

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

ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ
ҰЛТТЫҚ ҒЫЛЫМ АКАДЕМИЯСЫНЫҢ

Д.В.СОКОЛЬСКИЙ АТЫНДАҒЫ «ЖАНАРМАЙ,
КАТАЛИЗ ЖӘНЕ ЭЛЕКТРОХИМИЯ ИНСТИТУТЫ» АҚ

Х А Б А Р Л А Р Ы

ИЗВЕСТИЯ

НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК
РЕСПУБЛИКИ КАЗАХСТАН

АО «ИНСТИТУТ ТОПЛИВА, КАТАЛИЗА И
ЭЛЕКТРОХИМИИ ИМ. Д.В. СОКОЛЬСКОГО»

NEWS

OF THE ACADEMY OF SCIENCES
OF THE REPUBLIC OF KAZAKHSTAN

JSC «D.V. SOKOLSKY INSTITUTE OF FUEL,
CATALYSIS AND ELECTROCHEMISTRY»

ХИМИЯ ЖӘНЕ ТЕХНОЛОГИЯ СЕРИЯСЫ



СЕРИЯ ХИМИИ И ТЕХНОЛОГИИ



SERIES CHEMISTRY AND TECHNOLOGY

6 (432)

**ҚАРАША – ЖЕЛТОҚСАН 2018 ж.
НОЯБРЬ – ДЕКАБРЬ 2018 г.
NOVEMBER – DECEMBER 2018**

1947 ЖЫЛДЫҢ ҚАҢТАР АЙЫНАН ШЫҒА БАСТАҒАН
ИЗДАЕТСЯ С ЯНВАРЯ 1947 ГОДА
PUBLISHED SINCE JANUARY 1947

ЖЫЛЫНА 6 РЕТ ШЫҒАДЫ
ВЫХОДИТ 6 РАЗ В ГОД
PUBLISHED 6 TIMES A YEAR

NAS RK is pleased to announce that News of NAS RK. Series of chemistry and technologies scientific journal has been accepted for indexing in the Emerging Sources Citation Index, a new edition of Web of Science. Content in this index is under consideration by Clarivate Analytics to be accepted in the Science Citation Index Expanded, the Social Sciences Citation Index, and the Arts & Humanities Citation Index. The quality and depth of content Web of Science offers to researchers, authors, publishers, and institutions sets it apart from other research databases. The inclusion of News of NAS RK. Series of chemistry and technologies in the Emerging Sources Citation Index demonstrates our dedication to providing the most relevant and influential content of chemical sciences to our community.

Қазақстан Республикасы Ұлттық ғылым академиясы "ҚР ҰҒА Хабарлары. Химия және технология сериясы" ғылыми журналының Web of Science-тің жаңаланған нұсқасы Emerging Sources Citation Index-те индекстелуге қабылданғанын хабарлайды. Бұл индекстелу барысында Clarivate Analytics компаниясы журналды одан әрі the Science Citation Index Expanded, the Social Sciences Citation Index және the Arts & Humanities Citation Index-ке қабылдау мәселесін қарастыруда. Web of Science зерттеушілер, авторлар, баспашылар мен мекемелерге контент тереңдігі мен сапасын ұсынады. ҚР ҰҒА Хабарлары. Химия және технология сериясы Emerging Sources Citation Index-ке енуі біздің қоғамдастық үшін ең өзекті және беделді химиялық ғылымдар бойынша контентке адалдығымызды білдіреді.

НАН РК сообщает, что научный журнал «Известия НАН РК. Серия химии и технологий» был принят для индексирования в Emerging Sources Citation Index, обновленной версии Web of Science. Содержание в этом индексировании находится в стадии рассмотрения компанией Clarivate Analytics для дальнейшего принятия журнала в the Science Citation Index Expanded, the Social Sciences Citation Index и the Arts & Humanities Citation Index. Web of Science предлагает качество и глубину контента для исследователей, авторов, издателей и учреждений. Включение Известия НАН РК в Emerging Sources Citation Index демонстрирует нашу приверженность к наиболее актуальному и влиятельному контенту по химическим наукам для нашего сообщества.

Б а с р е д а к т о р ы
х.ғ.д., проф., ҚР ҰҒА академигі **М.Ж. Жұрынов**

Р е д а к ц и я а л қ а с ы:

Ағабеков В.Е. проф., академик (Белорус)
Волков С.В. проф., академик (Украина)
Воротынцев М.А. проф., академик (Ресей)
Газалиев А.М. проф., академик (Қазақстан)
Ергожин Е.Е. проф., академик (Қазақстан)
Жармағамбетова А.К. проф. (Қазақстан), бас ред. орынбасары
Жоробекова Ш.Ж. проф., академик (Қырғыстан)
Иткулова Ш.С. проф. (Қазақстан)
Манташян А.А. проф., академик (Армения)
Пралиев К.Д. проф., академик (Қазақстан)
Баешов А.Б. проф., академик (Қазақстан)
Бүркітбаев М.М. проф., академик (Қазақстан)
Джусипбеков У.Ж. проф. корр.-мүшесі (Қазақстан)
Молдахметов М.З. проф., академик (Қазақстан)
Мансуров З.А. проф. (Қазақстан)
Наурызбаев М.К. проф. (Қазақстан)
Рудик В. проф., академик (Молдова)
Рахимов К.Д. проф. академик (Қазақстан)
Стрельцов Е. проф. (Белорус)
Тәшімов Л.Т. проф., академик (Қазақстан)
Тодераш И. проф., академик (Молдова)
Халиков Д.Х. проф., академик (Тәжікстан)
Фарзалиев В. проф., академик (Әзірбайжан)

«ҚР ҰҒА Хабарлары. Химия және технология сериясы».

ISSN 2518-1491 (Online),

ISSN 2224-5286 (Print)

Меншіктенуші: «Қазақстан Республикасының Ұлттық ғылым академиясы» Республикалық қоғамдық бірлестігі (Алматы қ.)

Қазақстан республикасының Мәдениет пен ақпарат министрлігінің Ақпарат және мұрағат комитетінде 30.04.2010 ж. берілген №1089-Ж мерзімдік басылым тіркеуіне қойылу туралы куәлік

Мерзімділігі: жылына 6 рет.

