

**Ж. ЖАКСЫЛЫК¹, Л. М. МУСАБЕКОВА^{2*}, К. Е. АРЫСТАНБАЕВ²,
М. А. АМАНДИКОВ³, З. С. КОБЕЕВА⁴**

*Южно-Казахстанский университет имени М. Ауезова¹, г.Шымкент, Казахстан
Южно-Казахстанская медицинская академия², г. Шымкент, Казахстан
Университет Дружбы народов им. ак. А. Куатбекова³, г.Шымкент, Казахстан
Шымкентский Университет⁴, г.Шымкент, Казахстан*

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СВОРМИНГА С АГРЕГАЦИЕЙ ЧАСТИЦ В ДИСПЕРСНЫХ СИСТЕМАХ

В предыдущих работах проведен систематический анализ процессов сворминга, сопровождающихся агрегацией частиц с образованием кластеров высокого порядка в дисперсных потоках. В результате анализа было предложено рассматривать три основных механизма сворминга. Ранее подробно рассматривался только инерционный механизм. В представленной работе этот подход впервые адаптирован для моделирования сворминга по механизму притяжения в дисперсной системе с учетом процесса агрегации. Новизна исследования, своеобразие и оригинальность данной работы заключаются в том, что феномен сворминга, сопровождающегося агрегацией, возникающей под влиянием центров притяжения, моделируется с использованием специальной вероятностной схемы расчета, что позволяет предложить универсальный подход к моделированию привлекательного сворминга при различной физической природе взаимодействия. В статье представлены алгоритм, результаты численных экспериментов и дана их краткая интерпретация.

***Ключевые слова:** агрегация, аттракционный сворминг, кластеры, моделирование, дисперсные системы, стохастическая решетка.*

1. Введение. Характер привлекательного сворминга может быть самым разнообразным [1]. Это связано со сложностью самой концепции сворминга [2]. По сути, сворминг возникает как проявление явлений самоорганизации в сложных неравновесных системах [3,4]. В реальных физических системах привлекательный сворминг может возникать за счет притяжения частиц в дисперсной системе к определенным центрам [5] или локализованным в объеме областям притяжения [6]. Привлекательный сворминг также может быть вызван градиентом концентрации какого-либо вещества в области движения системы частиц [7]. В биологических системах [8] привлекательный сворминг может быть вызван движением в направлении скопления частиц или микроорганизмов [9].

В последнее время концепция сворминга также используется для описания явлений формирования сообществ в социальных науках и экономике [10]. В этом контексте концепция привлекательного сворминга представляется наиболее подходящей для целей формального математического описания явления [11].

2. Компьютерное моделирование. Алгоритм, используемый в этой работе для численного исследования привлекательного сворминга, является модификацией алгоритма, ранее предложенного в работе [12], и который раньше использовался для описания сворминга, вызванного неравномерным полем скоростей сплошной среды в аппарате. Процесс движения и агрегации частиц описывается с помощью методов случайного блуждания на стохастической решетке [13].

* E-mail корреспондирующего автора: mleyla@bk.ru

2.1. Описание концепции моделирования и алгоритма. Принципиальной особенностью модифицированного алгоритма является то, что влияние аттрактора на дрейф частиц описывается преобладанием вероятности перехода из данной ячейки в соседнюю с ней ячейку решетки, расположенную ближе к аттрактору. Идея алгоритма иллюстрируется на рисунке 1.



Рисунок 1 – Иллюстрация к описанию алгоритма случайного блуждания при наличии аттрактора на верхней стенке.

