

ISSN 2518-1491 (Online),
ISSN 2224-5286 (Print)



«ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ
ҰЛТТЫҚ ҒЫЛЫМ АКАДЕМИЯСЫ» РҚБ
«ХАЛЫҚ» ЖҚ

Х А Б А Р Л А Р Ы

ИЗВЕСТИЯ

РОО «НАЦИОНАЛЬНОЙ
АКАДЕМИИ НАУК РЕСПУБЛИКИ
КАЗАХСТАН»
ЧФ «Халык»

N E W S

OF THE ACADEMY OF SCIENCES
OF THE REPUBLIC OF
KAZAKHSTAN
«Halyk» Private Foundation

SERIES
CHEMISTRY AND TECHNOLOGY
1 (458)

JANUARY – MARCH 2024

PUBLISHED SINCE JANUARY 1947

PUBLISHED 4 TIMES A YEAR

ALMATY, NAS RK



ЧФ «ХАЛЫҚ»

В 2016 году для развития и улучшения качества жизни казахстанцев был создан частный Благотворительный фонд «Халык». За годы своей деятельности на реализацию благотворительных проектов в областях образования и науки, социальной защиты, культуры, здравоохранения и спорта, Фонд выделил более 45 миллиардов тенге.

Особое внимание Благотворительный фонд «Халык» уделяет образовательным программам, считая это направление одним из ключевых в своей деятельности. Оказывая поддержку отечественному образованию, Фонд вносит свой посильный вклад в развитие качественного образования в Казахстане. Тем самым способствуя росту числа людей, способных менять жизнь в стране к лучшему – профессионалов в различных сферах, потенциальных лидеров и «великих умов». Одной из значимых инициатив фонда «Халык» в образовательной сфере стал проект *Ozgeris powered by Halyk Fund* – первый в стране бизнес-инкубатор для учащихся 9-11 классов, который помогает развивать необходимые в современном мире предпринимательские навыки. Так, на содействие малому бизнесу школьников было выделено более 200 грантов. Для поддержки талантливых и мотивированных детей Фонд неоднократно выделял гранты на обучение в Международной школе «Мирас» и в Astana IT University, а также помог казахстанским школьникам принять участие в престижном конкурсе «USTEM Robotics» в США. Авторские работы в рамках проекта «Тәлімгер», которому Фонд оказал поддержку, легли в основу учебной программы, учебников и учебно-методических книг по предмету «Основы предпринимательства и бизнеса», преподаваемого в 10-11 классах казахстанских школ и колледжей.

Помимо помощи школьникам, учащимся колледжей и студентам Фонд считает важным внести свой вклад в повышение квалификации педагогов, совершенствование их знаний и навыков, поскольку именно они являются проводниками знаний будущих поколений казахстанцев. При поддержке Фонда «Халык» в южной столице был организован ежегодный городской конкурс педагогов «Almaty Digital Ustaz».

Важной инициативой стал реализуемый проект по обучению основам финансовой грамотности преподавателей из восьми областей Казахстана, что должно оказать существенное влияние на воспитание финансовой грамотности и предпринимательского мышления у нового поколения граждан страны.

Необходимую помощь Фонд «Халык» оказывает и тем, кто особенно остро в ней нуждается. В рамках социальной защиты населения активно проводится

работа по поддержке детей, оставшихся без родителей, детей и взрослых из социально уязвимых слоев населения, людей с ограниченными возможностями, а также обеспечению нуждающихся социальным жильем, строительству социально важных объектов, таких как детские сады, детские площадки и физкультурно-оздоровительные комплексы.

В копилку добрых дел Фонда «Халык» можно добавить оказание помощи детскому спорту, куда относится поддержка в развитии детского футбола и карате в нашей стране. Жизненно важную помощь Благотворительный фонд «Халык» оказал нашим соотечественникам во время недавней пандемии COVID-19. Тогда, в разгар тяжелой борьбы с коронавирусной инфекцией Фонд выделил свыше 11 миллиардов тенге на приобретение необходимого медицинского оборудования и дорогостоящих медицинских препаратов, автомобилей скорой медицинской помощи и средств защиты, адресную материальную помощь социально уязвимым слоям населения и денежные выплаты медицинским работникам.

В 2023 году наряду с другими проектами, нацеленными на повышение благосостояния казахстанских граждан Фонд решил уделить особое внимание науке, поскольку она является частью общественной культуры, а уровень ее развития определяет уровень развития государства.

Поддержка Фондом выпуска журналов Национальной Академии наук Республики Казахстан, которые входят в международные фонды Scopus и WoS и в которых публикуются статьи отечественных ученых, докторантов и магистрантов, а также научных сотрудников высших учебных заведений и научно-исследовательских институтов нашей страны является не менее значимым вкладом Фонда в развитие казахстанского общества.

**С уважением,
Благотворительный Фонд «Халык»!**

Бас редактор:

ЖҰРЫНОВ Мұрат Жұрынұлы, химия ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі, Қазақстан Республикасы Ұлттық ғылым академиясының президенті, АҚ «Д.В. Сокольский атындағы отын, катализ және электрохимия институтының» бас директоры (Алматы, Қазақстан) Н = 4

Редакция алқасы:

ӘДЕКЕНОВ Серғазы Мынжасарұлы (бас редактордың орынбасары), химия ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі, «Фитохимия» Халықаралық ғылыми-өндірістік холдингінің директоры (Қарағанды, Қазақстан) Н = 11

АГАБЕКОВ Владимир Енокович (бас редактордың орынбасары), химия ғылымдарының докторы, профессор, Беларусь ҰҒА академигі, Жаңа материалдар химиясы институтының құрметті директоры (Минск, Беларусь) Н = 13

СТРНАД Мирослав, профессор, Чехия ғылым академиясының Эксперименттік ботаника институтының зертхана меңгерушісі (Оломоуц, Чехия) Н = 66

БҮРКІТБАЕВ Мұхамбетқали, химия ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі, әл-Фараби атындағы ҚазҰУ-дың бірінші проректоры (Алматы, Қазақстан) Н = 11

ХОХМАНН Джудит, Сегед университетінің Фармацевтика факультетінің Фармакогнозия кафедрасының меңгерушісі, Жаратылыстану ғылымдарының пәнаралық орталығының директоры (Сегед, Венгрия) Н = 38

РОСС Самир, PhD докторы, Миссисипи университетінің Өсімдік өнімдерін ғылыми зерттеу ұлттық орталығы, Фармация мектебінің профессоры (Оксфорд, АҚШ) Н = 35

ХУТОРЯНСКИЙ Виталий, философия докторы (PhD, фармацевт), Рединг университетінің профессоры (Рединг, Англия) Н = 40

ТЕЛТАЕВ Бағдат Бұрханбайұлы, техника ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА корреспондент-мүшесі, Қазақстан Республикасы Индустрия және инфрақұрылымдық даму министрлігі (Алматы, Қазақстан) Н = 13

ФАРУК Асана Дар, Хамдар аль-Маджида Шығыс медицина колледжінің профессоры, Хамдард университетінің Шығыс медицина факультеті (Карачи, Пәкістан) Н = 21

ФАЗЫЛОВ Серік Драхметұлы, химия ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі, Органикалық синтез және көмір химиясы институты директорының ғылыми жұмыстар жөніндегі орынбасары (Қарағанды, Қазақстан) Н = 6

ЖОРОБЕКОВА Шарипа Жоробекқызы, химия ғылымдарының докторы, профессор, Қырғызстан ҰҒА академигі, ҚР ҰҒА Химия және химиялық технология институты (Бішкек, Қырғызстан) Н = 4

ХАЛИКОВ Джурабай Халикович, химия ғылымдарының докторы, профессор, Тәжікстан ҒА академигі, В.И. Никитин атындағы Химия институты (Душанбе, Тәжікстан) Н = 6

ФАРЗАЛИЕВ Вагиф Меджидоглы, химия ғылымдарының докторы, профессор, ҰҒА академигі (Баку, Әзірбайжан) Н = 13

ГАРЕЛИК Хемда, философия докторы (PhD, химия), Халықаралық таза және қолданбалы химия одағының Химия және қоршаған орта бөлімінің президенті (Лондон, Англия) Н = 15

«ҚР ҰҒА Хабарлары. Химия және технология сериясы»

ISSN 2518-1491 (Online),

ISSN 2224-5286 (Print)

Меншіктенуші: «Қазақстан Республикасының Ұлттық ғылым академиясы» РҚБ (Алматы қ.). Қазақстан Республикасының Ақпарат және қоғамдық даму министрлігінің Ақпарат комитетінде 29.07.2020 ж. берілген № **KZ66VPY00025419** мерзімдік басылым тіркеуіне қойылу туралы куәлік.