Тиражы: 300 дана.

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

© Қазақстан Республикасының Ұлттық ғылым академиясы, 2018

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

Г л а в н ы й р е д а к т о р
д.х.н., проф., академик НАН РК **М. Ж. Журинов**

Р е д а к ц и о н н а я к о л л е г и я:

Агабеков В.Е. проф., академик (Беларусь)
Волков С.В. проф., академик (Украина)
Воротынцев М.А. проф., академик (Россия)
Газалиев А.М. проф., академик (Казахстан)
Ергожин Е.Е. проф., академик (Казахстан)
Жармагамбетова А.К. проф. (Казахстан), зам. гл. ред.
Жоробекова Ш.Ж. проф., академик (Кыргызстан)
Иткулова Ш.С. проф. (Казахстан)
Манташян А.А. проф., академик (Армения)
Пралиев К.Д. проф., академик (Казахстан)
Баешов А.Б. проф., академик (Казахстан)
Буркитбаев М.М. проф., академик (Казахстан)
Джусипбеков У.Ж. проф. чл.-корр. (Казахстан)
Мулдахметов М.З. проф., академик (Казахстан)
Мансуров З.А. проф. (Казахстан)
Наурызбаев М.К. проф. (Казахстан)
Рудик В. проф., академик (Молдова)
Рахимов К.Д. проф. академик (Казахстан)
Стрельцов Е. проф. (Беларусь)
Ташимов Л.Т. проф., академик (Казахстан)
Тодераш И. проф., академик (Молдова)
Халиков Д.Х. проф., академик (Гаджикистан)
Фарзалиев В. проф., академик (Азербайджан)

«Известия НАН РК. Серия химии и технологии».

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 и архивов Министерства культуры и информации Республики Казахстан №10893-Ж, выданное 30.04.2010 г.

Периодичность: 6 раз в год

Тираж: 300 экземпляров

Адрес редакции: 050010, г. Алматы, ул. Шевченко, 28, ком. 219, 220, тел. 272-13-19, 272-13-18,
<http://nauka-nanrk.kz / chemistry-technology.kz>

© Национальная академия наук Республики Казахстан, 2018

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

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

E d i t o r i n c h i e f

doctor of chemistry, professor, academician of NAS RK **M.Zh. Zhurinov**

E d i t o r i a l b o a r d :

Agabekov V.Ye. prof., academician (Belarus)
Volkov S.V. prof., academician (Ukraine)
Vorotyntsev M.A. prof., academician (Russia)
Gazaliyev A.M. prof., academician (Kazakhstan)
Yergozhin Ye.Ye. prof., academician (Kazakhstan)
Zharmagambetova A.K. prof. (Kazakhstan), deputy editor in chief
Zhorobekova Sh.Zh. prof., academician (Kyrgyzstan)
Itkulova Sh.S. prof. (Kazakhstan)
Mantashyan A.A. prof., academician (Armenia)
Praliyev K.D. prof., academician (Kazakhstan)
Bayeshov A.B. prof., academician (Kazakhstan)
Burkitbayev M.M. prof., academician (Kazakhstan)
Dzhusipbekov U.Zh. prof., corr. member (Kazakhstan)
Muldakhmetov M.Z. prof., academician (Kazakhstan)
Mansurov Z.A. prof. (Kazakhstan)
Nauryzbayev M.K. prof. (Kazakhstan)
Rudik V. prof., academician (Moldova)
Rakhimov K.D. prof., academician (Kazakhstan)
Streltsov Ye. prof. (Belarus)
Tashimov L.T. prof., academician (Kazakhstan)
Toderash I. prof., academician (Moldova)
Khalikov D.Kh. prof., academician (Tadjikistan)
Farzaliyev V. prof., academician (Azerbaijan)

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 periodic printed publication in the Committee of Information and Archives of the Ministry of Culture and Information of the Republic of Kazakhstan N 10893-Ж, issued 30.04.2010

Periodicity: 6 times a year

Circulation: 300 copies

Editorial address: 28, Shevchenko str., of. 219, 220, Almaty, 050010, tel. 272-13-19, 272-13-18,
<http://nauka-nanrk.kz/chemistry-technology.kz>

© National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan, 2018

Editorial address: Institute of Organic Catalysis and Electrochemistry named after D. V. Sokolsky
142, Kunayev str., of. 310, Almaty, 050100, tel. 291-62-80, fax 291-57-22,
e-mail: orgcat@nursat.kz

Address of printing house: ST "Aruna", 75, Muratbayev str, Almaty

NEWS

OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF THE REPUBLIC OF KAZAKHSTAN

SERIES CHEMISTRY AND TECHNOLOGY

ISSN 2224-5286

<https://doi.org/10.32014/2018.2518-1491.37>

Volume 6, Number 432 (2018), 150 – 155

UDC 533.6:519.6

**B.Kh. Khusain, K.K. Vinnikova,
A.S. Sass, K.S. Rakhmetova, N.R. Kenzin**

¹D.V.Sokolskiy Institute of Fuel, Catalysis and Electrochemistry JSC, Almaty, Kazakhstan
E-mail: bolatbekh@mail.ru

AERODYNAMIC MODELING OF EMISSIONS PASSAGE IN THE NEUTRALIZATION PROCESS

Abstract. This paper discusses an approach to analyzing the aerodynamics of a catalytic converter body using the Boltzmann lattice method and cellular automata. The LBM (Lattice Boltzmann Method) method is based on discretization of the Boltzmann kinetic equation, which at the microscopic level corresponds to the diluted gas model (particle model), and at the macroscopic level asymptotically goes to the Navier-Stokes equation for liquids and gases. Numerical approximation is carried out on the basis of the standard Batnagar-Gross-Kruk model.

Key words: aerodynamics, lattice Boltzmann method, numerical simulation, neutralizer.

1. Introduction

Recently, the Boltzmann lattice method has begun to gain popularity among problems in the field of fluid dynamics [1-3], as well as special cases in modeling multiphase, multicomponent and porous media [4-6]. The main advantages of the method in comparison with standard algorithms for the numerical solution of CFD problems based on solving the Navier – Stokes equations by finite volume/element methods are the ease of implementation, good parallelization and high computation efficiency. Cellular automaton provides the ability to set simple rules for mixtures and phases, a small interdependence of calculations between the cells of the lattice, allowing unlimited scaling of the simulation area. The LBM (Lattice Boltzmann Method) method was developed in 1986 [7] as a result of attempts to optimize calculations for gas and liquids, it is relatively new. Modern models, able to operate stably at high speed can solve applied problems for aerodynamics, laws of quantum mechanical systems and shock waves.