Для реализации простейшей модели ускорения частицы в направлении аттрактора по мере приближения к нему была предложена следующая схема выбора вероятностей дрейфа. Выбор идентификатора для расчета сдвига при ускорении, увеличивающемся при приближении к аттрактору, осуществляется путем случайного выбора из последовательности идентификаторов направления дрейфа (1 – вверх, 2 – вниз, 3 – вправо, 4 – влево, 5 – оставаться на месте). Эта последовательность формируется следующим образом: для любого элемента, расположенного в строке m , здесь m рассматривается сверху вниз – от аттрактора обычно считается номер строки матрицы. Поэтому для 1 берем $(M - m + p_0)$ раз; для 2, 3, 4 и 5 – p_0 раз для каждой цифры. Например, если $M = 20$, $m = 8$, $p_0 = 2$, то последовательность для выбора имеет вид: 111111111111122334455. Параметр p_0 играет роль управляющего параметра. К выбранному случайному дрейфу добавляется, как и прежде, сдвиг вправо на w клетки (w – скорость потока). При обработке экспериментальных данных по случайному дрейфу по-прежнему используется схема укрупнения сетки [14]. Для процесса агрегации частиц в настоящей работе был принят механизм диффузионно-ограниченной агрегации (ДОА) [12].

2.2. Результаты моделирования. При моделировании использовалась 2D схема. Расчеты были сделаны для $p_0 = 1, 2, 3$ и $w = 0, 2, 4$. Номинальная ширина реактора (количество строк в расчетной матрице) принята равной $M = 20$. Номинальная длина реактора (количество столбцов в расчетной матрице) принята равной $L = 200$. Приведены некоторые иллюстративные результаты моделирования на рисунках 2–7. Рисунки 2, 3, 4 и 5 соответствуют ситуации, когда в начальный момент реактор полностью заполнен, и каждая ячейка содержит ровно одну первичную частицу.

На рисунках 2-7 показана эволюция распределения кластеров по объему аппарата через различное количество расчетных временных интервалов dt . Видно, что наличие аттрактора приводит к быстрому перераспределению, в результате которого основное количество кластеров концентрируется в окрестности аттрактора. В то же время, результаты расчетов наглядно демонстрируют влияние аттрактора, распределенного

по верхней стенке, на формирование сворминга и ускорение агрегации частиц с образованием кластеров высокого порядка.

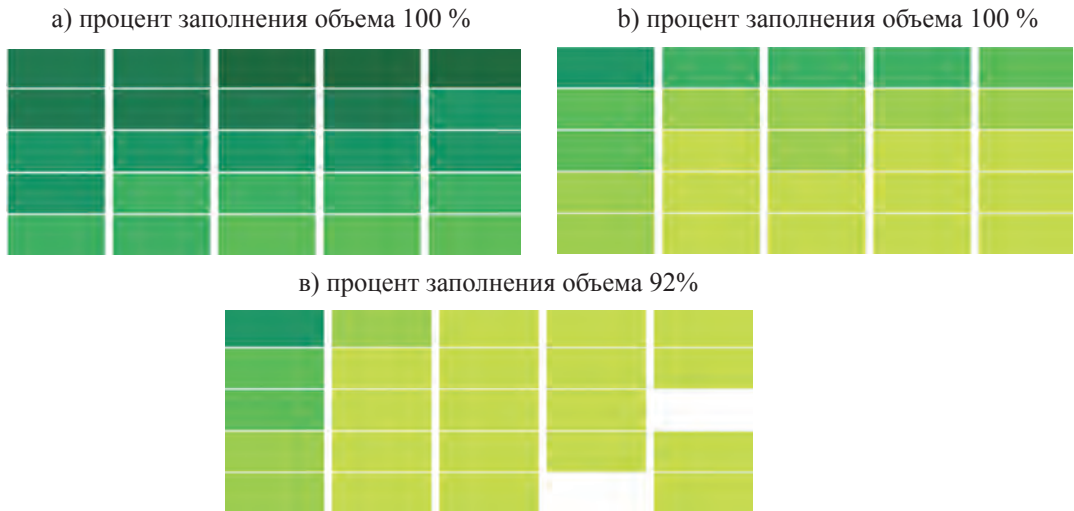


Рисунок 2 – Количество кластеров разного порядка в блоках. Размер матрицы 200 x 20, скорость потока $w = 2$, параметр $p_0 = 1$, начальное количество кластеров в каждой ячейке равно одному. Шаг по времени: а) $dt = 3$, б) $dt = 15$, в) $dt = 100$. Количество кластеров в блоке:

