

ISSN 2518-1483 (Online),
ISSN 2224-5227 (Print)

2018 • 2

ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ
ҰЛТТЫҚ ҒЫЛЫМ АКАДЕМИЯСЫНЫҢ

БАЯНДАМАЛАРЫ

ДОКЛАДЫ

НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК
РЕСПУБЛИКИ КАЗАХСТАН

REPORTS

OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES
OF THE REPUBLIC OF KAZAKHSTAN

ЖУРНАЛ 1944 ЖЫЛДАН ШЫҒА БАСТАҒАН
ЖУРНАЛ ИЗДАЕТСЯ С 1944 г.
PUBLISHED SINCE 1944



Бас редакторы
х.ғ.д., проф., ҚР ҰҒА академигі **М.Ж. Жұрынов**

Редакция алқасы:

Адекенов С.М. проф., академик (Қазақстан) (бас ред. орынбасары)
Величкин В.И. проф., корр.-мүшесі (Ресей)
Вольдемар Вуйцик проф. (Польша)
Гончарук В.В. проф., академик (Украина)
Гордиенко А.И. проф., академик (Белорус)
Дука Г. проф., академик (Молдова)
Илолов М.И. проф., академик (Тәжікстан),
Леска Богуслава проф. (Польша),
Локшин В.Н. проф. чл.-корр. (Қазақстан)
Нараев В.Н. проф. (Ресей)
Неклюдов И.М. проф., академик (Украина)
Нур Изура Удзир проф. (Малайзия)
Перни Стефано проф. (Ұлыбритания)
Потапов В.А. проф. (Украина)
Прокопович Полина проф. (Ұлыбритания)
Омбаев А.М. проф., корр.-мүшесі (Қазақстан)
Өтелбаев М.О. проф., академик (Қазақстан)
Садыбеков М.А. проф., корр.-мүшесі (Қазақстан)
Сатаев М.И. проф., корр.-мүшесі (Қазақстан)
Северский И.В. проф., академик (Қазақстан)
Сикорски Марек проф., (Польша)
Рамазанов Т.С. проф., академик (Қазақстан)
Такибаев Н.Ж. проф., академик (Қазақстан), бас ред. орынбасары
Харин С.Н. проф., академик (Қазақстан)
Чечин Л.М. проф., корр.-мүшесі (Қазақстан)
Харун Парлар проф. (Германия)
Энджун Гао проф. (Қытай)
Эркебаев А.Э. проф., академик (Қырғыстан)

«Қазақстан Республикасы Ұлттық ғылым академиясының баяндамалары»

ISSN 2518-1483 (Online),

ISSN 2224-5227 (Print)

Меншіктенуші: «Қазақстан Республикасының Ұлттық ғылым академиясы» Республикалық қоғамдық бірлестігі (Алматы қ.)
Қазақстан республикасының Мәдениет пен ақпарат министрлігінің Ақпарат және мұрағат комитетінде 01.06.2006 ж.
берілген №5540-Ж мерзімдік басылым тіркеуіне қойылу туралы куәлік

Мерзімділігі: жылына 6 рет.

Тиражы: 500 дана.

Редакцияның мекенжайы: 050010, Алматы қ., Шевченко көш., 28, 219 бөл., 220, тел.: 272-13-19, 272-13-18,
http://nauka-nanrk.kz_reports-science.kz

© Қазақстан Республикасының Ұлттық ғылым академиясы, 2018

Типографияның мекенжайы: «Аруна» ЖК, Алматы қ., Муратбаева көш., 75.

Главный редактор
д.х.н., проф., академик НАН РК **М. Ж. Журинов**

Редакционная коллегия:

Адекенов С.М. проф., академик (Казахстан) (зам. гл. ред.)
Величкин В.И. проф., чл.-корр. (Россия)
Вольдемар Вуйцик проф. (Польша)
Гончарук В.В. проф., академик (Украина)
Гордиенко А.И. проф., академик (Беларусь)
Дука Г. проф., академик (Молдова)
Илолов М.И. проф., академик (Таджикистан),
Леска Богуслава проф. (Польша),
Локшин В.Н. проф. чл.-корр. (Казахстан)
Нараев В.Н. проф. (Россия)
Неклюдов И.М. проф., академик (Украина)
Нур Изура Удзир проф. (Малайзия)
Перни Стефано проф. (Великобритания)
Потапов В.А. проф. (Украина)
Прокопович Полина проф. (Великобритания)
Омбаев А.М. проф., чл.-корр. (Казахстан)
Отелбаев М.О. проф., академик (Казахстан)
Садьбеков М.А. проф., чл.-корр. (Казахстан)
Сатаев М.И. проф., чл.-корр. (Казахстан)
Северский И.В. проф., академик (Казахстан)
Сикорски Марек проф., (Польша)
Рамазанов Т.С. проф., академик (Казахстан)
Такибаев Н.Ж. проф., академик (Казахстан), зам. гл. ред.
Харин С.Н. проф., академик (Казахстан)
Чечин Л.М. проф., чл.-корр. (Казахстан)
Харун Парлар проф. (Германия)
Энджун Гао проф. (Китай)
Эркебаев А.Э. проф., академик (Кыргызстан)

Доклады Национальной академии наук Республики Казахстан»

ISSN 2518-1483 (Online),

ISSN 2224-5227 (Print)

Собственник: Республиканское общественное объединение «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 №5540-Ж, выданное 01.06.2006 г.

Периодичность: 6 раз в год.

Тираж: 500 экземпляров

Адрес редакции: 050010, г.Алматы, ул.Шевченко, 28, ком.218-220, тел. 272-13-19, 272-13-18

<http://nauka-nanrk.kz> reports-science.kz

©Национальная академия наук Республики Казахстан, 2018 г.