2. Mathematical model

Numerical simulation of the gas transfer process is based on the Boltzmann kinetic equation. The main idea of Boltzmann is to represent the gas as interacting particles whose behavior can be described by the laws of classical mechanics. However, due very large number of particles, in practice, it is not possible. Boltzmann proposed a statistical formulation of the problem in which the state of the system under study can be described by some distribution function $f^{(N)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_N, t)$, where N is

a number of particles, \mathbf{x}_i and \mathbf{p}_i are coordinates and momentum of the i-th particle respectively. Consider the one-dimensional case. Let the probable number of molecules with coordinates in the interval $\mathbf{x} \pm d\mathbf{x}$ and momentum in the interval $\mathbf{p} \pm d\mathbf{p}$ be defined as $f^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) d\mathbf{x} d\mathbf{p}$. Suppose that we have added some external force \mathbf{F} , which has a small magnitude in comparison with intermolecular forces. In case of the absence of collisions between molecules, the new positions of the molecules traveling from \mathbf{x} at time $t + dt$ will be equal to $\mathbf{x} = \mathbf{x} + \mathbf{v}dt = \mathbf{x} + (\mathbf{p} / m)dt = \mathbf{x} + d\mathbf{x}$, and the new impulses will be $\mathbf{p} = \mathbf{p} + \mathbf{F}dt = \mathbf{p} + (d\mathbf{p}/dt)dt = \mathbf{p} + d\mathbf{p}$.

Therefore, if the positions and pulses at time t are known, their increments allow us to determine the value of $f^{(1)}$ at time $t + dt$:

$$f^{(1)}(\mathbf{x} + d\mathbf{x}, \mathbf{p} + d\mathbf{p}, t = dt)d\mathbf{x}d\mathbf{p} = f^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t)d\mathbf{x}d\mathbf{p} \quad (1)$$

Relation (1) describes the motion of particles without collisions. Collisions are taken into account by using the BGK model (Bhatnagar – Gross – Krook) - a classic choice among problems of physics:

$$f^{(1)}(\mathbf{x} + d\mathbf{x}, \mathbf{p} + d\mathbf{p}, t = dt)d\mathbf{x}d\mathbf{p} = f^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t)d\mathbf{x}d\mathbf{p} + [\Gamma^{(+)} - \Gamma^{(-)}]d\mathbf{x}d\mathbf{p}dt \quad (2)$$

Here, the value of $\Gamma^{(-)}d\mathbf{x}d\mathbf{p}dt$ is equal to the number of molecules that did not arrive at the expected point of space with the coordinates $\mathbf{x} + d\mathbf{x}$ and momentum $\mathbf{p} + d\mathbf{p}$ due to collisions that occurred during time dt . The value of $\Gamma^{(+)}d\mathbf{x}d\mathbf{p}dt$ is equal to the number of molecules that began to move from points other than $\mathbf{x} + d\mathbf{x}$, but turned out to be in the region of space we are interested in due to collisions that occurred during time dt .

3. Boundary conditions

Usually during modeling the flow in channels or pipes using the LBM method, the channel walls are treated as a rigid boundary, from which particles are reflected, while periodic boundary conditions are applied to open channel sections [8].

In this case, the problem also has both types of boundary conditions. The computational domain (Fig. 1) consists of three boundaries - input, output and the rigid walls of the neutralizer. Reflection of particles will occur in a collision with the walls of the housing and the honeycombs of catalyst.

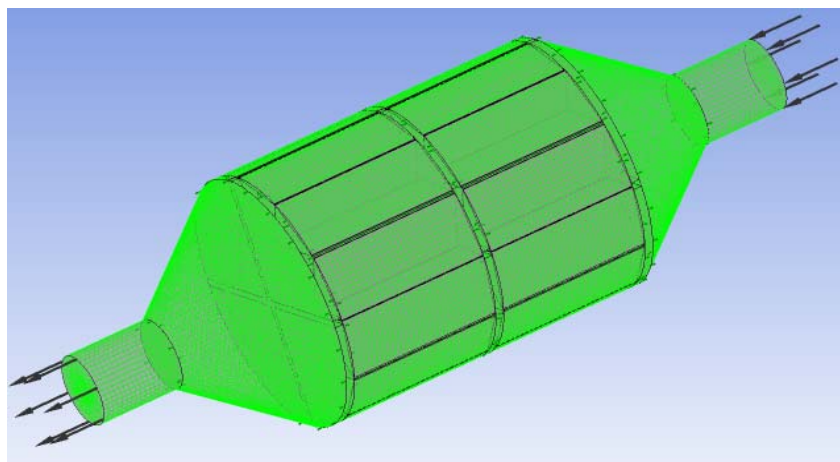


Figure 1 – Computational domain of the problem, catalytic converter housing

4. Numerical method

The method of lattice Boltzmann equations represents as a simplified implementation of the original Boltzmann idea through discretization of the equations. As a result, the number of particles, their possible velocities and positions in space is reduced. A uniform spatial grid called the Boltzmann lattice is built. Time is also discretized. Particles can be located only in the nodes of grid, the velocity of each particle can take a limited number of values, enough to reach the neighboring node during one time. Fig. 2 shows the lattice and directions of velocities \mathbf{e}_a , where $a = \overline{0,8}$ is an index of the direction (at $\mathbf{e}_0 = 0$ particles are at rest).