Тақырыптық бағыты: *органикалық химия, бейорганикалық химия, катализ, электрохимия және коррозия, фармацевтикалық химия және технологиялар.*

Мерзімділігі: жылына 4 рет.

Тиражы: 300 дана.

Редакцияның мекен-жайы: 050010, Алматы қ., Шевченко көш., 28, 219 бөл., тел.: 272-13-19

<http://chemistry-technology.kz/index.php/en/archiv>

© Қазақстан Республикасының Ұлттық ғылым академиясы РҚБ, 2024

Редакцияның мекенжайы: 050100, Алматы қ., Қонаев к-сі, 142, «Д.В. Сокольский атындағы отын, катализ және электрохимия институты» АҚ, каб. 310, тел. 291-62-80, факс 291-57-22, e-mail: orgcat@nursat.kz

Главный редактор:

ЖУРИНОВ Мурат Журинович, доктор химических наук, профессор, академик НАН РК, президент Национальной академии наук Республики Казахстан, генеральный директор АО «Институт топлива, катализа и электрохимии им. Д.В. Сокольского» (Алматы, Казахстан) Н = 4

Редакционная коллегия:

АДЕКЕНОВ Сергазы Мынжасарович (заместитель главного редактора), доктор химических наук, профессор, академик НАН РК, директор Международного научно-производственного холдинга «Фитохимия» (Караганда, Казахстан) Н = 11

АГАБЕКОВ В ладимир Енокович (заместитель главного редактора), доктор химических наук, профессор, академик НАН Беларуси, почетный директор Института химии новых материалов (Минск, Беларусь) Н = 13

СТРНАД Мирослав, профессор, заведующий лабораторией института Экспериментальной ботаники Чешской академии наук (Оломоуц, Чехия) Н = 66

БУРКИТБАЕВ Мухамбеткали, доктор химических наук, профессор, академик НАН РК, Первый проректор КазНУ имени аль-Фараби (Алматы, Казахстан) Н = 11

ХОХМАНН Джудит, заведующий кафедрой Фармакогнозии Фармацевтического факультета Университета Сегеда, директор Междисциплинарного центра естественных наук (Сегед, Венгрия) Н = 38

РОСС Самир, доктор PhD, профессор Школы Фармации национального центра научных исследований растительных продуктов Университета Миссисипи (Оксфорд, США) Н = 35

ХУТОРЯНСКИЙ Виталий, доктор философии (Ph.D, фармацевт), профессор Университета Рединга (Рединг, Англия) Н = 40

ТЕЛЬГАЕВ Багдат Бурханбайулы, доктор технических наук, профессор, член-корреспондент НАН РК, Министерство Индустрии и инфраструктурного развития Республики Казахстан (Алматы, Казахстан) Н = 13

ФАРУК Асана Дар, профессор колледжа Восточной медицины Хамдарда аль-Маджида, факультет Восточной медицины университета Хамдарда (Карачи, Пакистан) Н = 21

ФАЗЫЛОВ Серик Драхметович, доктор химических наук, профессор, академик НАН РК, заместитель директора по научной работе Института органического синтеза и углехимии (Караганда, Казахстан) Н = 6

ЖОРОБЕКОВА Шарипа Жоробековна, доктор химических наук, профессор, академик НАН Кыргызстана, Институт химии и химической технологии НАН КР (Бишкек, Кыргызстан) Н = 4

ХАЛИКОВ Джурабай Халикович, доктор химических наук, профессор, академик АН Таджикистана, Институт химии имени В.И. Никитина АН РТ (Душанбе, Таджикистан) Н = 6

ФАРЗАЛИЕВ Вагиф Меджид оглы, доктор химических наук, профессор, академик НАНА (Баку, Азербайджан) Н = 13

ГАРЕЛИК Хемда, доктор философии (Ph.D, химия), президент Отдела химии и окружающей среды Международного союза чистой и прикладной химии (Лондон, Англия) Н = 15

«Известия НАН РК. Серия химии и технологий».

ISSN 2518-1491 (Online),

ISSN 2224-5286 (Print)

Собственник: Республиканское общественное объединение «Национальная академия наук Республики Казахстан» (г. Алматы).

Свидетельство о постановке на учет периодического печатного издания в Комитете информации Министерства информации и общественного развития Республики Казахстан № KZ66VPY00025419, выданное 29.07.2020 г.

Тематическая направленность: *органическая химия, неорганическая химия, катализ, электрохимия и коррозия, фармацевтическая химия и технологии.*

Периодичность: 4 раз в год.

Тираж: 300 экземпляров.

Адрес редакции: 050010, г. Алматы, ул. Шевченко, 28, оф. 219, тел.: 272-13-19

<http://chemistry-technology.kz/index.php/en/archiv>

© РОО Национальная академия наук Республики Казахстан, 2024

Адрес редакции: 050100, г. Алматы, ул. Кунаева, 142, АО «Институт топлива, катализа и электрохимии им. Д.В. Сокольского», каб. 310, тел. 291-62-80, факс 291-57-22, e-mail: orgcat@nursat.kz

Editor in chief:

ZHURINOV Murat Zhurinovich, doctor of chemistry, professor, academician of NAS RK, president of NAS RK, general director of JSC "Institute of fuel, catalysis and electrochemistry named after D.V. Sokolsky (Almaty, Kazakhstan) H = 4

Editorial board:

ADEKENOV Sergazy Mynzhasarovich (deputy editor-in-chief) doctor of chemical sciences, professor, academician of NAS RK, director of the international Scientific and production holding «Phytochemistry» (Karaganda, Kazakhstan) H = 11

AGABEKOV Vladimir Enokovich (deputy editor-in-chief), doctor of chemistry, professor, academician of NAS of Belarus, honorary director of the Institute of Chemistry of new materials (Minsk, Belarus) H = 13

STRNAD Miroslav, head of the laboratory of the institute of Experimental Botany of the Czech academy of sciences, professor (Olomouc, Czech Republic) H = 66

BURKITBAYEV Mukhambetkali, doctor of chemistry, professor, academician of NAS RK, first vice-rector of al-Farabi KazNU (Almaty, Kazakhstan) H = 11

HOHMANN Judith, head of the department of pharmacognosy, faculty of Pharmacy, university of Szeged, director of the interdisciplinary center for Life sciences (Szeged, Hungary) H = 38

ROSS Samir, Ph.D., professor, school of Pharmacy, national center for scientific research of Herbal Products, University of Mississippi (Oxford, USA) H = 35

KHUTORYANSKY Vitaly, Ph.D., pharmacist, professor at the University of Reading (Reading, England) H = 40

TELTAYEV Bagdat Burkhanbayuly, doctor of technical sciences, professor, corresponding member of NAS RK, ministry of Industry and infrastructure development of the Republic of Kazakhstan (Almaty, Kazakhstan) H = 13