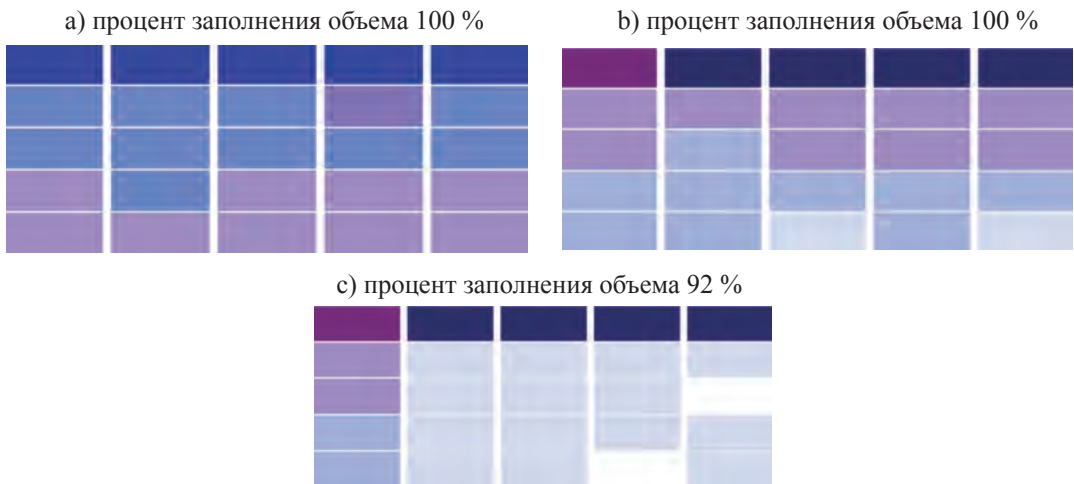
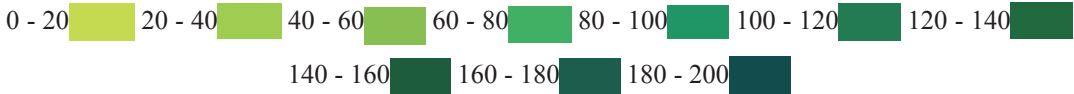
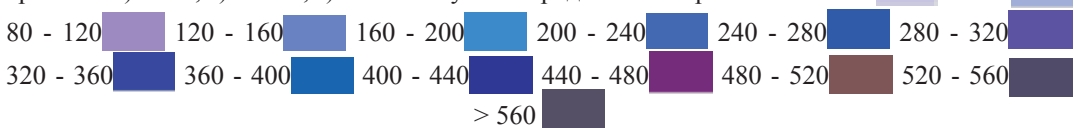


Рисунок 3 – Сумма порядков кластеров в блоках. Размер матрицы 200 x 20, условный расход $w = 2$, параметр $p_0 = 1$, начальное количество кластеров в каждой ячейке равно одному. Шаг по времени: а) $dt = 5$, б) $dt = 15$, в) $dt = 100$. Сумма порядков кластеров в блок: 0 - 40 (lightest purple) 40 - 80 (light purple) 80 - 120 (medium purple) 120 - 160 (darker purple) 160 - 200 (dark purple) 200 - 240 (very dark purple) 240 - 280 (darkest purple) 280 - 320 (black) 320 - 360 (black) 360 - 400 (black) 400 - 440 (black) 440 - 480 (black) 480 - 520 (black) 520 - 560 (black) > 560 (black)



При меньших скоростях потока в реакторе образование сворминга под действием аттрактора происходит быстрее на начальном участке реактора. В изначально пустом реакторе влияние аттрактора проявляется в более медленном заполнении реактора. Сворминг под действием аттрактора приводит к заметному ускорению диффузионно-ограниченной агрегации в реакторе. Анализ результатов расчетов позволяет выявить некоторые общие закономерности.