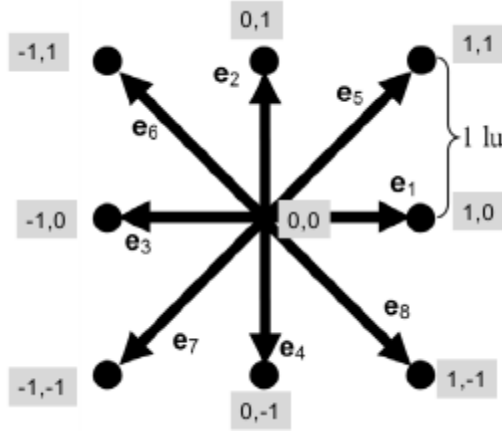


Figure 2 — Velocity components in D2Q9 model (2-dimensional with 9 velocity values)

The magnitude of the velocities $\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_4$ is 1 lattice unit in 1 time step, i.e. $lu \cdot ts^{-1}$. The magnitude of the velocities $\mathbf{e}_5, \dots, \mathbf{e}_8$ is $\sqrt{2} lu \cdot ts^{-1}$. Such choice of velocities is very convenient, since all their x- and y-components have values 0, 1 or -1 (Fig. 2). The value of f_a determines the number of particles in a given node moving in the \mathbf{e}_a direction. The macroscopic density of gas in a given node is the sum of particles moving from a given node in all possible directions:

$$\rho = \sum_{a=0}^8 f_a$$

In the simplest case the mass of all particles is the same and equal to one. The macroscopic velocity \mathbf{u} is the average of the microscopic velocities \mathbf{e}_a multiplied by the number of particles moving in a certain direction f_a :

$$\mathbf{u} = \frac{1}{\rho} \sum_{a=0}^8 \mathbf{e}_a f_a$$

In the LBM representation, equation (2) will be:

$$f_a(\mathbf{x} + \mathbf{e}_a \Delta t, t + \Delta t) = f_a(\mathbf{x}, t) + \Omega_a(\mathbf{x}, t)$$

The term $\Omega_a(\mathbf{x}, t)$ describes the collision of particles. The authors of the model, Batnagar, Gross and Crook, suggested that if particles move without collisions, the system is in equilibrium. Any collision brings the system out of equilibrium. Then the iteration of the cellular automaton operating according to the LBM method will look as follows:

$$f_a(\mathbf{x} + \mathbf{e}_a \Delta t, t + \Delta t) = f_a(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau} [f_a(\mathbf{x}, t) - f_a^{eq}(\mathbf{x}, t)],$$

Where $f_a^{eq}(\mathbf{x}, t)$ is an equilibrium function given by the formula:

$$f_a^{eq}(\mathbf{x}, t) = w_a \rho(\mathbf{x}) \left[1 + 3 \frac{\mathbf{e}_a \cdot \mathbf{u}}{c^2} + \frac{9 (\mathbf{e}_a \cdot \mathbf{u})^2}{2 c^4} - \frac{3 \mathbf{u}^2}{2 c^2} \right],$$

Where weight w_a for particle at rest ($a = 0$) is equal to 4/9, for $a = 1, 2, 3, 4$ is 1/9 and for $a = 5, 6, 7, 8$ w_a is 1/36; c — the main velocity on lattice.

The model will qualitatively describe the flow at small values of the Mach number, and the kinematic viscosity depends on the relaxation time τ : $\nu = (\tau - 0.5)c^2 dt$.

5. Results

In order to calculate the numerical approximation, a software complex for the universal Windows platform was developed. The program calculates aerodynamics, regime and design parameters of the process of emissions passage through the catalytic converter. Basing on results, it builds the geometry of the converter housing. The realization is done in Python, C #, Java languages.

Figures 2 - 4 present the results of the calculation of the aerodynamic characteristics of a single-component single-phase flow in a neutralizer with an optimal configuration and composition [9] at different incoming gas velocities.