PHARUK Asana Dar, professor at Hamdard al-Majid college of Oriental medicine. faculty of Oriental medicine, Hamdard university (Karachi, Pakistan) H = 21

FAZYLOV Serik Drakhmetovich, doctor of chemistry, professor, academician of NAS RK, deputy director for institute of Organic synthesis and coal chemistry (Karaganda, Kazakhstan) H = 6

ZHOROBEKOVA Sharipa Zhorobekovna, doctor of chemistry, professor, academician of NAS of Kyrgyzstan, Institute of Chemistry and chemical technology of NAS KR (Bishkek, Kyrgyzstan) H = 4

KHALIKOV Jurabay Khalikovich, doctor of chemistry, professor, academician of the academy of sciences of Tajikistan, institute of Chemistry named after V.I. Nikitin AS RT (Tajikistan) H = 6

FARZALIEV Vagif Medzhid ogly, doctor of chemistry, professor, academician of NAS of Azerbaijan (Azerbaijan) H = 13

GARELIK Hemda, PhD in chemistry, president of the department of Chemistry and Environment of the International Union of Pure and Applied Chemistry (London, England) H = 15

News of the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan. Series of chemistry and technology.

ISSN 2518-1491 (Online),

ISSN 2224-5286 (Print)

Owner: RPA «National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan» (Almaty).

The certificate of registration of a periodical printed publication in the Committee of information of the Ministry of Information and Social Development of the Republic of Kazakhstan No. **KZ66VPY00025419**, issued 29.07.2020.

Thematic scope: *organic chemistry, inorganic chemistry, catalysis, electrochemistry and corrosion, pharmaceutical chemistry and technology.*

Periodicity: 4 times a year.

Circulation: 300 copies.

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

<http://chemistry-technology.kz/index.php/en/arhiv>

© National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan, 2024

Editorial address: JSC «D.V. Sokolsky institute of fuel, catalysis and electrochemistry», 142, Kunayev str., of. 310, Almaty, 050100, tel. 291-62-80, fax 291-57-22, e-mail: orgcat@nursat.kz

NEWS

OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF THE REPUBLIC OF KAZAKHSTAN
SERIES CHEMISTRY AND TECHNOLOGY
ISSN 2224–5286

Volume 1. Number 458 (2024), 18–26

<https://doi.org/10.32014/2024.2518-1491.204>

УДК 532.529

МФТИ 61.13.15

© **Zh. Zhaksylyk**¹, **L. Musabekova**^{2*}, **M.A. Murad**³, **K. Arystanbayev**²,
D. Zhumadullayev¹, 2024

¹M. Auezov South Kazakhstan University, Shymkent, Kazakhstan;

²South Kazakhstan Medical Academy, Shymkent, Kazakhstan;

³Universiti Putra Malaysia, Selangor, Malaysia.

E-mail: mleyla@bk.ru

COMPUTER MODELING BASED ON THE STOCHASTIC LATTICE CONCEPT FOR AGGREGATION PROCESSES IN A TUBULAR REACTOR

Zh. Zhaksylyk — PhD student of Technological Machines and Equipment department, M.Auezov South Kazakhstan University, Shymkent, Kazakhstan

E-mail: Zhomart454@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0003-3306-9055>;

L.M. Musabekova — Doctor of Technical Sciences, professor of Pharmaceutical manufacturing technology department, South Kazakhstan medical academy, Shymkent, Kazakhstan

E-mail: mleyla@bk.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8712-2446>;

M.A.A. Murad — PhD, professor of Software Engineering and Information Systems department, Universiti Putra Malaysia, Selangor, Malaysia

E-mail: masrah@upm.edu.my, <https://orcid.org/0000-0002-0335-5873>;

K.Y. Arystanbayev — Candidate of Technical Sciences, professor of Pharmaceutical manufacturing technology department, South Kazakhstan medical academy, Shymkent, Kazakhstan

E-mail: 201ukgu@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-9499-192X>;

D.K. Zhumadullayev — PhD, senior teacher of Technological Machines and Equipment department, M.Auezov South Kazakhstan University, Shymkent, Kazakhstan

E-mail: daulet_ospl@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6552-2817>.

Abstract. The paper presents the outcomes of a numerical experiment aimed at investigating the kinetics of the aggregation process in a dispersed system flowing through a tubular reactor. The model employed in this study is based on the discrete–event simulation paradigm (DES). In previous studies, a lattice model was used for simulating the aggregation process in a batch reactor. The key achievement of this work is the development of a lattice aggregation model that can be applied to flow reactors. The model was constructed using the mathematical tools of random walks on mathematical lattices. The findings of the study demonstrate that this approach effectively addresses the challenge of considering the influence of multiparticle collisions, thereby enabling the description of both diffusion–limited aggregation and the competition between different kinetic mechanisms occurring at various characteristic timescales. Additionally, the

paper presents an algorithm that accounts for the influence of a fresh flow containing a dispersed phase entering the flow reactor, affecting the kinetic parameters of the aggregation process taking place within its working volume.

Keywords: dispersed system, the aggregation process, discrete–event simulation paradigm, diffusion–limited aggregation, stochastic lattice

© Ж. Жаксылык¹, Л.М. Мусабекова^{2*}, М.А. Murad³, К.Е. Арыстанбаев²,
Д.К. Жумадуллаев¹, 2024

¹М.Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университеті, Шымкент, Қазақстан;

²Оңтүстік Қазақстан медицина академиясы, Шымкент, Қазақстан;

³Путра Малайзия университеті, Селангор, Малайзия.

E-mail: mleyla@bk.ru

ТҮБЕЛІКТІ РЕАКТОРДАҒЫ АГРЕГАЦИЯЛЫҚ ПРОЦЕСТЕРДІҢ СТОХАСТИКАЛЫҚ РЕКТОР КОНЦЕПЦИЯСЫНА НЕГІЗГЕН КОМПЬЮТЕРЛІК МОДЕЛЬДЕУ

Жаксылык Ж. — «Технологиялық машиналар және жабдықтар» кафедрасының докторанты, М.Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университеті, Шымкент, Қазақстан

E-mail: Zhomart454@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0003-3306-9055>;

Мусабекова Л.М. — техника ғылымдарының докторы, «Фармацевтикалық өндіріс технология» кафедрасының профессоры, Оңтүстік Қазақстан медицина академиясы, Шымкент, Қазақстан

E-mail: mleyla@bk.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8712-2446>;

М.А. Murad — PhD доктор, «Бағдарламалық камтамасыз ету инженерия және ақпараттық жүйелер» кафедрасының профессоры, Путра Малайзия университеті, Селангор, Малайзия

E-mail: masrah@upm.edu.my, <https://orcid.org/0000-0002-0335-5873>;

Арыстанбаев К.Е. — техника ғылымдарының кандидаты, «Фармацевтикалық өндіріс технология» кафедрасының профессоры, Оңтүстік Қазақстан медицина академиясы, Шымкент, Қазақстан

E-mail: 201lukgu@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-9499-192X>;

Жумадуллаев Д.К. — PhD доктор, «Технологиялық машиналар мен жабдықтар» кафедрасының аға оқытушысы, М. Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университеті, Шымкент, Қазақстан

E-mail: daulet_ospl@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6552-2817>.