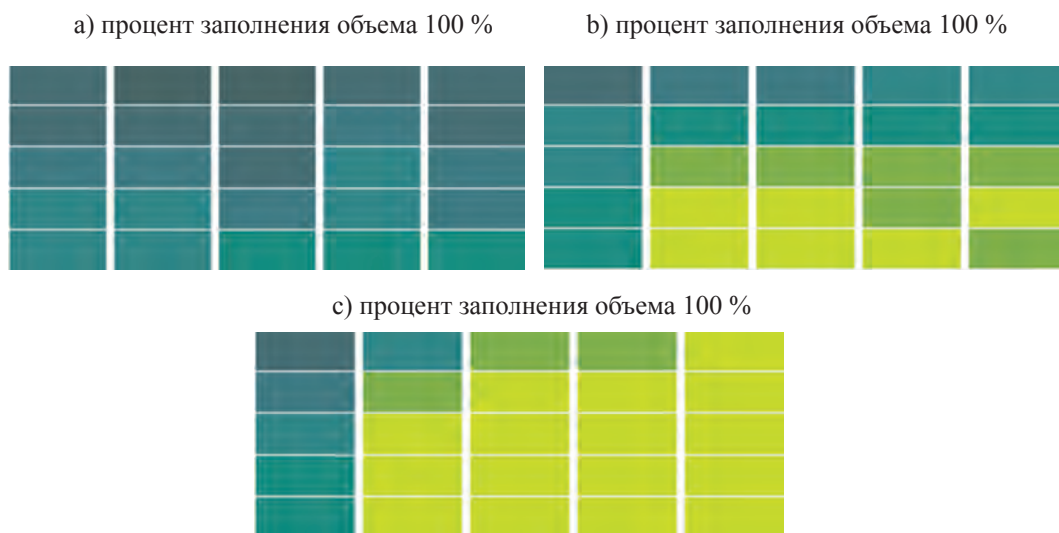


Рисунок 4 – Количество кластеров разного порядка в блоках. Размер матрицы 200×20 , скорость потока $w = 4$, параметр $p_0 = 1$, начальное количество кластеров в каждой ячейке равно одному. Шаг по времени: а) $dt = 3$, б) $dt = 8$, в) $dt = 50$

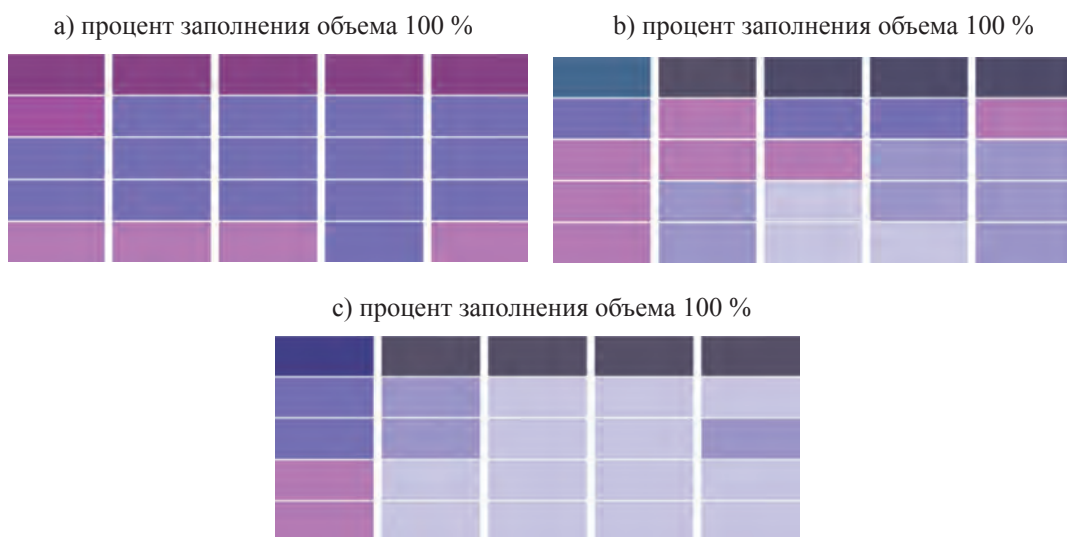


Рисунок 5 – Сумма порядков кластеров в блоках. Размер матрицы 200×20 , скорость потока $w = 4$, $p_0 = 1$, начальное количество кластеров в каждой ячейке равно одному. Шаг по времени: а) $dt = 3$, б) $dt = 8$, в) $dt = 50$

Рисунки 6 и 7 соответствуют ситуации, когда в начальный момент реактор пуст, т.е. в ячейках нет первичных частиц.