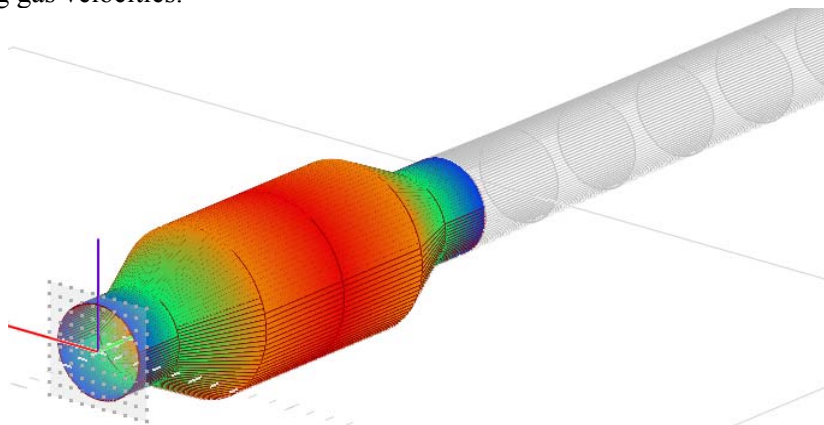


Figure 3 – Calculation at V=100 m/s

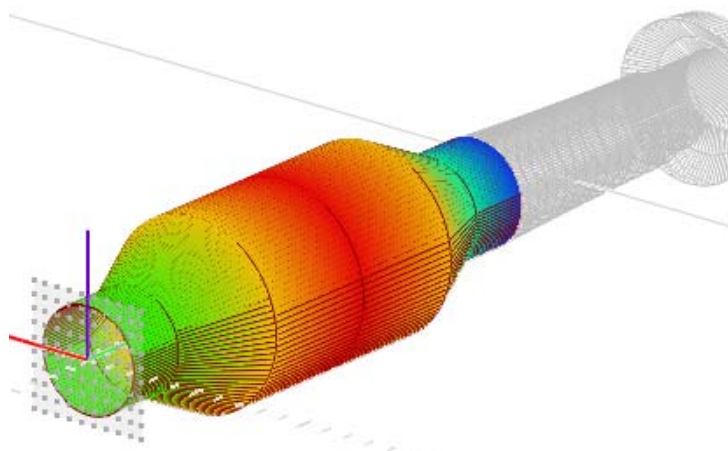


Figure 4 – Calculation at V=10 m/s

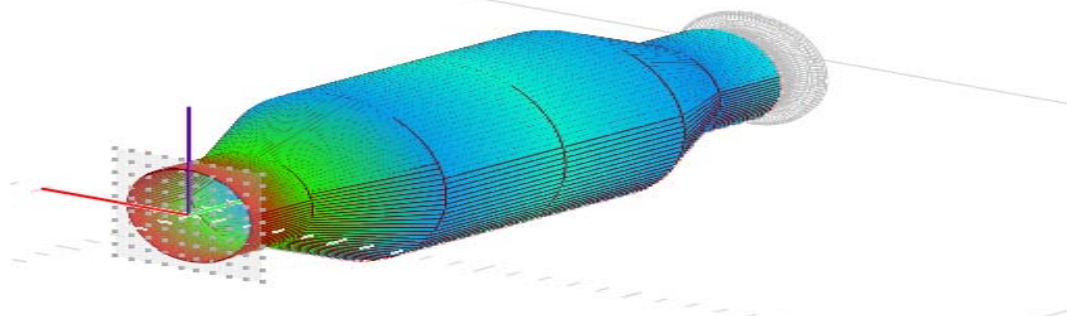


Figure 5 – Calculation at V=1 m/s

6. Conclusions

The developed software complex for modeling the passage of emissions in the neutralization process, based on LMB method, has two key qualities - high speed of calculations, and the ability to model problems with complex boundary conditions. In this case, the complexity of the geometry lies in the structure of honeycomb catalyst, the main element of the catalytic converter. The lattice Boltzmann method and cellular automata allow one to simulate the gas dynamics using simple arithmetic expressions. The statistical approach to the numerical analysis of gas motion simplifies mathematical apparatus, thereby reducing the amount of computational costs. This mathematical model allows making modifications and subsequent additions, which will take into account the chemical composition and temperature [10-11] of waste gases in neutralizer.

The work was carried out with the financial support of the State Institution "Committee of Science of the Ministry of Education and Science of the Republic of Kazakhstan" under project No. AR05131076 under agreement No. 173 of March 15, 2018

REFERENCES

- [1] Tyrinov A. I., Avramenko A.A., Basok B.I., Davydenko B.V. Modelirovanie mikrotechenij metodom reshetok Bol'cmana // NAN UKRAINY. Promyshlennaja teplotehnika, 2011, t.33, №2. – S. 11-19.
- [2] Ostapenko A.A. Modelirovanie techenij vjazkoj zhidkosti metodom reshetok Bol'cmana // Aktual'nye napravlenija nauchnyh issledovanij XXI veka: teoriya i praktika. T.2, № 5-1 (10-1). – Voronezh: 2014.– S.236-238. <https://doi.org/10.12737/6393>
- [3] Jeffrey D. Brewster (2007) Lattice-Boltzmann Simulations of Three-Dimensional Fluid Flow on a Desktop Computer. Analytical Chemistry 79 (7): 2965–2971. DOI: 10.1021/ac062178v
- [4] Kupershtoh A. L. Trehmernoe modelirovanie dvuhfaznyh sistem tipa zhidkost'-par metodom reshetochnyh uravnenij Bol'cmana na GPU // Vychislitel'nye metody i programmirovaniye: novye vychislitel'nye tehnologii. T.13 № 1. – M.:2012. – S.130-138. eISSN: 1726-3522
- [5] Xiaoyi He, Shiyi Chen, Raoyang Zhang, (1999) A Lattice Boltzmann Scheme for Incompressible Multiphase Flow and Its Application in Simulation of Rayleigh–Taylor Instability. Elsevier, Journal of Computational Physics Volume 152, Issue 2: 642-663. <https://doi.org/10.1006/jcph.1999.6257>
- [6] Xiaowen Shan, Hudong Chen, (1993) Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components. Physical Review E Vol. 47, Iss. 3. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.47.1815>
- [7] Kadanoff L. (1986) On two levels. Physics Today 39: 7-9. <https://doi.org/10.1063/1.2815134>
- [8] Jonas Latt, Bastien Chopard, Orestis Malaspinas, Michel Deville, Andreas Michler, (2008) Straight velocity boundaries in the lattice Boltzmann method. Phys. Rev. E (Vol. 77, Iss. 5). <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.77.056703F>
- [9]
- [10][8] L.R. Sassykova, Sh.A. Gil'mundinov, A.T. Massenova, Zh.A. Akimbaeva, M.D. Gasparyan, M.K. Kalykhberyev, M.s. Nurakhmetova, V.N. Grunskii, N.R. Kenzin (2016) Catalysis on metal and ceramic carriers for neutralization of waste gases of industry and motor transport. News of the Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan. Series Chemistry and Technology 2, 416: 135-144. ISSN 2224-5286 <https://doi.org/10.32014/2018.2518-1491>
- [9] G. Barrios, R. Rechtman, J. Rojas, R. Tovar, (2005) The lattice Boltzmann equation for natural convection in a two-dimensional cavity with a partially heated wall. Journal of Fluid Mechanics, Volume 522: 91-100. <https://doi.org/10.1017/S0022112004001983>
- [10] Shiyi Chen, Gary D. Doolen, (1998) Lattice Boltzmann method for fluid flows. Annual Reviews. Fluid Mechanics. 1998: 329-364.

УДК 533.6:519.6

Б.Х. Хусаин¹, К.К. Винникова¹, А.С. Сасс¹, К.С. Рахметова¹, Н.Р. Кензин¹

¹Д.В. Сокольский атындағы жанармай, катализ және электрохимия институты, Алматы, Қазақстан

БЕЙТАРАПТАНДЫРУ ПРОЦЕСТЕГІ ПАЙДАЛАНЫЛҒАН ГАЗДАР ШЫҒУДЫҢ АЭРОДИНАМИКАЛЫҚ МОДЕЛЬДЕУ

Аннотация. Бұл мақалада каталитикалық түрлендіргіш корпусының аэродинамикасын Больцмандық торлы әдіспен және ұялы автомат арқылы талдау әдісі қарастырылады. LBM (Lattice Boltzmann Method) әдісі микроскопиялық деңгейде сұйылтылған газ үлгілеріне (бөлшектердің моделі) сәйкес келетін және сұйықтар мен газдарға арналған Навье-Стокс теңдеуіне бара-бар макрокопиялық деңгейде Больцмандық кинетикалық

теңдеуді дискретизациялауға негізделген. Сандық жақындау стандартты Батнагар-Гросс-Крук моделінің негізінде жүргізіледі.

Түйін сөздер: аэродинамика, Больцмандық торлы әдіс, сандық модельдеу, нейтрализатор.