Аннотация. Жұмыста құбырлы реактор арқылы ағып жатқан дисперстік жүйедегі агрегация процесінің кинетикасын зерттеуге арналған сандық тәжірибенің нәтижелері берілген. Бұл зерттеуде қолданылған модель дискретті оқиғаларды модельдеу (ДОМ) парадигмасына негізделген. Алдыңғы зерттеулерде пакеттік реактордағы агрегация процесін модельдеу үшін торлы модель пайдаланылды. Бұл жұмыстың негізгі жетістігі ағынды реакторларға қолдануға болатын агрегаттық тор моделін жасау болып табылады. Жұмыста математикалық аппарат торларындағы кездейсоқ соқтығыстардың математикалық моделі құрастырылған. Зерттеу нәтижелері көрсеткендей, бұл тәсіл көп бөлшектердің соқтығысуларының әсерін есепке алу мәселесін тиімді шешеді, осылайша диффузиялық шектелген агрегацияны да, әртүрлі сипаттамалық уақыт шкалаларында болатын әртүрлі кинетикалық механизмдер арасындағы бәсекені де сипаттауға мүмкіндік береді. Сонымен қатар, қағазда ағын реакторына түсетін дисперсті фазасы бар жаңа

ағынның оның жұмыс көлемінде болатын агрегация процесінің кинетикалық параметрлеріне әсерін ескеретін алгоритм ұсынылған.

Түйін сөздер: дисперсті жүйе, агрегациялық процес, дискретті–оқиғалық модельдеу парадигмасы, диффузиялық–шектеулі агрегация, стохастикалық тор

© **Ж. Жаксылық¹, Л.М. Мусабекова^{2*}, М.А.А. Murad³,
К.Е. Арыстанбаев², Д.К. Жумадуллаев¹, 2024**

¹Южно–азахстанский университет им. М. Ауэзова, Шымкент, Казахстан;

²Южно–Казахстанская медицинская академия, Шымкент, Казахстан;

³Университет Путра Малайзия, Селангор, Малайзия.

E-mail: mleyla@bk.ru

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ АГРЕГАЦИИ НА ОСНОВЕ КОНЦЕПЦИИ СТОХАСТИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ В ТРУБЧАТОМ РЕАКТОРЕ

Жаксылық Ж. — докторант кафедры «Технологические машины и оборудование», Южно-Казахстанский университет имени М. Ауэзова, Шымкент, Казахстан

E-mail: Zhomart454@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0003-3306-9055>;

Мусабекова Л. М. — д.т.н., профессор кафедры «Технология фармацевтического производства», Южно–Казахстанская медицинская академия, Шымкент, Казахстан.

E-mail: mleyla@bk.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8712-2446>;

М.А.А. Murad — доктор PhD, профессор кафедры «Программная инженерия и информационных систем», Университет Путра Малайзия, Селангор, Малайзия

E-mail: masrah@upm.edu.my, <https://orcid.org/0000-0002-0335-5873>;

Арыстанбаев К. Е. — к.т.н., профессор кафедры «Технология фармацевтического производства», Южно – Казахстанская медицинская академия, Шымкент, Казахстан

E-mail: 201ukgu@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-9499-192X>;

Жумадуллаев Д. К. — доктор PhD, старший преподаватель кафедры «Технологические машины и оборудование», Южно–Казахстанский университет им. М. Ауэзова, Шымкент, Казахстан

E-mail: daulet_ospl@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6552-2817>.

Аннотация. В работе представлены результаты численного эксперимента по исследованию кинетики процесса агрегации в дисперсной системе, протекающей через трубчатый реактор. Модель, используемая в этом исследовании, основана на парадигме дискретно–событийного моделирования (ДСМ). В предыдущих исследованиях для моделирования процесса агрегации в реакторе периодического действия использовалась решетчатая модель. Ключевым достижением этой работы является разработка модели агрегационной решетки, которая может быть применена к проточным реакторам. Модель построена с использованием математического аппарата случайных блужданий по математическим решеткам. Результаты исследования показывают, что этот подход эффективно решает проблему учета влияния многочастичных столкновений, тем самым позволяя описать как агрегацию, ограниченную диффузией, так и конкуренцию между различными кинетическими механизмами, происходящими в различных характерных временных масштабах. Кроме того, в работе представлен алгоритм,

учитывающий влияние поступающего в проточный реактор свежего потока, содержащего дисперсную фазу, на кинетические параметры процесса агрегации, протекающего в его рабочем объеме.

Ключевые слова: дисперсная система, процесс агрегации, парадигма дискретно–событийного моделирования, диффузионно–ограниченная агрегация, стохастическая решетка

Введение

Процессы агрегации имеют значительное влияние в различных сферах, таких как нанотехнологии, химическая и фармацевтическая промышленность, металлургия и другие (Chen, 2015). Несмотря на длительный интерес исследователей и множество важных исследований, теоретический анализ многих аспектов в данной области до сих пор остается недостаточно развитым.

Первая сложность состоит в том, что широко применяемая модель учета многочастичных столкновений, впервые предложенная Крапивским в 1991 году, ограничивает эффективность практических расчетов. В большинстве моделей рассматриваются только двойные столкновения, как подробно описано в работе (Wattis, 2006).

Тем не менее, результаты теоретических исследований свидетельствуют о том, что столкновения, вовлекающие более двух частиц, могут оказать существенное воздействие на кинетику агрегации, особенно при высокой концентрации дисперсной фазы и интенсивном случайном дрейфе (Brenner, 2014).

Еще одной проблемой является неравномерное распределение концентрации дисперсных частиц в объеме системы, отмеченное в исследовании (Markus, 2015). Во время процесса агрегации это локальное неоднородное распределение меняется во времени и пространстве, как подробно описано в работе (Chowdhury, 2015), что добавляет дополнительные сложности к теоретическому моделированию.

Схема алгоритма

Алгоритм, используемый в данном исследовании, базируется на предшествующей работе (Brenner, 2017). В дальнейшем приведен краткий обзор этого алгоритма, с учетом его адаптации для применения в контексте проточного реактора.

Для описания процессов диффузии и агрегации в рамках модели DES (дискретно–событийная модель) используется фиксированная пространственная решетка. В каждой ячейке решетки выполняется запись изменения в локальном распределении частиц, обусловленные дрейфом и агрегацией, согласно исследованию (Gambinossi, 2015). Таким образом, различные кинетические процессы, включая диффузию, агрегацию и седиментацию (взаимодействие диффузии и агрегации), а также возможные внешние силовые поля, описываются в едином формате (Brenner, 2017).

В случае агрегации с ограниченной диффузией (АОД) процесс слияния кластеров происходит мгновенно в момент их столкновения. С точки зрения решетчатой модели это явление интерпретируется как объединение кластеров

в одной ячейке. Следовательно, характерное время агрегации в этом случае определяется временем перемещения частиц из одной ячейки в другую – характерным временем диффузии частиц. Такое время можно рассматривать как характерную единицу времени.

В случае смешанной кинетики, объединяющей диффузию и коагуляцию с конечной скоростью (Zhou, 2015), временным шагом выбирается характерное время коагуляции кластеров, попавших в одну ячейку. Это означает, что частицы, попадая в одну и ту же ячейку, могут не успевать объединиться в единый кластер за один временной шаг, и вместо этого продолжают двигаться независимо друг от друга (Brener, 2017). Предполагается, что объединение частиц происходит только при следующем временном шаге, когда они снова находятся в одной ячейке. На этом этапе агрегация считается завершенной. Этот подход позволяет учесть конкуренцию между временными интервалами диффузии и характерным временем агрегации, что обусловлено особенностями данной модели.

Для имитации случайного дрейфа частиц вдоль решетки применена методика, предварительно разработанная в работе (Brener, 2017). Процесс случайного выбора компонент движения частицы в вертикальном и горизонтальном направлениях выполняется перед каждым временным шагом. Этот выбор производится из заранее определенного набора доступных перемещений в новом столбце и новой строке матрицы.

Термин "порядок кластера" описывает количество мономеров, составляющих кластер. В данном контексте важно учесть, что кластеры различных порядков обладают разной подвижностью (Brener, 2017). Существует критическое значение порядка кластера, при котором подвижность существенно снижается, и это значение зависит от специфических физико–химических характеристик конкретной системы (Wang, 2012).