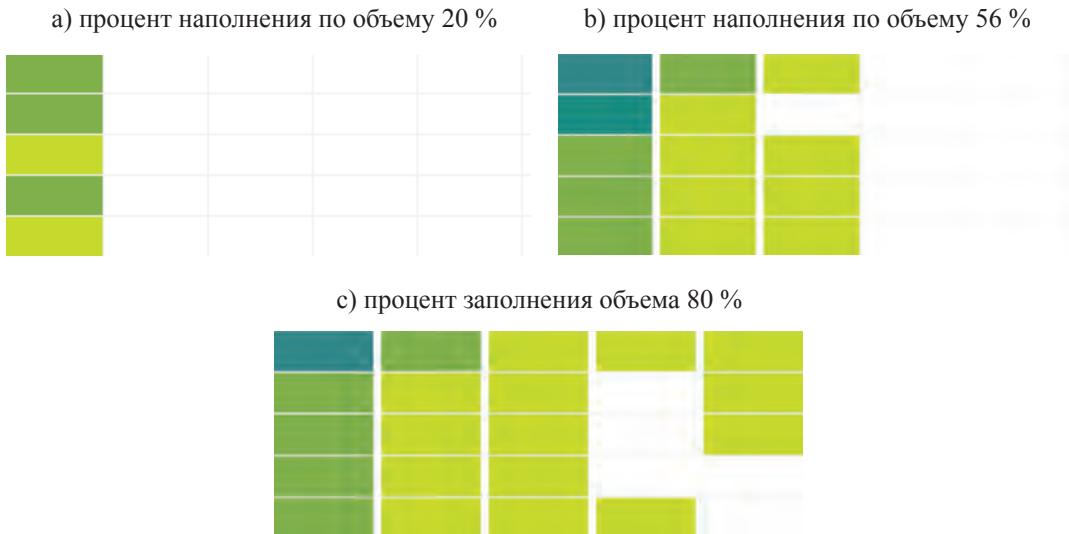


Рисунок 6 – Количество кластеров разного порядка в блоках. Размер матрицы 200×20 , скорость потока $w = 2$, $p_0 = 3$, начальное количество кластеров в каждой ячейке равно нулю. Шаг по времени: а) $dt = 5$, б) $dt = 50$, в) $dt = 100$