УДК 533.6:519.6

Б.Х. Хусаин¹, К.К. Винникова¹, А.С. Сасс¹, К.С. Рахметова¹, Н.Р. Кензин¹

¹АО «Институт топлива, катализа и электрохимии им. Д.В.Сокольского», Алматы, Казахстан

АЭРОДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОХОЖДЕНИЯ ВЫБРОСОВ В ПРОЦЕССЕ НЕЙТРАЛИЗАЦИИ

Аннотация. В данной работе рассматривается подход к анализу аэродинамики корпуса каталитического нейтрализатора с применением решёточного метода Больцмана и клеточных автоматов. Метод LBM (Lattice Boltzmann Method) основан на дискретизации кинетического уравнения Больцмана, которое на микроскопическом уровне соответствует модели разреженных газов (модель частиц), а на макроскопическом уровне асимптотически переходит к уравнению Навье-Стокса для жидкостей и газов. Численное приближение осуществляется на основе стандартной модели [Батнагара-Гросса-Крука](#).

Ключевые слова: аэродинамика, решеточный метод Больцмана, численное моделирование, нейтрализатор.

Information about the authors:

B.Kh. Khusain - Candidate of Technical Sciences, researcher of “D.V.Sokolskiy Institute of Fuel, Catalysis and Electrochemistry” JSC, project supervisor, Almaty, Kazakhstan, e-mail: bolatbekh@mail.ru;

A.S. Sass - Candidate of Chemical Sciences, researcher of “D.V.Sokolskiy Institute of Fuel, Catalysis and Electrochemistry” JSC, Almaty, Kazakhstan, e-mail: aleksandr-sass@mail.ru;

N.R. Kenzin - Master Degree of Biotechnology, researcher of “D.V.Sokolskiy Institute of Fuel, Catalysis and Electrochemistry” JSC, Almaty, Kazakhstan, e-mail: nailkenz@gmail.com;

K.S. Rakhmetova - Master Degree of Technics and Technologies, researcher of “D.V.Sokolskiy Institute of Fuel, Catalysis and Electrochemistry” JSC, Almaty, Kazakhstan, e-mail: rahmetova_75@mail.ru;

K.K. Vinnikova – Master Degree Student of the 2nd academic year for the specialty of 6M070500 - "Mathematical and computer modeling", the Department of Mathematical and computer modeling, Al-Farabi Kazakh National University, junior researcher of “D.V.Sokolskiy Institute of Fuel, Catalysis and Electrochemistry” JSC, Almaty, Kazakhstan, e-mail: kseniayvinnikova@hotmail.com.

МАЗМҰНЫ

<i>Тунгатарова С.А., Ксандопуло Г., Кауменова Г.Н., Жумабек М., Байжуманова Т.С., Григорьева В.П., Комашко Л.В., Бегимова Г.У.</i> Метанды синтез газға каталитикалық риформингілеуде жану әдісімен композитті материалдарды жасау...6	
<i>Johann Dieck, Tamaeva P., Байманова А., Бакешова Ж., Капсалямов Б.</i> Ақаба суларды биологиялық өңдеу: теориялық негіздері және эксперименттік зерттеулер.....	16
<i>Орымбетова Г.Э., Conficoni D., Касымова М.К., Кобжасарова З.И., Орымбетов Э.М., Шамбулова Г.Д.</i> Сүт және сүт өнімдерінде қорғасын тәуекелін бағалау.....	23
<i>Талғатов Э.Т., Әуезханова А.С., Тумабаев Н.Ж., Ахметова С.Н., Сейтқалиева Қ.С., Бегмат Е.Ә., Жармағамбетова Ә.Қ.</i> Фенилацетиленді гидрлеуге арналған магнитті тасымалдағышқа отырғызылған полимер-палладий катализаторлары	29
<i>Ермағамбет Б.Т., Ремнев Г.Е., Мартемьянов С.М., Бухаркин А.А., Касенова Ж.М., Нурғалиев Н.У.</i> Майқұбы және Экібастұз көмір бассейндерінің диэлектрикалық қасиеттері.....	38
<i>Бейсенбаев А.Р., Жабаева А.Н., Сунцова Л.П., Душкин А.В., Адекенов С.М.</i> Оксима пиностробинның супрамолекулярлық кешенін синтездеу мен зерттеу.....	46
<i>Jadhav A. S., Mohanraj G. T., Mayadevi S., Gokarn A. N.</i> Йодты адсорбцияның саны бойынша катеху атты жаңғақтың қабығынан алынатын нано-беттік белсендірілген көмірдің көлемін анықтаудың жылдам әдісі.....	53
<i>Нуркенов О.А., Фазылов С.Д., Исаева А.Ж., Сейлханов Т.М., Животова Т.С., Шұлғау З.Т., Қожина Ж.М.</i> Функционалдық-орынбасылған изоникотин қышқылының гидразондары мен циклодекстриндердің комплекстік кешендері жән.....	57
<i>Ермағамбет Б.Т., Нурғалиев Н.У., Абылгазина Л.Д., Маслов Н.А., Касенова Ж.М., Касенов Б.К.</i> Көмір шлак қалдықтарының өнімдерінен бағалы компоненттер алуудың әдістері.....	67
<i>Шоманова Ж.К., Сафаров Р.З., Жумаканова А.С., Носенко Ю.Г., Жанибекова А.Т., Шапекова Н.Л., Лорант Д.</i> Феррокорытпаны өндеу қалдықтары негізінде алынған катализаторлар бетін электрондық микроскопия әдісімен зерттеу.....	79
<i>Баешов А., Гаишов Т.Э., Баешова А.К., Колесников А.В.</i> Мыс (II) иондарын үш валентті титан иондарымен цементациялау арқылы нано – және ультрадисперсті мыс ұнтақтарын алу.....	87
<i>Баешов А.Б., Мырзабеков Б.Э., Колесников А.В.</i> Құрамында титан (IV) иондары бар күкірт қышқылы ерітіндісінде мыс анодын қолдану кезінде электролит көлемінде дисперсті мыс ұнтақтарының түзілу заңдылықтары.....	96
<i>Чиркун Д. И., Левданский А.Э., Голубев В.Г., Сарсенбекулы Д., Кумисбеков С.А.</i> Өнеркәсіптік барабанды диірмендер жұмысын сарапталау және оларды жетілдіру жолдары.....	102
<i>Бродский А.Р., Григорьева В.П., Комашко Л.В., Нурмаканов Е.Е., Чанышева И.С., Шаповалов А.А., Шлыгина И.А., Яскевич В.И.</i> Молекула зонды бар Fe/γ-Al ₂ O ₃ катализдік жүйенің өзара әрекеттестігі I. γ-Al ₂ O ₃ және Fe/γ-Al ₂ O ₃ бастапқы жүйенің зерттелуі.....	109
<i>Бродский А.Р., Григорьева В.П., Комашко Л.В., Нурмаканов Е.Е., Чанышева И.С., Шаповалов А.А., Шлыгина И.А., Яскевич В.И.</i> Взаимодействие каталитической системы Fe/γ-Al ₂ O ₃ с молекулами-зондами II. Исследование носителя γ-Al ₂ O ₃ и системы Fe/γ-Al ₂ O ₃ после взаимодействия с водородом и аммиаком.....	120
<i>Доспаев М. М., Баешов А., Жумаканова А.С., Доспаев Д.М., Сыздықова Б.Б., Какенов К.С., Есенбаева Г.А.</i> Калий метасиликаты ертіндісінде мыс анодын поляризациялау кезіндегі нанодисперсті мыс силикаты ұнтағының түзілу механизм.....	130
<i>Надиоров К.С., Черкаев Г.В., Чихонадских Е.А., Маккаевева Н.А., Садырбаева А.С., Орымбетова Г.Э.</i> Екі отынды ііж кемелердің пайдаланылған газдарымен зиянды заттардың шығарылуының қоршаған ортаға және тұрғындар денсаулығына әсерін талдау	138
<i>Хусаин Б.Х., Винникова К.К., Сасс А.С., Рахметова К.С., Кензин Н.Р.</i> Бейтараптандыру процестегі пайдаланылған газдар шығудың аэродинамикалық модельдеу.....	150
<i>Утегенова Л.А., Нурлыбекова А.К., Хажиакбер Аиса, Жеңіс Ж.</i> Ақшыл сепкіл гүлөсімдігінің майда еритін құрамын зерттеу.....	156