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

E d i t o r i n c h i e fdoctor of chemistry, professor, academician of NAS RK **M.Zh. Zhurinov****E d i t o r i a l b o a r d :****Adekenov S.M.** prof., academician (Kazakhstan) (deputy editor in chief)**Velichkin V.I.** prof., corr. member (Russia)**Voitsik Valdemar** prof. (Poland)**Goncharuk V.V.** prof., academician (Ukraine)**Gordiyenko A.I.** prof., academician (Belarus)**Duka G.** prof., academician (Moldova)**Ilolov M.I.** prof., academician (Tadjikistan),**Leska Boguslava** prof. (Poland),**Lokshin V.N.** prof., corr. member. (Kazakhstan)**Narayev V.N.** prof. (Russia)**Nekludov I.M.** prof., academician (Ukraine)**Nur Izura Udzir** prof. (Malaysia)**Perni Stephano** prof. (Great Britain)**Potapov V.A.** prof. (Ukraine)**Prokopovich Polina** prof. (Great Britain)**Ombayev A.M.** prof., corr. member. (Kazakhstan)**Otelbayv M.O.** prof., academician (Kazakhstan)**Sadybekov M.A.** prof., corr. member. (Kazakhstan)**Satayev M.I.** prof., corr. member. (Kazakhstan)**Severskyi I.V.** prof., academician (Kazakhstan)**Sikorski Marek** prof., (Poland)**Ramazanov T.S.** prof., academician (Kazakhstan)**Takibayev N.Zh.** prof., academician (Kazakhstan), deputy editor in chief**Kharin S.N.** prof., academician (Kazakhstan)**Chechin L.M.** prof., corr. member. (Kazakhstan)**Kharun Parlar** prof. (Germany)**Endzhun Gao** prof. (China)**Erkebayev A.Ye.** prof., academician (Kyrgyzstan)**Reports of the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan.**

ISSN 2224-5227

ISSN 2518-1483 (Online),

ISSN 2224-5227 (Print)

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 5540-Ж, issued 01.06.2006

Periodicity: 6 times a year

Circulation: 500 copies

Editorial address: 28, Shevchenko str., of.219-220, Almaty, 050010, tel. 272-13-19, 272-13-18,

<http://nauka-nanrk.kz> / reports-science.kz

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

ISSN 2224-5227

Volume 2, Number 318 (2018), 31 – 35

UDC 541.183(075)

A. Kazenova, A. Brener, V. Golubev, G. Kenzhalieva, Sh. Shapalov, A.A. Bekaulova

M. Auezov South Kazakhstan State University, Shymkent, Kazakhstan

E-mail: aikerimkazenova@mail.ru shermahan_1984@mail.ru

**ANALYSIS OF MATHEMATICAL MODELS OF TECHNOLOGICAL
SYSTEMS WITH CLUSTERING OR AGGREGATION**

Abstract. A critical analysis of the main widely used aggregation models based on the Smoluchowski kinetic equations has been carried out. It is shown that these models have a drawback that the rate of evolution of the clusters concentration with given orders is assumed to be dependent immediately on the concentrations of clusters of lower orders at the same moment. Some prospective ways for overcoming the shortcomings of known models noted in the analysis have been proposed, and new equations have been derived.

Keywords: clustering, aggregation, kinetic equation, dispersed phase, modification, modeling, equations.

Introduction. Technological systems where physical and chemical transformations are accompanied by aggregation process of an internal phase and clustering with a complex internal structure are widely used in the chemical, pharmaceutical, metallurgical and other industries. Therefore, the problems of modeling and calculating of such systems attract great attention of researchers. However, despite a significant number of works, many problems remain poorly studied, and the common models of the clustering processes of internal phases in complex physical and chemical systems have a number of shortcomings deteriorating their practical value.

In this paper is given a brief review of the main commonly used aggregation models on the basis of Smoluchowski kinetic equations [1,2]. Some ways which are in the authors' opinion prospective ways of overcoming the shortcomings of known models noted during the analysis are also proposed.

Smoluchowski equation and its features. The growth of the cluster according to the Smoluchowski model takes place on the basis of attachment of primary particles and secondary crystals to it which enter the cluster surface through a diffusion mechanism. Whereby the growth of the cluster is described as the movement of the reacting zone, i.e. a region where new particles join the cluster. The particle trajectories start outside the region occupied by the cluster, and end at the moment the particle is in contact with the cluster. This process can also be described as a random walk using the Smoluchowski equation of the following form:

$$\frac{dn_k(t)}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{i+i+j=k} \Phi_{ij} C_i(t) C_j(t) - n_k(t) \sum_{j=1}^{\infty} \Phi_{jk} C_j(t). \quad (1)$$

Where $C_k(t)$ - density of k -partial clusters.

The kernel Φ_{ij} of system of equations (1) takes into account the dependence of the collision cross section on the dimensions and mobility of clusters. Such an approach can be successfully applied to problems where there are sources and sinks that correspond to the presence of an external field in the point of neighborhood of equilibrium phase transition [2, 3].

A certain internal contradiction inherent in the kinetic equations of aggregation on the basis of the Smoluchowski binary coagulation model is that the rate of evolution of the concentration of clusters of a certain order is assumed to be dependent on the concentrations of clusters of lower orders at the same

time. It actually means the instantaneous formation of a cluster when its constituents physically interact between each other. At the same time, the relaxation time of the process is calculated on the basis of particular models that develop the physical mechanism of the aggregation process (for example, DLFO). In addition specificities of the mechanism are usually become apparent only as to the method of calculation of coagulation kernels without changing the kinetic equation form. This approach does not allow to calculate the evolution of the system with incomplete information on the initial concentrations of clusters, and also take into account the memory effects in the system.

This contradiction can be eliminated only by modifying the kinetic equation form of aggregation itself, taking into account the relaxation times. Moreover, we proceed from the premise that the kinetic equation form can nevertheless be considered indirectly to the specifics of the physical nature and mechanism of the aggregation process if it is assumed that the main path of the influence of this specificity on the kinetic equation itself is the formation of a hierarchy of relaxation times. The derivation of the classical Fokker-Planck equation can be mentioned as an example of such approach [3].

The need to take into account the relaxation phenomena in the derivation of the kinetic equations of aggregation was noted by many researchers [4,5].

Consider for example the formation of rain drops in the atmosphere. At the initial moment of the formation of a drop, it is characterized by a certain initial size of the primary embryo, which we will consider as a cluster of the first order. Then the drops are combined with each other and become larger.

