

# 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

<sup>1</sup> South Kazakhstan State University named after M. Auezov, Shymkent,

<sup>2</sup>South 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. Дайрабай<sup>1</sup>, В.Г. Голубев<sup>1</sup>, О.С. Балабеков<sup>2</sup>, А.М. Бренер<sup>1</sup>**  
din\_303@mail.ru

<sup>1</sup>Южно-Казахстанский государственный университет им. М.Ауэзова, г. Шымкент

<sup>2</sup>Южно-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. Осужденлен 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 может быть фазовые переходы, как в случае кристаллизации или десублимации [4, 5], или это могут быть процессы образования слаборастворимых 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 малопригодны 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 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;  $\tau_c$  - время релаксации химического превращения;  $\eta_c$ -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

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

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  $\chi$  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 общего 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

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

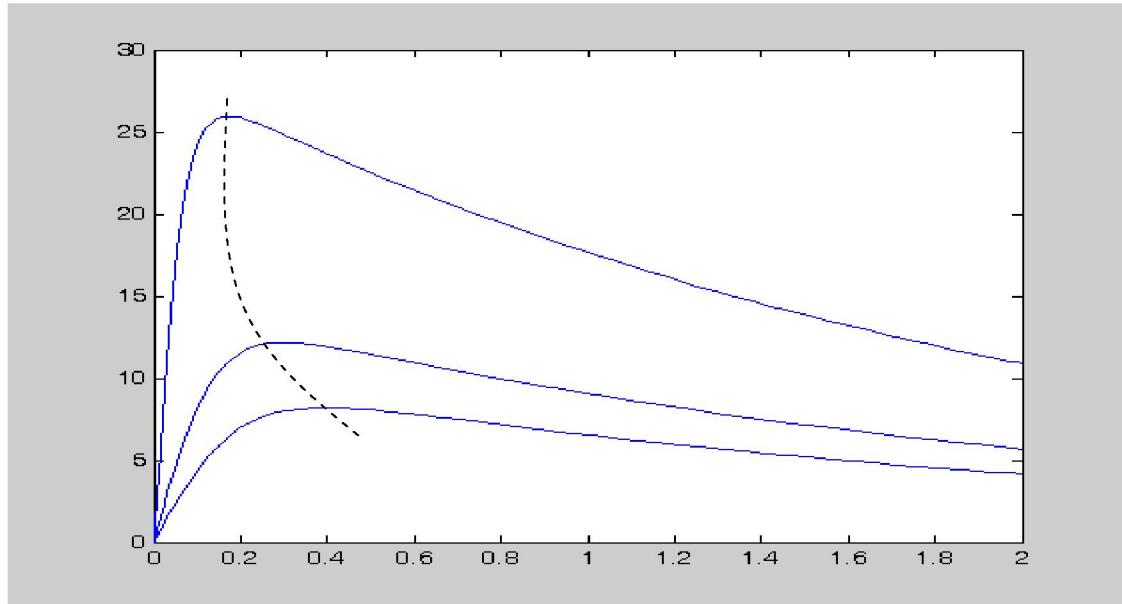
Решение уравнения (18) записывается через Бесселевы функции:

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

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

$$\frac{dC}{dt} = k_2 AB, \quad \frac{dA}{dt} = -k_2 AB, \quad \frac{dB}{dt} = -k_2 AB \quad (23)$$