СОДЕРЖАНИЕ

Тунгатарова С.А., Ксандопуло Г., Кауменова Г.Н., Жумабек М., Байжуманова Т.С., Григорьева В.П., Комашко Л.В., Бегимова Г.У. Разработка композитных материалов методом горения для каталитического риформинга метана в синтез-газ.....	6
Johann Duesck, Tатаева Р., Байманова А., Бакешова Ж., Капсалямов Б. Биологическая обработка сточных вод: теоретическая основа и экспериментальные исследования.....	16
Орымбетова Г.Э., Conficoni D., Касымова М.К., Кобжасарова З.И., Орымбетов Э.М., Шамбулова Г.Д. Оценка риска свинца в молоке и молочной продукции	23
Талгатов Э.Т., Ауезханова А.С., Тумабаев Н.Ж., Ахметова С.Н., Сейткалиева К.С., Бегмат Е.А., Жармагамбетова А.К. Полимер-палладиевые катализаторы на магнитном носителе для гидрирования фенилацетилена.....	29
Ермагамбет Б.Т., Ремнев Г.Е., Мартемьянов С.М., Бухаркин А.А., Касенова Ж.М., Нурғалиев Н.У. Диэлектрические свойства углей Майкубенского и Экибастузского бассейнов.....	38
Бейсенбаев А.Р., Жабаяева А.Н., Сунцова Л.П., Душкин А.В., Адекенов С.М. Синтез и изучение супрамолекулярного комплекса оксима пиностробина.....	46
Jadhav A. S., Mohanraj G. T., Mayadevi S., Gokarn A. N. Быстрый метод определения площади нано-поверхности активированного угля полученного из оболочки ореха катеху по числу адсорбции йода.....	53
Нуркенов О.А., Фазылов С.Д., Исаева А.Ж., Сейлханов Т.М., Животова Т.С., Шульгау З.Т., Кожина Ж.М. Комплексы включения функционально-замещенных гидразонов изоникотиновой кислоты с циклодекстринами и их антирадикальная активность.....	57
Ермагамбет Б.Т., Нурғалиев Н.У., Абылгазина Л.Д., Маслов Н.А., Касенова Ж.М., Касенов Б.К. Методы извлечения ценных компонентов из золошлаковых отходов углей.....	67
Шоманова Ж.К., Сафаров Р.З., Жумаканова А.С., Носенко Ю.Г., Жанибекова А.Т., Шапекова Н.Л., Лорант Д. Исследование методом электронной микроскопии поверхности катализаторов, полученных на основе отходов ферросплавного производства.....	79
Баешов А., Гаитов Т.Э., Баешова А.К., Колесников А.В. Получение нано- и ультрадисперсных порошков меди цементацией ионов меди (II) ионами трехвалентного титана	87
Баешов А.Б., Мырзабеков Б.Е., Колесников А.В. Закономерности образования дисперсных медных порошков в объеме электролита при использовании медного анода в растворе серной кислоты, содержащей ионы титана (IV)	96
Чиркун Д. И., Левданский А. Э., Голубев В.Г., Сарсенбекулы Д., Кумисбеков С.А. Анализ работы барабанных промышленных мельниц и пути их усовершенствования	102
Бродский А.Р., Григорьева В.П., Комашко Л.В., Нурмаканов Е.Е., Чанышева И.С., Шаповалов А.А., Шлыгина И.А., Яскевич В.И. Взаимодействие каталитической системы Fe/ γ -Al ₂ O ₃ с молекулами-зондами I. Исследование γ -Al ₂ O ₃ и исходной системы Fe/ γ -Al ₂ O ₃	109
Бродский А.Р., Григорьева В.П., Комашко Л.В., Нурмаканов Е.Е., Чанышева И.С., Шаповалов А.А., Шлыгина И.А., Яскевич В.И. Взаимодействие каталитической системы Fe/ γ -Al ₂ O ₃ с молекулами-зондами II. Исследование носителя γ -Al ₂ O ₃ и системы Fe/ γ -Al ₂ O ₃ после взаимодействия с водородом и аммиаком	120
Доспаев М. М., Баешов А., Жумаканова А.С., Доспаев Д.М., Сыздыкова Б.Б., Какенов К.С., Есенбаева Г.А. Механизм образования нанодисперсного порошка силиката меди в растворе метасиликата калия	130
Надилов К.С., Черкаев Г.В., Чихонадских Е.А., Маккаевеева Н.А., Садырбаева А.С., Орымбетова Г.Э. Анализ влияния выбросов вредных веществ с отработавшими газами судовых двухтопливных двс на окружающую среду и здоровье населения.....	138
Хусаин Б.Х., Винникова К.К., Сасс А.С., Рахметова К.С., Кензин Н.Р. Аэродинамическое моделирование прохождения выбросов в процессе нейтрализации.....	150
Утегенова Л.А., Нурлыбекова А.К., Хажиакбер Ауса, Жеңіс Ж. Исследование жирорастворимого состава рябчика Бледноцветного.....	156