In order to describe the kinetics of the aggregation process, we need to know, first, what is the concentration of such drops (first order, second order), i.e. primary drops, combined in two, three drops etc. We need to know how fast the drops of different orders will be combined with each other. The kinetic coefficients required for such a description depend for example on the electric charge carried by the drops. And the electric charge depends on how long the drop is in the atmosphere. Herein lies the impact of the background of the process.

If the drops have different backgrounds, they will differently aggregate. We can not know all this information. But we can estimate the characteristic time during which this electric charge varies by a definite quantity. And with the help of the knowledge of this relaxation time, the influence of unknown in details background on the kinetics of the process can be estimated.

one can make an assessment of how the entire prehistory, which is not known in detail, will affect the kinetics of the process.

All this is fully applicable to the description of aggregation processes in systems with chemical sources of a dispersed phase [6].

Earlier, the papers [4-6] considered the problems of modeling of heat and mass exchange processes based on the methodology of relaxation transfer kernels. Here the derivation of nonlocal kinetic equations of aggregation in homogeneous disperse systems on the basis of the same methodology is proposed for discussion. For binary coagulation is used the Smoluchowski equation as the base model [2].

This is about temporal nonlocality, i.e. about the delay of the process taking into account the hierarchy of relaxation times. The choice of the model equation in this case is a technical issue. Other models can be also used [7,8]. More importantly, the application of the methodology of relaxation transfer kernels [6] for the modification of the kinetic equations is more formal than for the transfer equations. This approach is controversial, of course.

Another aspect of the problem is related to the fact that the Smoluchowski kinetic equation is written for a medium that is assumed to be absolutely homogeneous with respect to the volume concentration of clusters of different orders. The same assumption is made in the new model.

Modified Smoluchowski equation. Let's consider the modification of the Smoluchowski equation with the time lag of aggregation, which is intended to describe the effect of the characteristic time of formation of the aggregate on the kinetics of the process [6].

In our situation, the role of relaxation times is played by the characteristic times $\tau_{i,j}$ of aggregations i - and j -. Then the following nonlocal modification of Smoluchowski equation is proposed for the aggregation process in a polydisperse system [6, 7]:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{i-1} \int dt_1 \Phi_{i-j,j}(t, t_1) C_{i-j}(t_1) C_j(t_1) - \sum_{j=1}^{\infty} \int dt_1 \Phi_{i,j}(t, t_1) C_i(t_1) C_j(t_1) \quad (2)$$

The model equations for the elements of the coagulation matrix are as follows [6]:

$$\frac{\partial}{\partial t} \Phi_{i,j} + \frac{\Phi_{i,j}}{\tau_{i,j}} f_{i,j}^0 = 0. \quad (3)$$

Then the integro-differential equations take the following form:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_i}{\partial t} = & \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{i-1} \int dt_1 \Phi_{i-j,j}^0 \exp\left(-\frac{f_{i-j,j}^0}{\tau_{i-j,j}}(t-t_1)\right) C_{i-j}(t_1) C_j(t_1) - \\ & \sum_{j=1}^{\infty} \int dt_1 \Phi_{i,j}^0 \exp\left(-\frac{f_{i,j}^0}{\tau_{i,j}}(t-t_1)\right) C_i(t_1) C_j(t_1) \end{aligned} \quad (4)$$

For the case of an isotropic and homogeneous medium, relations (4) can be regarded as ordinary differential equations

The time derivatives of the cumulative elements have the following form

$$\Phi_{i,j}^0 C_i(t) C_j(t) - \frac{f_{i,j}^0}{\tau_{i,j}} \Phi_{i,j}^0 \int_0^t dt_1 C_i(t_1) C_j(t_1) \exp\left(-\frac{f_{i,j}^0}{\tau_{i,j}}(t-t_1)\right). \quad (5)$$

Then the equation can be changed to the following form:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 C_i}{dt^2} = & \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{i-1} \Phi_{i-j,j}^0 C_{i-j}(t) C_j(t) - \sum_{j=1}^{\infty} \Phi_{i,j}^0 C_i(t) C_j(t) - \\ & - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{i-1} \frac{f_{i-j,j}^0}{\tau_{i-j,j}} \int dt_1 \Phi_{i-j,j}^0 \exp\left(-\frac{f_{i-j,j}^0}{\tau_{i-j,j}}(t-t_1)\right) C_{i-j}(t_1) C_j(t_1) + \\ & + \sum_{j=1}^{\infty} \frac{f_{i,j}^0}{\tau_{i,j}} \int dt_1 \Phi_{i,j}^0 \exp\left(-\frac{f_{i,j}^0}{\tau_{i,j}}(t-t_1)\right) C_i(t_1) C_j(t_1) \end{aligned} \quad (6)$$

Let's take derivative with time once again:

$$\begin{aligned} \frac{d^3 C_i}{dt^3} = & \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} \sum_{j=1}^{i-1} \Phi_{i-j,j}^0 C_{i-j}(t) C_j(t) - \sum_{j=1}^{\infty} \Phi_{i,j}^0 C_i(t) C_j(t) \right) - \\ & - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{i-1} \frac{f_{i-j,j}^0}{\tau_{i-j,j}} \Phi_{i-j,j}^0 C_{i-j}(t) C_j(t) + \\ & + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{i-1} \left(\frac{f_{i-j,j}^0}{\tau_{i-j,j}} \right)^2 \int dt_1 \Phi_{i-j,j}^0 \exp\left(-\frac{f_{i-j,j}^0}{\tau_{i-j,j}}(t-t_1)\right) C_{i-j}(t_1) C_j(t_1) + \\ & + \sum_{j=1}^{\infty} \frac{f_{i,j}^0}{\tau_{i,j}} \Phi_{i,j}^0 C_i(t) C_j(t) - \\ & - \sum_{j=1}^{\infty} \left(\frac{f_{i,j}^0}{\tau_{i,j}} \right)^2 \int dt_1 \Phi_{i,j}^0 \exp\left(-\frac{f_{i,j}^0}{\tau_{i,j}}(t-t_1)\right) C_i(t_1) C_j(t_1) \end{aligned} \quad (7)$$

