВИТИЯ

Дидманидзе Ибраим Ш.¹, Моцкобили Иа Р.², Дидманидзе Манана И.³

¹Батумский государственный университет Шота Руставели,
Батуми, Грузия
ibraimd@mail.ru

²Батумская государственная морская академия,
6010 Батуми, Грузия
i.motskobili@bsma.edu.ge

³Грузинский технический университет, Тбилиси, Грузия
Тбилиси, Грузия
mdidmanidze92@mail.ru