

**ФОНД ПЕРВОГО ПРЕЗИДЕНТА РЕСПУБЛИКИ КАЗАХСТАН –
ЕЛБАСЫ**

СОВЕТ МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ



**ИННОВАЦИОННОЕ РАЗВИТИЕ И ВОСТРЕБОВАННОСТЬ
НАУКИ В СОВРЕМЕННОМ КАЗАХСТАНЕ**

XI Международная научная конференция

Сборник статей

(часть 1)

Естественно-технические науки

**Алматы
2017**

ОТВЕТСТВЕННЫЙ РЕДАКТОР:

КОРУЛЬКИН Д.Ю. – доктор химических наук, профессор кафедры органической химии и химии природных соединений КазНУ им. аль-Фараби

Инновационное развитие и востребованность науки в современном Казахстане: Сб. статей Межд. Науч. Конф. (г. Алматы, 23-24 ноября 2017 г.). – Алматы, 2017. – 185 с. Каз., рус.

Ч. 1: Естественно-технические науки. – 185 с.
ISBN 978-601-06-4760-2 (1 часть)

В настоящий сборник вошли материалы XI Международной научной конференции «Инновационное развитие и востребованность науки в современном Казахстане» (г.Алматы, 23-24 ноября 2017 г.).

Материалы предназначены для молодых ученых, исследователей, преподавателей, студентов, магистрантов, докторантов, интересующихся проблемами развития современного общества.

ISBN 978-601-06-4760-2 (1 часть)

ISBN 978-601-06-4759-6 (общ.)

СОДЕРЖАНИЕ

№	Название статьи	Стр.
<i>Секция физико-математических наук</i>		
1	А.Т.Жақаш, Н.Талайбекқызы, Э.А.Джакашова. Математический модель перехода к хаосу в системе Ресслера	8
2	А. Ескермесулы. Об индексах двучленного минимального дифференциального оператора четвертого порядка с колеблющимися коэффициентами	10
3	С.И.Ибадулла, К.К.Дауренбеков. Применение метода вариационного генетического программирования для решения задачи синтеза системы управления	13
4	В.Tuktubayev, S.Esengali. It is necessary to find the initial mass of the spacecraft that has conducted from low-reference orbit to geostationary orbit	16
5	М.С.Сарсембаев, Б.А.Урмашев. Разработка кинетического механизма горения метана с образованием оксидов азота и полиароматических молекул	19
6	М.М.Кунелбаев, Э.О.Куткельдиева. Определение угла наклона гелиоколлекторов	22
7	А.Жакупова, Ә.Есенов, Н.Айтбай. Жерді қашықтықтан зондтау антенналық жүйесін Нехарод көмегімен анализ жасау	25
8	Б.Т.Сазамбаева, А.Д.Жақаба. Тіректер. Шығарылған тіректермен жабдықталған теміржол крандары	27
9	Н.Талайбекқызы. Фитнес стельки	28
10	К.С.Шонгалова. Болашақ педагог мамандарды даярлауда ақпараттық технология мүмкіндіктерін пайдалану	30
11	Н. Жаркешов, Қ. Біләл, Н.Қ. Жакиев. Астана маңындағы жел параметрлерін статистикалық әдістермен бағалау	33
<i>Секция наук о Земле</i>		
12	К.О.Каршева, И.Г.Цой, К.О.Каршева, В.А.Максименко. Разработка экологически безопасного и экономически выгодного структурообразователя бесструктурных почв	38
13	А.Б.Базарбек, С.Картабаев, А.Ш.Омархан, Б.Жеңіс. Шағын ғарыш аппаратының электрмен жабдықтау жүйесі	40
14	M.U.Nurkassimova, A.K.Tashenov, N.M.Omarova, S.V.Morzuhina. Atmospheric depositions of heavy metals and radionuclides in Irtysh areas of Kazakhstan	44
<i>Секция химико-технологических наук</i>		
15	К.Н.Бажирова, З.Д.Толтебаева. Инновационные технологии для развития производства фосфорных удобрений в Республике Казахстан	48
16	Х.Р.Садиева, Д.Г.Балтабаева, А.Елеукен, Н.Толеген, Г. Рыспаева. Разложение фосфоритов Каратау минеральными кислотами и извлечение редкоземельных элементов из вторичных концентратов	50
17	E.Chernova, K.Karsheva. Problems of purification of phosphoric acid from the fluorine contaminants	54
18	Х.Р.Садиева, М.Ақылова, Д.Г.Балтабаева. Фторқұрамды заттарды қосып фторқұрамды резина қоспаларын алу әдісі	56
19	К.О.Каршева, Д.Б.Аралбаева, К.О.Каршева, В.А.Максименко. Определение ионов тяжелых металлов в водных растворах фотометрическим методом	59
20	А.В.Дехтяренко, С.Н.Тетерина. Сравнительная характеристика существующих методов очистки сточных вод от соединений азота	61
21	Х.Р.Садиева, А.Қ.Иманмусаева, Д.Г.Балтабаева. Возможность исполь-	64