Carrying out separate average over groups of indices for elements describing formation and destruction of i -, we have the system of equations

$$\begin{aligned}
 \frac{d^3 C_i}{dt^3} = & \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} \sum_{j=1}^{i-1} \Phi_{i-j,j}^0 C_{i-j}(t) C_j(t) - \sum_{j=1}^{\infty} \Phi_{i,j}^0 C_i(t) C_j(t) \right) - \\
 & - \frac{1}{2} A_1 \sum_{j=1}^{i-1} \Phi_{i-j,j}^0 C_{i-j}(t) C_j(t) + \\
 & + \frac{1}{2} B_1^2 \sum_{j=1}^{i-1} \int dt_1 \Phi_{i-j,j}^0 \exp \left(-\frac{f_{i-j,j}^0}{\tau_{i-j,j}} (t-t_1) \right) C_{i-j}(t_1) C_j(t_1) + \\
 & + A_2 \sum_{j=1}^{\infty} \Phi_{i,j}^0 C_i(t) C_j(t) - \\
 & - B_2^2 \sum_{j=1}^{\infty} \int dt_1 \Phi_{i,j}^0 \exp \left(-\frac{f_{i,j}^0}{\tau_{i,j}} (t-t_1) \right) C_i(t_1) C_j(t_1)
 \end{aligned} \tag{8}$$

More compact view of the system is taken after changing

$$\begin{aligned}
 \frac{d^3 C_i}{dt^3} + (B_1 + B_2) \frac{d^2 C_i}{dt^2} + B_1 B_2 \frac{d C_i}{dt} = \\
 = (B_1 + B_2 + \frac{d}{dt}) \left(\frac{1}{2} \sum_{j=1}^{i-1} \Phi_{i-j,j}^0 C_{i-j}(t) C_j(t) - \sum_{j=1}^{\infty} \Phi_{i,j}^0 C_i(t) C_j(t) \right) - \\
 - \frac{1}{2} A_1 \sum_{j=1}^{i-1} \Phi_{i-j,j}^0 C_{i-j}(t) C_j(t) + A_2 \sum_{j=1}^{\infty} \Phi_{i,j}^0 C_i(t) C_j(t)
 \end{aligned} \tag{9}$$

A special feature of equation (9) is the existence of solutions describing the passage of disturbance with finite velocity [8]. The further development of the proposed model may consist in taking into account the difference in the characteristic times of coagulation in the aggregation of globules of different orders.

At the same time, the analysis of the obtained equation shows that the use of the local form of Smoluchowski equations with aggregation matrices subject to equations of the form (3) is completely correct for small parameter point because a correction to the local form has at least a second order of smallness [7].

Conclusion. The article gives a brief critical analysis of models of dispersed phase aggregation in physical and chemical systems. The need to take into account the relaxation phenomena is shown and techniques of derivation of the kinetic equations of aggregation with phenomena of time lag in the formation of aggregated clusters of disperse phase is outlined. This methodology can be used for modeling of dynamic processes in memory systems based on nonlocal transfer equations.

REFERENCES

- [1] Galkin V.A. Uravnenie Smoluhovskogo [The Smoluchowski equation].-M.: FIZMATLIT [Moscow: Publishing house "ФИЗМАТЛИТ "], **2001**. 336 p.
- [2] J.A.D. Wattis. An introduction to mathematical models of coagulation-fragmentation processes: A discrete deterministic mean-field approach, *Physica D* 222 (2006), 1-20. (in Eng)
- [3] Brener A. M., **2014**, Model of many-particle aggregation in dense particle systems, *Chemical Engineering Transactions* (CET), 38, 145-150. (in Eng)
- [4] Bardotti L., Jensen P., Hoareau A., Treilleux M., Cabaud B., **1995**, Experimental observation of fast diffusion of large antimony clusters on graphite surfaces, *Physical Review Letters*, 74(23), 4694. (in Eng)
- [5] Conway J.R., Adeleye A.S., Gardea-Torresdey J., Keller A.A., **2015**, Aggregation, dissolution, and transformation of copper nanoparticles in natural waters, *Environmental Science & Technology*, 49(5), 2749-2756. (in Eng)

- [6] Gambinossi F., Mylon S.E., Ferri J.K., **2015**, Aggregation kinetics and colloidal stability of functionalized nanoparticles, *Advances in Colloid and Interface Science*, 222, 332-349. (in Eng) (in Eng)
- [7] Sokolov S.V., Tschulik K., Batchelor-McAuley C., Jurkschat K., Compton R.G., **2015**, Reversible or not? Distinguishing agglomeration and aggregation at the nanoscale, *Analytical Chemistry*, 87(19), 10033-10039. (in Eng)
- [8] Rudjak V.Ju. Statisticheskaja teorija dissipativnyh processov v gazah i zhidkostjah [Statistical theory of dissipative processes in gases and liquids].-*Nauka: Novosibirsk* [Novosibirsk: Publishing house "Science"], **1987**, 272 p.
- [9] Willaime F., Fu C.C., Marinica M.C., Dalla Torre J., 2005, Stability and mobility of self-interstitials and small interstitial clusters in α -iron: ab initio and empirical potential calculations, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 228(1), 92-99. (in Eng)
- [10] Brenner A.M. Nelokal'nye uravnenija perenosa tepla i massy v tehnologicheskix processah, *Teor. osnovy him. tehnologii*. **2006**, T. 40, №6, S. 564-572. (In Russian)
- [11] Kim L.A., Brenner A.M. Vremennaja nelokal'nost' uravnenij perenosa tepla i massy v intensivnyh tehnologicheskix processah, *Teor. osnovy him. tehnologii*. **1996**, T. 30, №3, S. 258-262. (In Russian)
- [12] Kim L.A., Brenner A.M. Uchet perekrestnyh jeffektov v nelokal'nyh uravnenijah perenosa tepla i massy, *Teor. osnovy him. tehnologii*. **1998**, T. 32, №3, C. 247-250. (In Russian)
- [13] Lin M.Y., Lindsay H.M., Weitz D.A., Klein R.C.B.R., Ball R.C., Meakin P., **1990**, Universal diffusion-limited colloid aggregation, *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2(13), 3093. (in Eng)
- [14] Markus A.A., Parsons J.R., Roex E.W.M., De Voogt P., Laane R.W.P.M., **2015**, Modeling aggregation and sedimentation of nanoparticles in the aquatic environment, *Science of the Total Environment*, 506, 323-329. (in Eng)
- [15] Andreassen J.P., 2005, Formation mechanism and morphology in precipitation of vaterite-nano-aggregation or crystal growth?, *Journal of Crystal Growth*, 274(1), 256-264. (in Eng)
- [16] Wang B., Yoon B., König M., Fukamori Y., Esch F., Heiz U., Landman U., **2012**, Size-selected monodisperse nanoclusters on supported graphene: Bonding, isomerism, and mobility, *Nano Letters*, 12(11), 5907-5912. (in Eng)