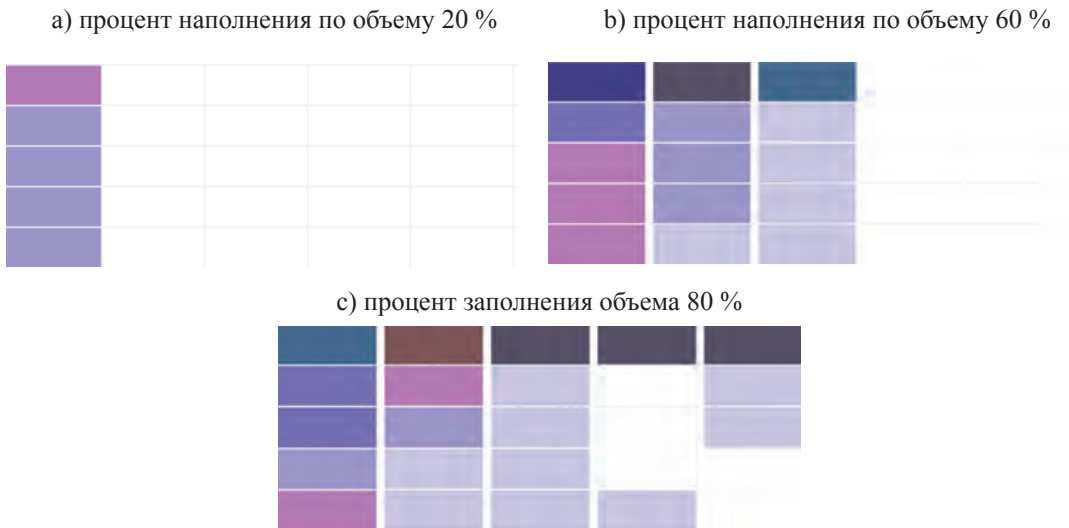


Рисунок 7 – Сумма порядков кластеров в блоках. Размер матрицы 200×20 , скорость потока $w = 2$, $p_0 = 3$, начальное количество кластеров в каждой ячейке равно нулю. Шаг по времени: а) $dt = 5$, б) $dt = 50$, в) $dt = 100$

1. В случае, когда начальное количество кластеров в каждой ячейке равно единице. Общее количество кластеров в расчетной области сначала увеличивается за счет

поступления в аппарат новых частиц, а затем начинает уменьшаться за счет процесса агрегации. После достаточно большого количества шагов расчета ($dt = 100$) устанавливается динамическое равновесие, т. е. количество кластеров становится примерно стабильным. При этом часть объема аппарата остается слабо заполненной. Данные о процентах заполнения объема аппарата при различных расходах приведены на рисунках.

2. В целом такая же картина наблюдается и для случая, когда начальное количество кластеров в каждой ячейке равно нулю. Только в этом случае начальный период, когда объем аппарата заполняется, более продолжительный.

Результаты расчетов наглядно показывают, что наличие аттрактора быстро приводит к локализации процесса в малой области рабочего объема. При этом значительная часть рабочего объема реактора остается незаполненной. Это явление можно охарактеризовать как уменьшение полезного объема аппарата. По-видимому, здесь необходимы более детальные исследования, чтобы дать количественные оценки этого явления. Поскольку алгоритм основан на стохастическом процессе, повторение расчетов с одним и тем же набором параметров приводит к некоторым колебаниям результатов, которые не меняют качество расчета.

Выводы. Основной вклад данной работы заключается в том, что предложен универсальный подход к моделированию привлекательного сворминга, сопровождающегося агрегацией частиц в дисперсной системе, на основе аппарата статистики случайных блужданий на математических решетках. Также разработан алгоритм численного эксперимента и соответствующий код программы. Результаты расчетов наглядно показывают, что наличие аттрактора быстро приводит к локализации процесса в малой области рабочего объема. При этом значительная часть рабочего объема реактора остается незаполненной (в некоторых расчетах от 4 до 50 %). Это явление можно охарактеризовать как уменьшение полезного объема аппарата. По-видимому, здесь необходимы более детальные исследования, чтобы дать количественные оценки этого явления. Хотя работа теоретическая, проведенные численные эксперименты показали хорошую интерпретируемость результатов с точки зрения физики процесса. Разработанный подход после доработки и необходимой адаптации может быть полезен при проектировании аппаратов и решении различных инженерных задач.

ЛИТЕРАТУРА

1 Shinpei Tanaka, Satoshi Nakata, and Takeshi Kano. Dynamic Ordering in a Swarm of Floating Droplets Driven by Solutal Marangoni Effect// Journal of Physical Society. Japan -2017.-V86.-P.101004-1-101004-8.

2 Be'er A., Ariel G. A Statistical Physics View of Swarming Bacteria// Movement Ecology. -2019.-7(1).- P.1-17.

3 Bouffanais R., Design and Control of Swarm Dynamics// Springer-Verlag. Singapore. -2016.

4 Zhuoyi Deng, Fangzhi Mou, Shaowen Tang, Leilei Xu, Ming Luo, Jianguo Guan. Swarming and collective migration of micromotors under near infrared light//Applied Materials Today.- V.13 -2018. -P.45–53.

5 Carrillo J.A., Fornasier M., Toscani G., Vecil F. Particle. Kinetic and Hydrodynamic Models of Swarming. In: Mathematical Modeling of Collective Behavior in Socio-Economic and Life Sciences.- 2010.- P.297-336.