Таким образом, с увеличением порядка кластера математическое ожидание смещения уменьшается (Tammet, 1995). Например, для кластеров порядков 1 и 2 случайный выбор временного смещения в заданном направлении может быть осуществлен из последовательности $(-3; -2; -1; 0; 1; 2; 3)$, в то время как для кластеров порядка выше двух и меньше четырех выбор производится из последовательности $(-3; -2; -2; -1; -1; 0; 1; 1; 2; 2; 3)$ (Brener, 2017). Важно отметить, что подвижность кластеров также зависит от их расстояния до стенок аппаратов.

Основные параметры численного эксперимента были взяты такими же, как и в предыдущей работе (Brener, 2017), за исключением одного существенного изменения. Движение в горизонтальном направлении на каждом временном шаге теперь включало два компонента: постоянное смещение со средней осевой скоростью потока и горизонтальную составляющую случайного дрейфа. Это обстоятельство потребовало некоторых изменений в схеме расчета.

Во–первых, предполагается, что частицы, попадающие в граничные ячейки вблизи стенок, остаются на месте при применении случайного дрейфа, который выходит за границы рассматриваемой решетки.

Во-вторых, в отличие от алгоритма, использованного для моделирования периодического реактора (Brenner, 2017), кластеры, перемещающиеся влево или вправо за пределы трубчатого реактора из-за случайного дрейфа или среднего потока, исключаются из последующих расчетов.

Схема расчета для случая DLA

В процессе расчета создаются четыре матрицы. Первая матрица A^* представляет всю решетку с кластерами различных порядков, сформированными в результате перемещений и агрегации в каждом временном интервале. Вторая матрица U моделирует аналогичную решетку, в которой содержатся кластеры, попадающие в реактор с входящим потоком, имеющим заданную среднюю горизонтальную скорость. Третья матрица A создается для описания конечной ситуации в конце временного интервала расчета и используется как отправная точка для следующего блока. Она формируется как сумма двух предыдущих матриц: $A = A^* + U$. Четвертая матрица S содержит информацию о количестве столкновений частиц в каждой ячейке на каждом временном шаге.

На рисунке 1 представлены описанные процедуры. Заштрихованная область в матрице (первые столбцы W) указывает на участок, который занимает свежий поток в течение одного временного интервала.

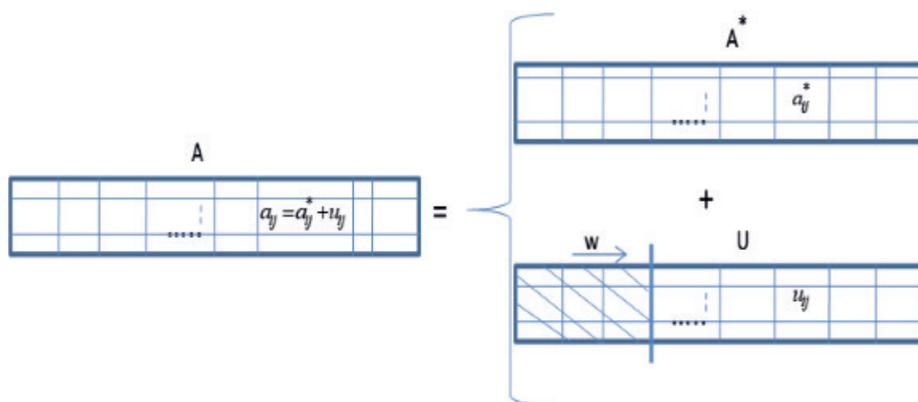


Рис. 1. Схема процедуры расчета
Fig. 1. Scheme of the calculation procedure

В начальный момент в каждую ячейку помещался кластер 1-го порядка. Затем для каждой частицы случайным образом выбиралось смещение, как было описано ранее, и проводилась последующая агрегация частиц согласно указанным выше принципам.

Процесс повторялся на каждом временном шаге с соблюдением тех же принципов. Численные эксперименты проводились на плоских матрицах размерами 4×40 , 8×40 , 5×20 и 4×100 , которые моделировали проточные реакторы длиной 20, 40 и 100 ячеек и шириной 4, 5 и 8 ячеек соответственно.

Схема расчета и основной код для случая смешанной кинетики

В ходе расчетов формируются пять матриц. Первые три матрицы (A^* , U и A)

имеют те же значения, что и описаны в предыдущем разделе. Четвертая матрица (S) также показывает количество столкновений частиц в каждой ячейке на каждом временном шаге.

Кроме того, создается пятая матрица В (Brener, 2017). Этот трехмерный массив В (I, J, M) служит для определения предыдущей ячейки, из которой данный кластер перешел в новую ячейку. В дополнение к двум индексам ячеек (I, J), в которые кластер попадает за заданный интервал времени, третий индекс М указывает на метку ячейки $((I-1) * N + J)$, где кластер находился до начала дрейфа. Это позволяет идентифицировать кластеры с одинаковыми метками, которые, согласно предложенной модели, должны быть агрегированы. Матрицу В можно назвать матрицей агрегирования.

Для наглядности привожу основной код, используемый в численном эксперименте (рисунок 2). Этот разработанный алгоритм обладает высокой производительностью вычислений. Например, время выполнения расчетов для матрицы размером 4x100 при использовании смешанной кинетики на протяжении 100 временных интервалов составляет примерно 5 минут с помощью программы.

```

procedure TForm1.calc3d;
var k,l,u,t,t1,ii,uu,kk:Integer; str:string;
begin
for i:=1 to n2 do//количество колонок
  for j:=1 to n1 do//количество строк
    for k:=1 to n3 do
      ssV3[i,j,k]:=0;
for i:=1 to n2+1 do
  for j:=1 to n1 do
    for k:=1 to n3 do
      for u:=1 to coln1 do
        begin
          c[i,j,k,u]:=0; U0_3d[i,j,k,u]:=0;//начальные данные
        end;
        for i:=1 to n2 do
          for j:=1 to n1 do
            for k:=1 to n3 do
              for u:=1 to coln1 do
                begin
                  if (a[i,j,k,u]>0) then //если ячейка не пуста
                    begin//перемещение частиц:
                      if (i+vg3w[i,j,k,u]<1) or (i+vg3w[i,j,k,u]>n2) then begin kk:=n2+1; ii:=1; uu:=1; end
                      else kk:=i+vg3w[i,j,k,u];
                      if j+vv3[i,j,k,u]<1 then l:=1;
                      if j+vv3[i,j,k,u]>n1 then l:=n1;
                      if (j+vv3[i,j,k,u]=1) and (j+vv3[i,j,k,u]<=n1) then l:=j+vv3[i,j,k,u];

```

Рис. 2. Основной код, используемый для проведения численного эксперимента

Fig. 2. Main code used for occurring the numerical experiment

Результаты моделирования

На Рисунках 3 и 4 представлены численные результаты для матриц. Каждая точка на графиках является усредненным значением из десяти серий вычислений. В процессе моделирования условная единица времени соответствует шагу вычисления. Кластеры порядка более 5 практически не наблюдались, поэтому они не отображены на графиках.