А.О. Казенова, А.М. Бренер, В.Г. Голубев, Г.Д. Кенжалиева, Ш.К. Шапалов, А.А. Бекаулова

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

КЛАСТЕРЛЕУ НЕМЕСЕ АГРЕГАТТАУМЕН ТЕХНОЛОГИЯЛЫҚ ЖҮЙЕЛЕРДІҢ МАТЕМАТИКАЛЫҚ МОДЕЛЬДЕРІН ТАЛДАУ

Аннотация. Смолуховтың кинетикалық теңдеу негізінде агрегациялаудың кеңінен қолданылатын негізгі модельдердің критикалық талдамасы жасалынды. Осы модельдерге кемшіліктер тән екені көрсетілген, ол белгілі бір реттегі кластерлер концентрациясының эволюция жылдамдығы дәл сол уақыт мезетінде төменгі ретті кластерлердің концентрациясына тәуелді болатынына негізделген. Сондай-ақ талдау барысында белгілі модельдердің анықталған кемшіліктерін жеңудің авторлардың ойы бойынша анағұрлым перспективті жолдары ұсынылған және жаңа теңдеулер шығарылған.

Түйін сөздер: кластерлеу, агрегаттау, кинетикалық теңдеу, дисперстік фаза, түрлендіру, модельдеу, теңдеу.

А.О. Казенова, А.М. Бренер, В.Г. Голубев, Г.Д. Кенжалиева, Ш.К. Шапалов, А.А. Бекаулова

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

АНАЛИЗ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ С КЛАСТЕРИЗАЦИЕЙ ИЛИ АГРЕГАЦИЕЙ

Аннотация. Осуществлен критический анализ основных широко используемых моделей агрегации на основе кинетических уравнений Смолуховского. Показано, что эти моделям присущ недостаток, заключающийся в том, что скорость эволюции концентрации кластеров определенного порядка полагается зависимой от концентраций кластеров низших порядков в тот же момент времени. Предложены также некоторые перспективные по мнению авторов пути преодоления отмеченных при анализе недостатков известных моделей и выведены новые уравнения.

Ключевые слова: кластеризация, агрегация, кинетическое уравнение, дисперсная фаза, модификация, моделирование, уравнения.

МАЗМҰНЫ

Техникалық ғылымдар

(ағылшын тілінде)

<i>Генбач А.А., Шоколаков К.К.</i> Көбік өндіретін және көбік сөндіретін құрылымдармен бүркігішсіз капиллярлы-кеуекті тозан-газ тұтқыштарды әзірлеу.....	5
<i>Ермағамбет Б.Т., Қазанқанова М.Қ., Ермағамбетов Ж.Х., Наурызбаева А.Т., Канағатов К.Г., Абылғазина Л.Д.</i> Көміртектегі наноталшықтарды таскөмір пегінен алу әдістері.....	9
<i>Жатқанбаев А.А.</i> Ақпаратты стегеографиялық қорғаудың және аутентификация тиімді схемасы максималды ағынды табудың алгоритмдері негізінде.....	17
<i>Ахметов Б.</i> Қазақстан көлігінің ақпараттық-коммуникациялық жүйелерінің киберқауіпсіздігінің күйі, болашағы және негізгі бағыттары.....	23
<i>Казенова А.О., Бренер А.М., Голубев В.Г., Кенжалиева Г.Д., Шапалов Ш.К., Бекаулова А.А.</i> Кластерлеу немесе агрегаттаумен технологиялық жүйелердің математикалық модельдерін талдау.....	31
<i>Құралбаев З. Қ.</i> Тұтқырлы қабаттың материалдарының қырат баурайына төмен түсуі туралы есепті шешу.....	36
<i>Нұртай Ж.Т., Наукенова А.С., Досалиев Қ.С., Жорабек А.А., Шапалов Ш.К.</i> Селден қорғайтын қорғаныс құрылымдары үшін бастапқы шикізаттарды таңдау	43
<i>Тәтенов А.М., Жүнісбекова А.С.</i> Толқындық оптика құбылыстарының математикалық байланыстар алгоритмін Flash-CC, Java script-бағдарлау орталарында интербелсенді виртуалдау.....	47

Аграрлық ғылымдар

(ағылшын тілінде)

<i>Әкімбаев А.Р., Баймұқанов Д.А., Исхан Қ.Ж., Омаров М.М., Әубәкіров Х.А.</i> Әртүрлі түрлі генотиптегі биелердің сүттілігі және сүт құрамы.....	54
<i>Омбаев Ә., Тамаровский М., Даниленко О., Қарымсақов Т.</i> Етті бағыттағы мал шаруашылығындағы селекциялық – асылдандыру жұмысының кейбір қырлары.....	63

Қоғамдық ғылымдар

(ағылшын тілінде)