6 Dong Y., Wang L., Yuan K., Ji F., Gao J., Zhang Z., Du X., Tian Y., Wang Q., Zhang L. Magnetic Microswarm Composed of Porous Nanocatalysts for Targeted Elimination of Biofilm Occlusion// *American Chemical Society Nano*, 2021.-15(3).- P.5056-5057.

7 Hao Zhou, Shan Jing, Xiong Yu, Han Zhou, Wenjie Lan b, Shaowei Li. Study of droplet breakage in a pulsed disc and doughnut column-Part I: Experiments and correlations//*Chemical Engineering Science*. P. 172-183.

8 Jose R., Singh V., Swarming in Bacteria, *J. Indian Inst. Sci.//A Multidisciplinary Reviews Journal*.-2020.- 100(3), P.515-524.

9 Monaco J.D., Hwang G.M., Schultz K.M., Zhang K. Cognitive Swarming in Complex Environments with Attractor Dynamics and Oscillatory Computing// *Biological Cybernetics*.- 2020.- 114(2), P.269-284.

10 Brener A.M. Adaptation of Random Walk Methods to the Modelling of Liquid Distribution in Packed Columns// In: *Advances in Fluid Mechanics IV*, WIT Press.- 2002.- P.291-300.

11 Brener A.M. Nonlocal Model of Aggregation in Dispersed Systems// *Theoretical Foundations of Chemical Engineering*. 2002.- 45(3), P.349-353.

12 Brener A., Musabekova L.M., Jamankarayeva M.A. Stochastic Lattice Model of Aggregation in Heterogeneous Polydisperse Media// *Chemical Engineering Transactions*.- 2017.- V.60.- P.79-84.

13 Brener A.M., Musabekova L.M., Dausheyeva N.B. On Modelling the Swarming in Dispersed Systems// *Chemical Engineering Transactions*.- 2021.-84.- P.217-222.

REFERENCES

1 Shinpei Tanaka, Satoshi Nakata, and Takeshi Kano. Dynamic Ordering in a Swarm of Floating Droplets Driven by Solutal Marangoni Effect// *Journal of Physical Society. Japan* -2017.-V86.- P.101004-1-101004-8.

2 Be'er A., Ariel G. A Statistical Physics View of Swarming Bacteria// *Movement Ecology*. -2019.-7(1).- P.1-17.

3 Bouffanais R., *Design and Control of Swarm Dynamics*// Springer-Verlag. Singapore. -2016.

4 Zhuoyi Deng, Fangzhi Mou, Shaowen Tang, Leilei Xu, Ming Luo, Jianguo Guan. Swarming and collective migration of micromotors under near infrared light//*Applied Materials Today*.- V.13 -2018. -P.45–53.

5 Carrillo J.A., Fornasier M., Toscani G., Vecil F. Particle. Kinetic and Hydrodynamic Models of Swarming. In: *Mathematical Modeling of Collective Behavior in Socio-Economic and Life Sciences*.- 2010.- P.297-336.

6 Dong Y., Wang L., Yuan K., Ji F., Gao J., Zhang Z., Du X., Tian Y., Wang Q., Zhang L. Magnetic Microswarm Composed of Porous Nanocatalysts for Targeted Elimination of Biofilm Occlusion// *American Chemical Society Nano*, 2021.-15(3).- P.5056-5057.

7 Hao Zhou, Shan Jing, Xiong Yu, Han Zhou, Wenjie Lan b, Shaowei Li. Study of droplet breakage in a pulsed disc and doughnut column-Part I: Experiments and correlations//*Chemical Engineering Science*. P. 172-183.

8 Jose R., Singh V., Swarming in Bacteria, *J. Indian Inst. Sci.//A Multidisciplinary Reviews Journal*.-2020.- 100(3), P.515-524.

9 Monaco J.D., Hwang G.M., Schultz K.M., Zhang K. Cognitive Swarming in Complex Environments with Attractor Dynamics and Oscillatory Computing// *Biological Cybernetics*.- 2020.- 114(2), P.269-284.