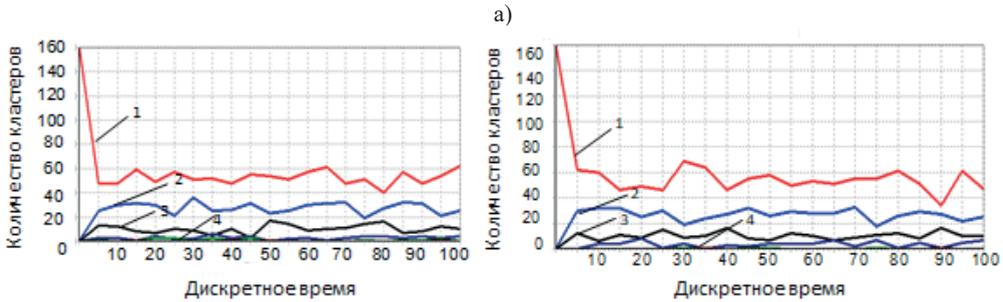


Рис. 3. Изменение количества кластеров разных порядков а. для $w=2$, б. для $w=8$. Таблица 4X40.

Эксперимент для случая АОД. Порядки кластеров: 1–первый, 2–й, 3–й, 4–й.

Fig. 3. Time history of the numbers of clusters of different orders for a. $w=2$, b. $w=8$. Table 4X40.

Experiment for DLA

case. Cluster orders: 1–first, 2–second, 3–third, 4–fourth

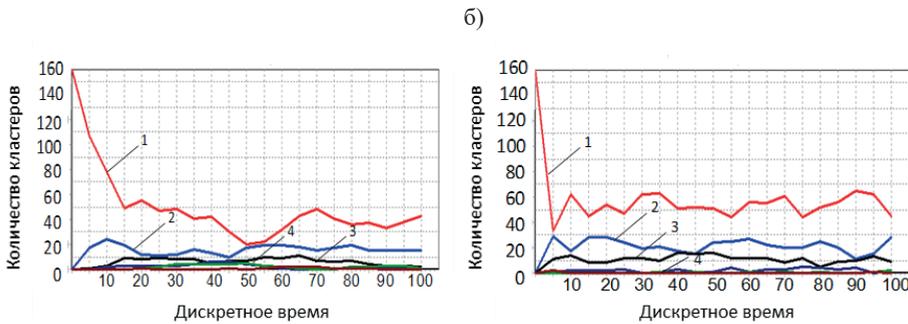


Рис. 4. Изменение количества кластеров разных порядков а. для $w=2$, б. для $w=8$. Таблица 4X40. Эксперимент для случая смешанной кинетики. Порядки кластеров: 1–первый, 2–й, 3–й, 4–й.

Fig. 4. Time history of the numbers of clusters of different orders for a. $w=2$, b. $w=8$. Table 4X40.

Experiment for mixed kinetics case. Cluster orders: 1–first, 2–second, 3–third, 4–fourth

Заклучение

Результаты численных экспериментов демонстрируют, что резкие изменения в распределении кластеров по порядкам наблюдаются в первые несколько временных интервалов после начала процесса, а затем состав фракции остается практически постоянным. Это явление справедливо как для моделирования методом АОД, так и для случая смешанной кинетики. Однако, снижение концентрации кластеров 1–го порядка в начальном периоде более резкое для случая АОД, что легко объяснимо. В то время как в случае смешанной кинетики устанавливается более однородное распределение фракций (практически одинаковые диаметры частиц). Улучшение однородности также наблюдается с увеличением средней скорости потока w .

В случае кинетики смешивания средний порядок кластеров устанавливается на более низком уровне. Таким образом, делаем вывод, что средний поток через реактор является контрольным параметром как для достижения определенной производительности, так и для стабилизации требуемого фракционного состава. Для случая модели периодического реактора (Brener, 2017), численные

эксперименты для проточного реактора показали, что общее количество столкновений с порядком больше двух не может считаться малым по сравнению с числом столкновений второго порядка. Это наблюдается особенно на начальных этапах процесса.

Разумеется, приведенные выше результаты служат иллюстрацией лишь потенциала предложенного математического инструмента, и их дальнейшая проверка и обсуждение обязательны для сравнения с альтернативными методами и экспериментальными данными.

REFERENCES

- Andreassen J.P. (2005). Formation mechanism and morphology in precipitation of vaterite – nano-aggregation or crystal growth? *Journal of Crystal Growth*. — Vol. 274(1). — Pp. 256–264.
- Boer G.B.J de, Hoedemakers G.F.M., Thoenes D. (1989). Coagulation in turbulent flow. Part II. *Chemical Engineering Research and Design*. — Vol. 67. — Pp. 308–315.
- Brener A.M. (2014). Model of many-particle aggregation in dense particle systems. *Chemical Engineering Transactions*. — Vol. 38. — Pp.145–150.
- Brener A.M., Musabekova L.M., Jamankarayeva M.A. (2017). Stochastic Lattice Model of Aggregation in Heterogeneous Disperse Media. *Chemical Engineering Transactions*. — Vol.60. — Pp.70–84.
- Chen H., Lin L., Li H., Li J., Lin J.M. (2015). Aggregation-induced structure transition of protein-stabilized zinc/copper nanoclusters for amplified chemiluminescence. *ACS Nano*. — Vol. 9 (2). — Pp. 2173–2183.
- 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*. — Vol.49(18). — Pp.10886–10893.
- Gambinossi F., Mylon S.E., Ferri J.K. (2015). Aggregation kinetics and colloidal stability of functionalized nanoparticles. *Advances in Colloid and Interface Science*. — Vol. 222. — Pp. 332–349.
- 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*. — Vol. 506. — Pp. 323–329.
- Tammet H. (1995) Size and mobility of nanometer particles, clusters and ions. *Journal of Aerosol Science*. — Vol. 26 (3). — Pp. 459–475.
- 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*. — Vol. 12 (11). — Pp. 5907–5912.
- Wattis J.A. (2006) An introduction to mathematical models of coagulation-fragmentation processes: a discrete deterministic mean-field approach. *Physica D: Nonlinear Phenomena*. — Vol. 222 (1). — Pp. 1–20.
- 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*. — Vol. 119. — Pp. 568–576.