$$M_F = \frac{\left(e^{\frac{V_\Sigma}{\omega}} - 1\right)(s - 1)}{s - e^{\frac{V_\Sigma}{\omega}}} \cdot M_{SC}^E = \frac{\left(e^{\frac{5325}{2900}} - 1\right)(10 - 1)}{10 - e^{\frac{5325}{2900}}} \cdot 1000 = 12732 \text{ кг.}$$

$$M_{RB} = \frac{s \cdot M_F}{s - 1} \approx 14147 \text{ кг.}$$

$$M_{SC}^I = M_{SC}^E + M_{RB} = 1000 + 14147 = 15147 \text{ кг}$$

Conclusion: all goals and conditions in article are satisfied. The initial mass of the spacecraft that turned from low-reference orbit to geostationary orbit is found. This article can be concluded like that: to change the orbit plane it is beneficial to give impulse to apogee of the spacecraft, because at this point the velocity of spacecraft is minimal and when spacecraft turns to geostationary orbit fuel size will be minimal too.

Bibliography

1. Белоконов И.В. Расчет баллистических характеристик движения космических аппаратов.- Самара: СГАУ. 1994.
2. Андреев, С.В. Баллистические ракеты.- Куйбышев: КуАИ. 1989.
3. Балабух, Л.И., Алфутов Н.А. Строительная механика ракет.- М.: ВШ, 1984.

РАЗРАБОТКА КИНЕТИЧЕСКОГО МЕХАНИЗМА ГОРЕНИЯ МЕТАНА С ОБРАЗОВАНИЕМ ОКСИДОВ АЗОТА И ПОЛИАРОМАТИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛ

М.С.Сарсембаев, Б.А.Урмашев

Казахский национальный университет имени аль-Фараби

Использование численных методов моделирования, ориентированных на применение суперкомпьютеров, значительно расширяет возможности математического моделирования, позволяя включить в модель факторы, не учитываемые ранее. Детальный анализ динамики горения топлив предполагает строгий учет всех физических процессов, в том числе процессов конвективного теплообмена между свежим газом и продуктами горения и конструктивными элементами оболочки [1, 2].

В данной работе численно моделируется распространения ламинарной предварительно перемешанной смеси, так как для эффективного образования пламени процесс распространения и перемешивания играет очень большую роль.

Цель исследования: создание прототипа облачной информационно-вычислительной системы для автоматизированной генерации химических моделей, описывающих горение реальных топлив с оценкой достоверности результатов моделирования.

Методы исследования: численный метод Рунге – Кутты 4–го и 5–го порядка, итерационные алгоритмы решения сеточных уравнений, методы априорных оценок, алгоритм распознавания данных, метод поиска данных.

Кинетические модели лежат в основе химии. Они позволяют химикам сделать обоснованные прогнозы для систем, имеющих практический интерес, основанные на результатах измерений, сделанных в сильно упрощенных лабораторных условиях.