Начальные условия

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

Введем также обозначения

$$\rho_0 = A_0 + B_0, \quad \theta_0 = k_2 A_0 B_0. \quad (25)$$

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

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

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

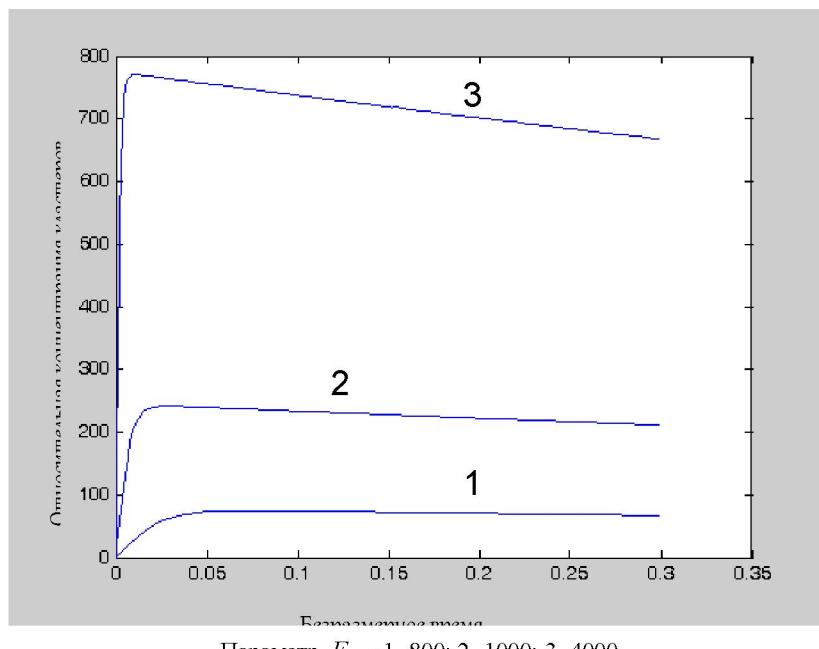


Рисунок 2 – Эволюция концентрации общего числа кластеров нерастворимой фазы в системе второго порядка на малых временах

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] Волошук В.М., Седунов Ю.С. Процессы коагуляции в дисперсных системах - Л.: Гидрометеоиздат - 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 гылым жарпкысы.- 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] Voloshhuk 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 // Oraldyn Gylym zharskysy.- 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., 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.

**ДИСПЕРСТІ ФАЗАНЫҢ ХИМИЯЛЫҚ КӨЗДЕРІ БАР ЖҮЙЕЛДЕГІ БИНАРЛЫҚ АГРЕГАЦИЯЛАУДЫН  
МАТЕМАТИКАЛЫҚ ҮЛГІЛЕРИ**

**Д. Дайрабай<sup>1</sup>, В.Г. Голубев<sup>1</sup>, О.С. Балабеков<sup>2</sup>, А.М. Бренер<sup>1</sup>**  
din\_303@mail.ru

<sup>1</sup>М. Өуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан мемлекеттік университеті, Шымкент қаласы

<sup>2</sup>Оңтүстік 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 күрьыту және даму механизмін талдауға арналған. Жұмыста процестердің жүйелік талдауы жүргізілді және олардың негізгі кезеңдері қарастырылды. Реакторлардың жұмыс аумағында химиялық реакциялар мен үзү процестерінің бірге өтү кезінде химиялық аппаратта ерімейтін өнімдердің агрегация кинетикасының есебіне теориялық дәйектеме берілді. Бірінші және екінші тәртіптік химиялық реакциялар бар жүйелерде дисперстік фаза агрегацияларының үлгілері өзірленді. Бірінші және екінші тәртіптік реакциялар үшін ерімейтін мономерлер химиялық көздері бар жүйелердегі агрегация процестерінің заңдылықтары зерттелді. Смолуховскидің бинарлық үюға арналған тендеуге негізделген химиялық реакциялық жүйелерде дисперстік фаза бөлшектерінің агрегация кинетикасын есептеу үшін түрлендірілген тендеулер ұсынылды. Сонымен қатар, түрлі тәртіптік кластерлердің толық шоғырлануына қажетті кинетикалық тендеулердің дәл шешімдері де алынды. Бірінші және екінші тәртіптік 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 өзгерпейтіні көрсетілді. Негізінде, жүйедегі ерімейтін фаза кластерлерінің жалпы санының ең жоғарғы нағиже сійкес 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
<b>Д. Дайрабай</b>		магистр	ЮКГУ им.М.Ауэзова	din_303@mail.ru 8778880188
<b>В.Г. Голубев</b>	д.т.н.	профессор	ЮКГУ им.М.Ауэзова	golubev_50@mail.ru 87017356145
<b>О.С. Балабеков</b>	д.т.н.	Академик НАН РК	ЮКГПИ Шымкент	87024419133
<b>А.М. Бренер</b>	д.т.н.	профессор	ЮКГУ им.М.Ауэзова	amb_52@mail.ru 87017198939

Поступила 22.09.2015 г.