<i>Закирова М. С., Алан Р.</i> ЕУРАЗЭҚ-тың қалыптасуы мен дамуының негізгі үрдістері: интеграциялану мәселелері мен болашағы.....	68
<i>Есенбекова Ә. Б., Роберт Алан.</i> Жасыл экономика тұрақты дамудың жаңа бағыты ретінде.....	72
<i>Шалкибаева. Ж.А., Утеев Б. Ж.</i> Аймақтардың салықтық әлеуетін бағалаудың әдістемелік құралдары.....	79
<i>Ахметжанов Б., Тәжібекова К.Б., Шаметова А.А.</i> Елдің инновациялық экономикасы: проблемалары және олардың шешімдерінің жолдары.....	86
<i>Ахметова А.С., Рахимбекова А.Е., Болтаева А.А., Махатова А.Б.,</i> Экологиялық менеджменттің жауапкершілікті бизнесті басқару жолы.....	90
<i>Аюпова З.К., Құсайынов Д.Ө.</i> Интеграциялық процесстердің орталық Азия елдерінің құқықтық жүйесіне тигізетін әсерлері.....	96
<i>Байкин А.К., Шалболова Е.Ж., Тарануха Ю.В.</i> Дивидификация инновациялық секторларды дамыту факторы.....	102
<i>Ескалиева А.Ж., Әдиетова Е.М., Рахимова С.А.</i> Экономиканы жаңғырту жағдайында адам капиталы.....	108
<i>Исаева Б.К., Тлесова Э.Б., Азатбек Т.А.</i> Шетелдік мұнай компанияларының кадрлық әлеуетінің инновациялық даму ерекшеліктері және олардың тәжірибесін Қазақстанда пайдалану.....	112
<i>Кемел М., Бакирбекова А.М., Таштанова Н.Н.</i> Қазақстандық компаниялардың басқару жүйесіндегі корпоративтік әлеуметтік жауапкершілік	121
<i>Мукушева Г.К., Ондашова А.Ж.</i> Токсикалық металдардың ион және тиістік металдардың тоқтатуға арналған золотель және читосанға негізді тыйымдар.....	127
<i>Ламбекова А.Н., Нурғалиева А.М.</i> Екінші деңгейлі банктердің ішкі аудитінде ақпараттық технологиялы қолдану қажеттілігі	131
<i>Сабинова Р.К., Кирдасинова К.А., Дингазиева М.Д., Жұмағұлова М.М., Луқпанова М.А.</i> Кәсіпорындағы жұмысшылардың компаниясы жүйесін жетілді.....	135
<i>Саябаев К.М., Абдрахманова Р.С., Дошан А.С., Мукашева Г.М.</i> Ақмоланың айылық саласындағы ұрақты дамудың әдістемесіне әдістемелік бағыттар METHODOLOGICAL.....	139
<i>Умирзаков С.Ы., Наурызбаев А.Ж., Бұхарбаева А.Ж.</i> Күрішөндірісін мемлекеттік қолдау тиімділігін арттыру – Қазақстанның агроөнеркәсіптік кешенінің даму стратегиясының негізі.....	144

<i>Хуаныш Л.</i> Кәсіпорын басқару жүйесінің ішкі бақылауының рөлі.....	153
<i>Жумабаев А.К., Магай Т.П., Пол Мартин.</i> Қазақстанның сүт өнеркәсібі тиімді бизнес үлгісін іздеуде.....	159

Техникалық ғылымдар

(орыс тілінде)

<i>Генбач А.А., Шоколаков К.К.</i> Көбік өндіретін және көбік сөндіретін құрылымдармен бүркігішсіз капиллярлы-кеуекті тозаң-газ тұтқыштарды әзірлеу.....	167
--	-----

Аграрлық ғылымдар

(орыс тілінде)

<i>Әкімбаев А.Р., Баймұқанов Д.А., Исхан Қ.Ж., Омаров М.М., Әубәкіров Х.А.</i> Әртүрлі түрлі генотиптегі биелердің сүттілігі және сүт құрамы.....	172
---	-----

<i>Омбаев Ә., Тамаровский М., Даниленко О., Қарымсақов Т.</i> Етті бағыттағы мал шаруашылығындағы селекциялық – асылдандыру жұмысының кейбір қырлары.....	181
---	-----

Қоғамдық ғылымдар

(орыс тілінде)

<i>Жумабаев А.К., Магай Т.П., Пол Мартин.</i> Қазақстанның сүт өнеркәсібі тиімді бизнес үлгісін іздеуде.....	186
<i>Шалкибаева. Ж.А., Утеев Б. Ж.</i> Аймақтардың салықтық әлеуетін бағалаудың әдістемелік құралдары.....	195

СОДЕРЖАНИЕ

Технические науки

(на английском языке)

<i>Генбач А.А., Шоколаков К.К.</i> Разработка безфорсуночных капиллярно-пористых пылегазоуловителей с пеногенерирующими и пеногасящими структурами.....	5
<i>Ермагамбет Б.Т., Казанкапова М.К., Ермагамбетов Ж.Х., Наурызбаева А.Т., Канагатов К.Г., Абылгазина Л.Д.</i> Методы получения углеродных нановолокон из каменноугольного ПЕКА.....	9
<i>Жатқанбаев А.А.</i> Эффективная схема стеганографической защиты информации и аутентификации на основе алгоритмов нахождения максимального потока	17
<i>Ахметов Б.</i> Состояние, перспективы и основные направления развития кибербезопасности информационно-коммуникационных систем транспорта Казахстана.....	23
<i>Казенова А.О., Бренер А.М., Голубев В.Г., Кенжалиева Г.Д., Шапалов Ш.К., Бекаулова А.А.</i> Анализ математических моделей технологических систем с кластеризацией или агрегацией.....	31
<i>Куралбаев З. К.</i> Решение задачи об опускании материалов вязкого слоя по склону возвышенности	36
<i>Нуртай Ж.Т., Наукенова А.С., Досалиев К.С., Жорабек А.А., Шапалов Ш.К.</i> Подбор исходных шихтовых материалов для селезащитных конструкций	43
<i>Татенов А.М., Жунибекова А.С.</i> Интерактивная виртуализация в среде Flash-CC, Java script алгоритмов математических связей явления волновой оптики.....	47

Аграрные науки

(на английском языке)