Зависимость между скоростью реакции и его температуры определяется уравнением Аррениуса. Скорость большинства химических реакций растет с повышением температуры. Основное влияние температуры на скорость реакции осуществляется через изменение константы скорости реакции. Константа скоростей выражается в законе Аррениуса (1):

$$k = A * T^n * e^{\frac{E_a}{RT}} \quad (1)$$

Скорость реакции как основная характеристика химической кинетики зависит не только от концентрации (давления) частиц и температуры, но и от катализаторов, формы и размеров сосуда, материала и состояния стенок. Под скоростью реакций обычно понимают изменение количества вещества, вступающего в реакцию или образующегося в результате реакции, в единицу времени в единицу объема (2):

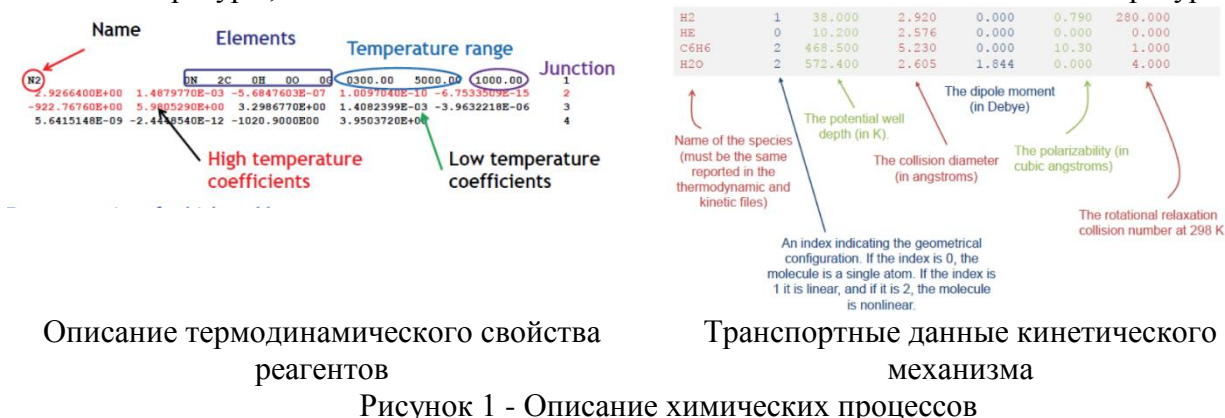
$$\omega = \pm \frac{1}{V} \frac{dn}{dt}, \quad (2)$$

где n - число молей (или молекул).

Детальные механизмы реакции описывают, как происходит реакция на молекулярном уровне, что связи разрываются или формируются и в каком порядке, и то, что относительно скорости этих шагов.

Термодинамические данные химических частиц сведены в таблицу в зависимости от температуры. Эти таблицы содержат значения термодинамических свойств на основе экспериментальных данных, дополненных теоретическими расчетами. В этой работе, большинство из термодинамических данных были обработаны из публикации [3].

Для каждой химической реакции определяется A - предэкспоненциальный множитель в уравнении Аррениуса (характеризует частоту столкновений реагирующих молекул), E_a - энергия активации. На рисунке 1 показан формат базы данных термодинамического свойства каждого реагента. Содержание этих данных совпадает с базой данных Sandia и не должны быть изменены. В термодинамическом свойстве механизма показывается данные такие как: имя реагента, элементы, диапазон температуры, переходная температура между высокой и низкой температуры, а также соответственные данные для высоких и низких температур.



Описание термодинамического свойства реагентов

Транспортные данные кинетического механизма

Рисунок 1 - Описание химических процессов

Важный составляющий компонент кинетического механизма горения транспортные свойства представлены на рисунке 1, где показано транспортные свойства, которые включают в себя данные: имя реагента (имя должно быть идентичным с именем реагента в термодинамическом файле), индекс, указывающий на геометрическую конфигурацию реагента, глубина потенциальной ямы, диаметр столкновения, дипольный момент.