МАЗМҰНЫ

Н.А. Алжаппарова, М.К. Ибраев, С.Ю. Паньшина, А.А. Жоргарова, Б.Е. Бектурганов ХАЛКОН НЕГІЗІНДЕГІ 3,5-ДИАРИЛПИРАЗОЛДЫ СИНТЕЗДЕУДІҢ ЖАҢА СТРАТЕГИЯСЫ.....	7
Ж. Жақсылық, Л.М. Мусабекова, М.А.А. Murad, К.Е. Арыстанбаев, Д.К. Жумадұллаев ТҮБЕЛІКТІ РЕАКТОРДАҒЫ АГРЕГАЦИЯЛЫҚ ПРОЦЕСТЕРДІҢ СТОХАСТИКАЛЫҚ РЕКТОР КОНЦЕПЦИЯСЫНА НЕГІЗГЕН КОМПЬЮТЕРЛІК МОДЕЛЬДЕУ.....	18
Т.С. Кайненова, Р.О. Орынбасар, Г.Т. Қосмбаева, Г.Ж. Жақупова АСФАЛЬТЕНДЕРДЕН СОРБЕНТТЕР АЛУ ЖӘНЕ ЖОЛ БИТУМЫНА АДГЕЗИЯЛЫҚ ҚОСПА РЕТІНДЕ ПАЙДАЛАНУ МҮМКІНДІГІН БАҒАЛАУ.....	27
Д.Ж. Калиманова, А.А. Алешова, Ш.Т. Балабекова, А.К. Мендигалиева ХИМИЯ ПӘНІН ОҚЫТУДА ЭКОЛОГИЯЛЫҚ БІЛІМ БЕРУ НЕГІЗДЕРІН ҚАЛЫПТАСТЫРУ.....	40
Л.М. Калимолдина, Г.С. Султангазиева, С.О. Абилқасова, С.С. Егеубаева АЛМАТЫ ҚАЛАСЫНЫҢ СУ РЕСУРСТАРЫНЫҢ ХИМИЯЛЫҚ ЗАТТАРМЕН ЛАСТАНУ ДЕҢГЕЙІН ЗЕРТТЕУ.....	54
А.Б. Қуандықова, Б.Ж. Джиембаев, А.Б. Добрынин, Н.И. Ақылбеков, Н.О. Акимбаева БЕЛИТТІ КЛИНКЕР СИНТЕЗДЕУ ҮШІН АЦІСАЙ МЕТАЛЛУРГИЯЛЫҚ ЗАУЫТЫНЫҢ КЛИНКЕРІН ҚОЛДАНУ.....	70
А. Қуандықова, Б. Таймасов, Н. Жаникулов, Е. Потапова ТЕТРАЭТИЛ 1,3-ФЕНИЛЕНБИС(ФОСФОРАМИДАТ) ЖӘНЕ ТЕТРАПРОПИЛ 1,3-ФЕНИЛЕНБИС(ФОСФОРАМИДАТ) СИНТЕЗІ, МОЛЕКУЛАЛЫҚ ЖӘНЕ КРИСТАЛДЫҚ ҚҰРЫЛЫМДАРЫ.....	83
Б.К. Масалимова, А.С. Дарменбаева, Ж.Б. Мукажанова, С.А. Тунгатарова, В.А. Садыков ТАБИҒИ ТАСЫМАЛДАҒЫШҚА ҚОНДЫРЫЛҒАН КАТАЛИЗАТОРЛАРДА ПРОПАН-БУТАН ҚОСПАСЫНЫҢ ЖАРТЫЛАЙ ТОТЫҒУЫ.....	94
О. Нүркенов, С. Фазылов, Ж. Нұрмағанбетов, Т. Сейілханов, Ә. Мендібаева ТАБИҒИ АЛКАЛОИДТАРДЫҢ ФРАГМЕНТТЕРІ БАР НИКОТИН ҚЫШҚЫЛЫНЫҢ ЖАҢА ТИОМОЧЕВИНА ТУЫНДЫЛАРЫНЫҢ СИНТЕЗІ ЖӘНЕ ҚҰРЫЛЫМЫ.....	106
Е.Б. Райымбеков, П.А. Абдуразова, С.П. Назарбекова, У.Б. Назарбек ІРІКТЕМЕЛІ ШАЙМАЛАУ АРҚЫЛЫ КОНКРЕЦИОНДЫ ФОСФОРИТ КОНЦЕНТРАЦИЯСЫН АРТТЫРУ.....	116
А.А. Саденова, А.Р. Silva, J.L. Díaz de Tuesta, Н.Т. Gomes, М.С. Калмаханова АСҚАБАҚ ТҰҚЫМЫНЫҢ ҚАБЫҒЫНАН АЛЫНҒАН АДСОРБЕНТТЕРДІ ҚОЛДАНА ОТЫРЫП, ӨНДІРІСТІК АҒЫНДЫ СУЛАРДАН НИКЕЛЬ ИОНДАРЫН ЖОЮ.....	137
А.И. Самадун, Б.Р. Таусарова, Г.Т. Дарибаева, Д.Е. Нурмуханбетова МЫС ОКСИДІ НАНОБӨЛШЕКТЕРІНІҢ СИНТЕЗІ ЖӘНЕ ОЛАРДЫ ТАМАҚ ӨНІМДЕРІН ОРАУ ҮШІН ҚОЛДАНУ.....	153
К.К. Сырманова, Ж.Б. Қалдыбекова, А.Б. Агабекова, Е.Т. Боташев, Р.М. Түлеуов ПОЛИМЕРЛІ ЖӘНЕ ФУНКЦИОНАЛДЫ ҚОСПАЛАРДЫҢ ПОЛИМЕРЛІ-БИТУМДЫ БАЙЛАНЫСТЫРҒЫШТЫҢ ҚАСИЕТТЕРІНЕ ӘСЕРІ.....	164
Б.Р. Таусарова, С.О. Әбілқасова, Л.М. Калимолдина, Ж.Е. Шаихова МЫРЫШ ОКСИДІНІҢ НАНОБӨЛШЕКТЕРІМЕН МОДИФИКАЦИЯЛАНҒАН ЗЫҒЫР МАТЕРИАЛДАРЫНЫҢ БАКТЕРИЯҒА ҚАРСЫ ҚАСИЕТТЕРІН ЗЕРТТЕУ.....	178
Н.Н. Токбаева, М.А. Дюсебаева, Г.Т. Дарибаева, Б.К. Копжасаров, Г.Е. Берганаева «УРАЛОСИБИРСКАЯ 2» БИДАЙ СОРТЫНЫҢ СО ₂ -СЫҒЫНДЫСЫНЫҢ ФИТОХИМИЯЛЫҚ ЗЕРТТЕУ.....	187

СОДЕРЖАНИЕ

Н.А. Алжанпарова, М.К. Ибраев, С.Ю. Паньшина, А.А. Жоргарова, Б.Е. Бектурганов НОВАЯ СТРАТЕГИЯ СИНТЕЗА 3,5-ДИАРИЛПИРАЗОЛОВ НА ОСНОВЕ ХАЛКОНОВ.....7	
Ж. Жаксылык, Л.М. Мусабекова, М.А.А. Murad, К.Е. Арыстанбаев, Д.К. Жумадуллаев КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ АГРЕГАЦИИ НА ОСНОВЕ КОНЦЕПЦИИ СТОХАСТИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ В ТРУБЧАТОМ РЕАКТОРЕ.....18	
Т.С. Кайменова, Р.О. Орынбасар, Г.Т. Космбаева, Г.Ж. Жакупова ОЦЕНКА ВОЗМОЖНОСТИ ПОЛУЧЕНИЯ СОРБЕНТОВ ИЗ АСФАЛЬТЕНОВ И ИХ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ В КАЧЕСТВЕ АДГЕЗИОННОЙ ДОБАВКИ К ДОРОЖНОМУ БИТУМУ.....27	
Д.Ж. Калиманова, А.А. Алешова, Ш.Т. Балабекова, А.К. Мендигалиева ФОРМИРОВАНИЕ ОСНОВ ЭКОЛОГИЧЕСКОГО ОБРАЗОВАНИЯ ПРИ ИЗУЧЕНИИ ХИМИИ.....40	
Л.М. Калимолдина, Г.С. Султангазиева, С.О.Абилкасова, С.С. Егеубаева ИССЛЕДОВАНИЕ УРОВНЯ ЗАГРЯЗНЕНИЯ ХИМИЧЕСКИМИ ВЕЩЕСТВАМИ ВОДНЫХ РЕСУРСОВ ГОРОДА АЛМАТЫ.....54	
А.Б. Куандыкова, Б.Ж. Джиембаев, А.Б. Добрынин, Н.И. Акылбеков, Н.О. Акимбаева ИСПОЛЬЗОВАНИЕ КЛИНКЕРА АЦЦИСАЙСКОГО МЕТАЛЛУРГИЧЕСКОГО ЗАВОДА ДЛЯ СИНТЕЗА БЕЛИТОВОГО КЛИНКЕРА.....70	
А. Куандыкова, Б. Таймасов, Н. Жаникулов, Е. Потапова СИНТЕЗ, МОЛЕКУЛЯРНЫЕ И КРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ СТРУКТУРЫ ТЕТРАЭТИЛ 1,3-ФЕНИЛЕНБИС(ФОСФОРАМИДАТА) И ТЕТРАПРОПИЛ 1,3-ФЕНИЛЕНБИС(ФОСФОРАМИДАТА).....83	
Б.К. Масалимова, А.С. Дарменбаева, Ж.Б. Мукажанова, С.А. Тунгатарова, В.А. Садыков ПАРЦИАЛЬНОЕ ОКИСЛЕНИЕ ПРОПАН-БУТАНОВОЙ СМЕСИ НА КАТАЛИЗАТОРАХ, НАНЕСЕННЫХ НА ПРИРОДНЫЕ НОСИТЕЛИ.....94	
О. Нуркенов, С. Фазылов, Ж. Нурмаганбетов, Т. Сейлханов, А. Мендибаева СИНТЕЗ И СТРОЕНИЕ НОВЫХ ТИОМОЧЕВИННЫХ ПРОИЗВОДНЫХ НИКОТИНОВОЙ КИСЛОТЫ С ФРАГМЕНТАМИ ПРИРОДНЫХ АЛКАЛОИДОВ.....106	
Е.Б. Райымбеков, П.А. Абдуразова, С.П. Назарбекова, У.Б. Назарбек ПОВЫШЕНИЕ КОНЦЕНТРАЦИИ КОНКРЕЦИОННОГО ФОСФОРИТА МЕТОДОМ СЕЛЕКТИВНОГО ВЫЩЕЛАЧИВАНИЯ.....116	
А.А. Саденова, А.П. Сильва, Дж.Л. Диас де Туэста, Х.Т. Гомес, М.С. Калмаханова УДАЛЕНИЕ ИОНОВ НИКЕЛЯ ИЗ ПРОМЫШЛЕННЫХ СТОЧНЫХ ВОД С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ АДСОРБЕНТОВ, ПОЛУЧЕННЫХ ИЗ СКОРЛУПЫ СЕМЯН ТЫКВЫ.....137	
А.И. Самадун, Б.Р. Таусарова, Г.Т. Дарибаева, Д.Е. Нурмуханбетова СИНТЕЗ НАНОЧАСТИЦ ОКСИДА МЕДИ И ПРИМЕНЕНИЕ ДЛЯ УПАКОВКИ ПИЩЕВЫХ ПРОДУКТОВ.....153	
К.К. Сырманова, Ж.Б. Калдыбекова, А.Б. Агабекова, Е.Т. Боташев, Р.М. Тулеуов ВЛИЯНИЕ ПОЛИМЕРНЫХ И ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ДОБАВОК НА СВОЙСТВА ПОЛИМЕРНО-БИТУМНОГО ВЯЖУЩЕГО.....164	
Б.Р. Таусарова, С.О. Абилкасова, Л.М. Калимолдина, Ж.Е. Шаихова ИССЛЕДОВАНИЕ АНТИБАКТЕРИАЛЬНЫХ СВОЙСТВ ЛЬНЯНЫХ МАТЕРИАЛОВ МОДИФИЦИРОВАННЫХ НАНОЧАСТИЦАМИ ОКСИДА ЦИНКА.....178	
Н.Н. Токбаева, М.А. Дюсебаева, Г.Т. Дарибаева, Б.К. Копжасаров, Г.Е. Берганаева ФИТОХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ CO ₂ -ЭКСТРАКТА СОРТА ПШЕНИЦЫ " УРАЛОСИБИРСКАЯ 2".....187	