<i>Акимбеков А.Р., Баймуканов Д.А., Исхан К.Ж., Омаров М.М., Аубакиров Х.А.</i> Молочная продуктивность и состав молока кобыл разных генотипов.....	54
<i>Омбаев А., Тамаровский М., Даниленко О., Карымсаков Т.</i> Некоторые аспекты селекционно-племенной работы в мясном скотоводстве	63

Общественные науки

(на английском языке)

<i>Закирова М.С., Алан Р.</i> Основные тенденции образования и развития ЕВРАЗЭС: проблемы и перспективы интеграции.....	68
<i>Есенбекова А.Б., Роберт Алан.</i> Зеленая экономика как новый путь устойчивого развития.....	72
<i>Шалжибаева Ж.А., Утеев Б. Ж.</i> Методический инструментальный оценки налогового потенциала региона.....	79
<i>Ахметжанов Б., Тажиббекова К.Б., Шаметова А.А.</i> Инновационная экономика страны: проблемы и пути их решения.....	86
<i>Ахметова А.С., Рахимбекова А.Е., Болтаева А.А., Махатова А.Б.</i> Экологический менеджмент как путь к ответственному ведению бизнеса	90
<i>Аюпова З.К., Кусаинов Д.У.</i> Влияние интеграционных процессов на развитие правовых систем стран Центральной Азии.....	96
<i>Байкин А.К., Шальболова Ю.Ж., Тарануха Ю.В.</i> Диверсификация как фактор в развитии инновационных секторов экономики.....	102
<i>Ескалиева А.Ж., Адиева Э.М., Рахимова С.А.</i> Человеческий капитал в условиях модернизации экономики.....	108
<i>Исаева Б.К., Глесова Э.Б., Азатбек Т.А.</i> Особенности инновационного развития кадрового потенциала зарубежных нефтяных компаний и применения их опыта в Казахстане.....	112
<i>Кемел М., Бакирбекова А.М., Таитанова Н.Н.</i> Корпоративная социальная ответственность в системе управления казахстанских компаний	121
<i>Мукушева Г.К., Ондашова А.Ж.</i> Сорбционные материалы на основе цеолита и хитозана для обезвреживания ионов токсичных металлов.....	127
<i>Ламбекова А.Н., Нургалиева А.М.</i> Необходимость применения информационных технологий во внутреннем аудите в банках второго уровня.....	131
<i>Сабирова Р.К., Кирдасинова К.А., Дингазиева М.Д., Жумагулова М.М., Луқпанова М.А.</i> Совершенствование системы вознаграждения работников на предприятии.....	135
<i>Саябаев К.М., Абдрахманова Р.С., Дошан А.С., Мукашева Г.М.</i> Методические подходы к оценке устойчивого развития сельских территорий акмолинской области.....	139
<i>Умирзаков С.Ы., Наурызбаев А.Ж., Бұхарбаева А.Ж.</i> Повышение эффективности государственной поддержки рисоводства – основа стратегии развития агропромышленного комплекса Казахстана.....	144

<i>Хуаныш Л.</i> Роль внутреннего контроля в системе управления предприятием.....	153
<i>Жумабаев А.К., Магай Т.П., Пол Мартин.</i> Молочная отрасль Казахстана в поиске эффективной бизнес модели....	159
Технические науки (на русском языке)	
<i>Генбач А.А., Шоколаков К.К.</i> Разработка безфорсуночных капиллярно-пористых пылегазоуловителей с пеногенерирующими и пеногасящими структурами.....	167
Аграрные науки (на русском языке)	
<i>Акимбеков А.Р., Баймуканов Д.А., Исхан К.Ж., Омаров М.М., Аубакиров Х.А.</i> Молочная продуктивность и состав молока кобыл разных генотипов.....	172
<i>Омбаев А., Тамаровский М., Даниленко О., Карымсаков Т.</i> Некоторые аспекты селекционно-племенной работы в мясном скотоводстве	181
Общественные науки (на русском языке)	
<i>Жумабаев А.К., Магай Т.П., Пол Мартин.</i> Молочная отрасль Казахстана в поиске эффективной бизнес модели.....	186
<i>Шалжибаева Ж.А., Утеев Б. Ж.</i> Методический инструментарий оценки налогового потенциала региона.....	195

CONTENTS

Technical sciences

(in English)

<i>Genbach A.A., Skokolakov K.K.</i> Development of nozzle-free capillary porous dust-and-gas collectors with foam generating and defoaming structures.....	5
<i>Ermagambet B.T., Kazankapova M.K., Ermogambetov Zh.Kh., Nauryzbayeva A.T., Kanagatov K.G., Abylgazina L.D.</i> Methods for producing carbon nanofibers from coal pitch.....	9
<i>Zhatkanbayev A.A.</i> Effective scheme of steganography information protection and authentication based on maximum flow algorithms	17
<i>Akhmetov B.</i> Status, perspectives and main directions of the development of cybersecurity of information and communication transport systems of Kazakhstan.....	23
<i>Kazenova A., Brener A., Golubev V., Kenzhalieva G., Shapalov Sh., Bekaulova A.A.</i> Analysis of mathematical models of technological systems with clustering or aggregation.....	31
<i>Kuralbayev Z. K.</i> Solution of the problem of lowering of materials of viscous layer down the hillslope.....	36
<i>Nurtay Zh.T., Naukenova A.S., Dosaliyev K.S., Zhorabek A.A., Shapalov Sh.K.</i> Selection of initial charge materials for mud protection structures	43
<i>Tatenov A.M., Zhunisbekova A.S.</i> Interactive virtualization in the environment of flash-cc, java script of algorithms of mathematical communications the phenomenon of wave optics.....	47

Agrarian science

(in English)

<i>Akimbekov A.R., Baimukanov D.A., Iskhan K.Zh., Omarov M.M., Aubakirov Kh.A.</i> Dairy productivity and milk composition of mares of different genotypes.....	54
<i>Ombaev A., Tamarovsky M., Danilenko O., Karymsakov T.</i> Some aspects of selection-breeding work in meat cattle breeding.....	63