Вероятно, наиболее популярным на сегодняшний день является механизм окисления метана, разработанный командой Университета Беркли (США), известный как механизм GRI-Mech. Механизм GRI-Mech был опубликован в нескольких электронных версиях [4], и создавался, в первую очередь, для описания горения метана и природного газа. Версия механизма GRI-Mech 3.0 2013 года состоит из 325 элементарных стадий и 53 компонентов, и применима в диапазоне температур от 1000 К до 1500 К, давлении от 1.0 до 1000 КПа и коэффициенте избытка топлива от 0.1 до 5. Однако некоторые специфические аспекты горения метана, такие как сажеобразование, данный механизм в нем не описывается. В связи с этим, исследования для существенного влияния на сгорания смеси и уменьшение выбросов оксидов азота и сажи концентрация водорода в метан-водородной смеси должна достичь 70% объема [1, 2].

Моделирование горения метана в воздухе было выполнено с помощью программного комплекса PrIME, механизм GRI-Mech который состоит из 309 реакции и 53 реагентов было выбрано из базы данных программы. Горение происходило в реакторе Plug Flow Reactor. Состав стехиометрической смеси: $\text{CH}_4=3.33\%$, $\text{O}_2=6.66\%$, $\text{N}_2=90\%$, с учетом что 1 моль = 100%. Начальная температура $T=1688\text{K}$ и давления $p=0,39\text{bar}$, а также время пребывания в реакторе $t=3\text{s}$. В следующем рисунке 2 можно увидеть результаты моделирования, образования углеводородов и расходования метана в зависимости от температуры.



Рисунок 2 – Результаты моделирования химических реагентов

Так же имеются другие загрязняющие вещества, которые образуются при процессе горения. Процесс образования NO_x зависит от скорости расходования в зоне реакции активных частиц и кислорода, и конкуренции этих процессов между собой. Но условия образования оксидов при горении до сих пор не разработаны и требуют глубокой проработки сложной химической кинетики процесса в сочетании с детальным изучением тепло-массо-обмена и его влияния на кинетику. В рисунке 3 показано образования окиси азота NO_x .

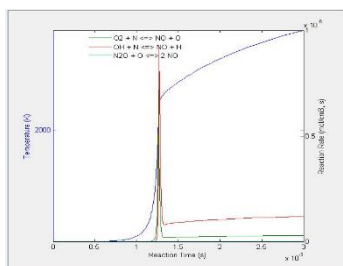


Рисунок 3 – Образование NO_x

В данный момент разработанный механизм горения метана с образованием NO_x тестируется и сравнивается с экспериментальными данными в Chemical Workbench 4.0.

Таким образом, разработан кинетический механизм горения метана с образованием оксидов азота и полиароматических молекул с прогнозируемой погрешностью моделирования процессов горения. Разработанный механизм представляет из себя GRI-Mech, с добавлением некоторых реакций, которые описывают горение ацетилена и образования окиси азота, так же некоторые реакции образования углеводородов (сажи). GRI-Mech механизм был выбран не случайно, так как он более точно и хорошо описывает горение метана (природного газа).

Литература

- 1 Варнатц Ю., Маас У. Горение физические и химические аспекты, моделирование, эксперименты, образование загрязняющих веществ. - М.: Физматлит, 2003. – С. 352.
- 2 Issakhov A. Large eddy simulation of turbulent mixing by using 3D decomposition method. Issue 4 // J. Phys.: Conf. Ser. 318. pp. 1282-1288. -2011..
- 3 Лопатин О. П. Химизм процесса образования оксидов азота в цилиндре газодизеля с турбонаддувом // Молодой ученый. - 2015.- №9.- С. 265-268.

4 Crina I. Heghes, Chem. Eng. “C1-C4 Hydrocarbon Oxidation Mechanism” Heidelberg, September 2006.