CONTENTS

<i>Tungatarova S.A., Xanthopoulou G., Kaumenova G.N., Zhumabek M., Baizhumanova T.S., Grigorieva V.P., Komashko L.V., Begimova G.U.</i> Development of composite materials by combustion synthesis method for catalytic reforming of methane to synthesis gas.....	6
<i>Dueck Johann, Tatayeva R., Baymanova A., Bakeshova Zh., Kapsalyamov B.</i> Biological treatment of waste water: theoretical background and experimental research.....	16
<i>Orymbetova G.E., Conficoni D., Kassymova M.K., Kobzhasarova Z.I., Orymbetov E.M., Shambulova G.D.</i> Risk assessment of lead in milk and dairy products	23
<i>Talgatov. E.T., Auyezkhanova A.S., Tumabayev N.Z., Akhmetova S.N., Seitkaliyeva K.S., Begmat Y.A., Zharmagambetova A.K.</i> Polymer-palladium catalysts on magnetic support for hydrogenation of phenylacetylene.....	29
<i>Ermagambet B.T., Remnev G.E., Martemyanov S.M., Bukharkin A.A., Kasenova Zh.M., Nurgaliyev N.U.</i> Dielectric properties of the coals of Maykuben and Ekibastuz basins.....	38
<i>Beisenbayev A.R., Zhabayeva A.N., Suntsova L.P., Dushkin A.V., Adekenov S.M.</i> Synthesis and study of pinostrobin oxime supramolecular complexes.....	46
<i>Jadhav A. S., Mohanraj G. T., Mayadevi S., Gokarn A. N.</i> Rapid method for determination of nano surface area of arecanut shell derived activated carbon by iodine adsorption number.....	53
<i>Nurkenov O.A., Fazylov S.D., Issayeva A.Zh., Seilkhanov T.M., Zhivotova T.S., Shulgau Z.T., Kozhina Zh.M.</i> Complexes of inclusion of functionally-substituted hydrasons of isonicotic acid with cyclodextrines and their antiradical activity.....	57
<i>Yermagambet B.T., Nurgaliyev N.U., Abylgazina L.D., Maslov N.A., Kasenova Zh.M., Kasenov B.K.</i> Methods for extraction of valuable components from ash-and-slag coal wastes.....	67
<i>Shomanova Zh.K., Safarov R.Z., Zhumakanova A.S., Nosenko Yu.G., Zhanibekova A.T., Shapekova N.L., Lorant D.</i> Electron microscopy surface study of catalysts based on ferroalloy production waste.....	79
<i>Bayeshov A., Gaipov T.E., Bayeshova A.K., Kolesnikov A.V.</i> Synthesis of nano- and ultradisperse copper powders by cementation of copper (II) ions by three-valent titanium ions.....	87
<i>Bayeshov A.B., Myrzabekov B.E., Kolesnikov A.V.</i> Patterns of formation of dispersed copper powders in the body of electrolyte during the use of copper anode in sulfuric acid solution along with titanium (IV) ions.....	96
<i>Chyrkun D.I., Leudanski A.E., Golubev V.G., Sarsenbekuly D., Kumisbekov S.A.</i> Analysis of industrial drum mills' operation and ways of their improvement.....	102
<i>Brodskiy A.R., Grigor'eva V.P., Komashko L.V., Nurmakanov Y.Y., Chanysheva I.S., Shapovalov A.A., Shlygina I.A., Yaskevich V.I.</i> Interaction of the Fe/ γ -Al ₂ O ₃ catalytic system with probe molecules I. Research of the γ -Al ₂ O ₃ and the Fe/ γ -Al ₂ O ₃ initial system	109
<i>Brodskiy A.R., Grigor'eva V.P., Komashko L.V., Nurmakanov Y.Y., Chanysheva I.S., Shapovalov A.A., Shlygina I.A., Yaskevich V.I.</i> Interaction of the catalytic Fe/ γ -Al ₂ O ₃ system with probe molecules II. Study OF γ -Al ₂ O ₃ support and Fe/ γ -Al ₂ O ₃ system after interaction with hydrogen and ammonia.....	120
<i>Dospaev M.M., Bayeshov A., Zhumakanova A.S., Dospaev D.M., Syzdykova B.B., Kakenov K.S., Esenbaeva G.A.</i> Mechanism of forming nanodisperse copper silicate powder during anodic polzrization of copper electrode in potassium silicate solution.	130
<i>Nadirov K.S., Cherkaev G.V., Chikhonadskikh E.A., Makkaveeva N.A., Sadyrbaeva A.S., Orymbetova G.E.</i> Analysis of influence of emissions of harmful substances with exhaust gases of marine dual fuel internal combustion engine on the environment and human health.....	138
<i>Khusain B.Kh., Vinnikova K.K., Sass A.S., Rakhmetova K.S., Kenzin N.R.</i> Aerodynamic modeling of emissions passage in the neutralization process.....	150
<i>Utegenova L.A., Nurlybekova A.K., Hajiakber Aisa, Jenis J.</i> Liposoluble constituents of <i>Fritillaria pallidiflora</i>	156

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 сайте:

www.nauka-nanrk.kz

<http://www.chemistry-technology.kz/index.php/ru/>

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

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

Подписано в печать 05.12.2018.
Формат 60x881/8. Бумага офсетная. Печать – ризограф.
9,8 п.л. Тираж 300. Заказ 6.