CONTENTS

N.A. Alzhapparova, M.K. Ibraev, S.Y. Panshina, A.A. Zhortarova, B.E. Bekturganov NEW STRATEGY FOR THE SYNTHESIS OF 3,5-DIARYLPYRAZOLES BASED ON CHALCONES.....	7
Zh. Zhaksylyk, L. Musabekova, M.A. Murad, K. Arystanbayev, D. Zhumadullayev COMPUTER MODELING BASED ON THE STOCHASTIC LATTICE CONCEPT FOR AGGREGATION PROCESSES IN A TUBULAR REACTOR.....	18
T.S. Kainenova, R.O. Orynbassar, G.T. Kosmbayeva, G.Zh. Zhakupova ASSESSMENT OF THE POSSIBILITY OF OBTAINING SORBENTS FROM ASPHALT AND USE AS AN ADHESIVE ADDITIVE TO ROAD BITUMEN.....	27
D.Zh. Kalimanova, A.A. Aleshova, Sh.T. Balabekova, A.K. Mendigalieva, FORMATION OF THE BASICS OF ENVIRONMENTAL EDUCATION IN TEACHING CHEMISTRY.....	40
L.M. Kalimoldina, G.S. Sultangazieva, S.O. Abilkasova, S.S. Egeubaeva STUDY ON THE LEVEL OF CHEMICAL POLLUTION OF WATER RESOURCES IN ALMATY.....	54
A.B. Kuandykova, B.Zh. Dzhiembaev, A.B. Dobrynin, N.I. Akylbekov, N.O. Akimbaeva USE OF CLINKER FROM ASHISAI METALLURGICAL PLANT FOR SYNTHESIS OF BELITE CLINKER.....	70
A. Kuandykova, B. Taimasov, N. Zhanikulov, E. Potapova SYNTHESIS, MOLECULAR AND CRYSTAL STRUCTURES OF TETRAETHYL 1,3-PHENYLENEBIS (PHOSPHORAMIDATE) AND TETRAPROPYL 1,3-PHENYLENEBIS (PHOSPHORAMIDATE).....	83
B.K. Massalimova, A.S. Darmenbayeva, Zh. Mukazhanova, S.A. Tungatarova, V.A. Sadykov PARTIAL OXIDATION OF A PROPANE-BUTANE MIXTURE ON CATALYSTS SUPPORTED ON A NATURAL SUPPORT.....	94
O. Nurkenov, S. Fazylov, Zh. Nurmaganbetov, T. Seilkhanov, A. Mendibayeva SYNTHESIS AND STRUCTURE OF NEW THIOUREA DERIVATIVES OF NICOTINIC ACID WITH FRAGMENTS OF NATURAL ALKALOIDS.....	106
Y.B. Raiymbekov, P.A. Abdurazova, S.P. Nazarbekova, U.B. Nazarbek ENHANCING THE CONCENTRATION OF NODULAR PHOSPHORITE BY SELECTIVE LEACHING.....	116
A.A. Sadenova, A.P. Silva, J.L. Díaz de Tuesta, H.T. Gomes, M.S. Kalmakhanova REMOVAL OF NICKEL IONS FROM INDUSTRIAL WASTEWATER USING ADSORBENTS OBTAINED FROM THE SHELLS OF PUMPKIN SEEDS.....	137
A.I. Samadun, B.R. Taussarova, G.T. Daribayeva, D.E. Nurmukhanbetova SYNTHESIS OF COPPER OXIDE NANOPARTICLES AND APPLICATION FOR FOOD PACKAGING.....	153
K.K. Syrmanova, Zh.B. Kaldybekova, A.B. Agabekova, E.T. Botashev, R.M. Tuleuov INFLUENCE OF POLYMER AND FUNCTIONAL ADDITIVES ON THE PROPERTIES OF POLYMER-BITUMEN BINDER.....	164
B.R. Taussarova, S.O. Abilkasova, L.M. Kalimoldina, Zh.E. Shaikhova INVESTIGATION OF ANTIBACTERIAL PROPERTIES OF FLAX MATERIALS MODIFIED WITH ZINC OXIDE NANOPARTICLES.....	178
N.N. Tokbayeva, M.A. Dyusebaeva, G.T. Daribayeva, B.K. Kopzhassarov, G.E. Berganayeva PHYTOCHEMICAL STUDY OF CO ₂ -EXTRACT VARIETIES OF WHEAT "URALOSIBIRSKAYA-2".....	187

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 described work 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 Cross Check originality detection service <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 сайтах:

**www.nauka-nanrk.kz
<http://chemistry-technology.kz/index.php/en/arhiv>
ISSN 2518-1491 (Online), ISSN 2224-5286 (Print)**

Подписано в печать 15.03.2024.
Формат 60x88¹/₈. Бумага офсетная. Печать – ризограф.
13,0 п.л. Тираж 300. Заказ 1.