Social Sciences

(in English)

<i>Zakirova M.S., Alan R.</i> The main tendencies of the creation and development of eurasian economic UNION: problems and prospects of integration.....	68
<i>Esenbekova A.B., Robert Alan.</i> Green economy as the new way of sustainable development.....	72
<i>Shalkibayeva Zh. A., Uteyev B.Zh.</i> Methodical toolkit of regional tax potential assesment.....	79
<i>Akhmetzhanov B., Tazhibekova KB, Shametova A.A.</i> Innovative economy of the country: problems and the ways of their solutions.....	86
<i>Akhmetova A., Rakhimbekova A., Boltayeva A., Makhatova A.</i> Ecological management as the way to responsible business operation.....	90
<i>Ayupova Z.K., Kussainov D.U.</i> Influence of integration processes on the development of the legal systems of the central Asia countries	96
<i>Baikin A.K., Shalbolova Y.Zh., Taranukha Y.V.</i> Diversification as a factor in the development of innovative sectors.....	102
<i>Eskalieva A.Zh., Adietova E.M., Rakhimova S.A.</i> Human capital in the conditions of modernization of economics.....	108
<i>Issayeva B.K., Tlessova E.B., Azatbek T.A.</i> Peculiarities of innovative development of the personnel potential of foreign oil companies and application of their experience in Kazakhstan.....	112
<i>Kemel M., Tashtanova N.N., Bakirbekova A.M.</i> Corporate social responsibility in management systems of Kazakhstan companies	121
<i>Mukusheva G.K., Ondashova A.Zh.</i> Sorption materials based on zeolite and chitosane for the discharge of ions of toxic metals.....	127
<i>Lambekova A.N., Nurgaliyeva A.M.</i> Need of using of information technology in inner audit in the banks of the second level.....	131
<i>Sabirova R.K., Kirdasinova K.A., Dingazieva M.D., Zhumalova M.M., Lukpanova M.A.</i> Improvement of the compensation system for employees at the enterprise.....	135
<i>Sayabayev K.M.¹, Abdrakhmanova R.S.², Doshan A.S.³, Mukasheva G.M.</i> Approaches to estimation of sustainable development of rural areas of akmolin area.....	139
<i>Umirzakov S. I., Nauryzbayev A. Zh., Bukharbayeva A. Zh.</i> Improving efficiency of the state support of rice planting – baseline for the strategy of agro-industrial complex development in Kazakhstan.....	144
<i>Huanysh L.</i> Place of the internal control in management system and the form of its organization.....	153

<i>Zhumabayev A.K., Magay T.P.¹, Pohl Martin.</i> The search for the efficient business model for the dairy sector in Kazakhstan.....	159
--	-----

Technical sciences

(in Russian)

<i>Genbach A.A., Skokolakov K.K.</i> Development of nozzle-free capillary porous dust-and-gas collectors with foam generating and defoaming structures.....	167
---	-----

Agrarian science

(in Russian)

<i>Akimbekov A.R., Baimukanov D.A., Iskhan K.Zh., Omarov M.M., Aubakirov Kh.A.</i> Dairy productivity and milk composition of mares of different genotypes.....	172
---	-----

<i>Ombaev A., Tamarovsky M., Danilenko O., Karymsakov T.</i> Some aspects of selection-breeding work in meat cattle breeding.....	181
---	-----

Social Sciences

(in Russian)

<i>Zhumabayev A.K., Magay T.P.¹, Pohl Martin.</i> The search for the efficient business model for the dairy sector in Kazakhstan.....	186
--	-----

<i>Shalkibayeva Zh. A., Uteyev B.Zh.</i> Methodical toolkit of regional tax potential assessment.....	195
---	-----

**Publication Ethics and Publication Malpractice
in the journals of the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan**

For information on Ethics in publishing and Ethical guidelines for journal publication see <http://www.elsevier.com/publishingethics> and <http://www.elsevier.com/journal-authors/ethics>.

Submission of an article to the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan implies that the work described has not been published previously (except in the form of an abstract or as part of a published lecture or academic thesis or as an electronic preprint, see <http://www.elsevier.com/postingpolicy>), that it is not under consideration for publication elsewhere, that its publication is approved by all authors and tacitly or explicitly by the responsible authorities where the work was carried out, and that, if accepted, it will not be published elsewhere in the same form, in English or in any other language, including electronically without the written consent of the copyright-holder. In particular, translations into English of papers already published in another language are not accepted.

No other forms of scientific misconduct are allowed, such as plagiarism, falsification, fraudulent data, incorrect interpretation of other works, incorrect citations, etc. The National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan follows the Code of Conduct of the Committee on Publication Ethics (COPE), and follows the COPE Flowcharts for Resolving Cases of Suspected Misconduct (http://publicationethics.org/files/u2/New_Code.pdf). To verify originality, your article may be checked by the originality detection service Cross Check <http://www.elsevier.com/editors/plagdetect>.

The authors are obliged to participate in peer review process and be ready to provide corrections, clarifications, retractions and apologies when needed. All authors of a paper should have significantly contributed to the research.

The reviewers should provide objective judgments and should point out relevant published works which are not yet cited. Reviewed articles should be treated confidentially. The reviewers will be chosen in such a way that there is no conflict of interests with respect to the research, the authors and/or the research funders.

The editors have complete responsibility and authority to reject or accept a paper, and they will only accept a paper when reasonably certain. They will preserve anonymity of reviewers and promote publication of corrections, clarifications, retractions and apologies when needed. The acceptance of a paper automatically implies the copyright transfer to the National Academy of sciences of the Republic of Kazakhstan.

The Editorial Board of the National Academy of sciences of the Republic of Kazakhstan will monitor and safeguard publishing ethics.

Правила оформления статьи для публикации в журнале смотреть на сайте:

www.nauka-nanrk.kz

ISSN 2518-1483 (Online), ISSN 2224-5227 (Print)

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

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

Подписано в печать 13.04.2018.
Формат 60x881/8. Бумага офсетная. Печать – ризограф.
12,6 п.л. Тираж 500. Заказ 2.