10 Brener A.M. Adaptation of Random Walk Methods to the Modelling of Liquid Distribution in Packed Columns// In: *Advances in Fluid Mechanics IV*, WIT Press.- 2002.- P.291-300.

11 Brener A.M. Nonlocal Model of Aggregation in Dispersed Systems// *Theoretical Foundations of Chemical Engineering*. 2002.- 45(3), P.349-353.

Brener A., Musabekova L.M., Jamankarayeva M.A. Stochastic Lattice Model of Aggregation in Heterogeneous Polydisperse Media// Chemical Engineering Transactions.- 2017.- V.60.- P.79-84.

Brener A.M., Musabekova L.M., Dausheyeva N.B. On Modelling the Swarming in Dispersed Systems// Chemical Engineering Transactions.- 2021.-84.- P.217-222.

**Ж. ЖАКСЫЛЫК¹, Л. М. МУСАБЕКОВА², К. Е. АРЫСТАНБАЕВ²,
М. А. АМАНДИКОВ³, З. С. КОБЕЕВА⁴**

*М. Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университеті¹, Шымкент қ., Қазақстан
Оңтүстік Қазақстан медицина академиясы², Шымкент қ., Қазақстан
Академик Ә.Қуатбеков атындағы Халықтар достығы университеті³,
Шымкент қ., Қазақстан
Шымкент Университеті⁴, Шымкент қ., Қазақстан*

ДИСПЕРСИТТІК ЖҮЙЕЛЕРДЕГІ АГРЕГАЦИЯСЫ БАР БӨЛШЕКТЕРДІҢ ЖИНАУЫН СВОРМИНГТІ КОМПЬЮТЕРЛІК МОДЕЛЬДЕУ

Алдыңғы жұмыстарда дисперсті ағындарда жоғары ретті кластерлер түзе отырып, бөлшектердің агрегациясымен бірге үйілу процестеріне жүйелі талдау жүргізілді. Талдау нәтижесінде үйілудің үш негізгі механизмін қарастыру ұсынылды. Алайда, бұрын тек инерциялық механизм егжей-тегжейлі қарастырылған. Ұсынылған жұмыста бұл тәсіл алғаш рет агрегация процесін ескере отырып, дисперсті жүйеде тарту механизмі бойынша үйілуді модельдеуге бейімделген. Зерттеудің жаңалығы, бұл дамудың өзіндік ерекшелігі мен тартылу орталықтарының әсерінен пайда болатын агрегациямен бірге жүретін үйінді құбылысының арнайы ықтималдық есептеу схемасы арқылы модельденуінде. Бұл өзара әрекеттесудің әртүрлі физикалық табиғатымен аттракциондық үйінді модельдеуге әмбебап тәсілді ұсынуға мүмкіндік береді. Мақалада алгоритм, сандық тәжірибелердің нәтижелері келтірілген және олардың қысқаша түсіндірмесі берілген.

Түйін сөздер: агрегация, тартымды үйінді, кластерлер, модельдеу, дисперсті жүйелер, стохастикалық тор.

**ZH. ZHAKSYLYK¹, L. MUSABEKOVA², K. ARYSTANBAYEV²,
M. AMANDIKOV³, Z. KOBEEVA⁴**

*South Kazakhstan University named after M. Auezov¹, Shymkent, Kazakhstan
South Kazakhstan Medical Academy², Shymkent, Kazakhstan
Peoples' Friendship University named after Academician A.Kuatbekov³,
Shymkent, Kazakhstan
Shymkent University⁴, Shymkent, Kazakhstan*

COMPUTER SIMULATION OF SWARMING WITH AGGREGATION OF PARTICLES IN DISPERSIVE SYSTEMS

In the previous works a systematic analysis of swarming processes, accompanied by particles aggregation with the formation of high-order clusters in dispersed flows, has been carried out. As a result

of the analysis, it was proposed to consider three main swarming mechanisms. However, only the inertial mechanism was previously considered in detail. In the submitted work, this approach has been firstly adapted to simulating swarming according to the attractive mechanism in a dispersed system with allowance for the aggregation process. The research novelty, peculiarity, and originality of this development lie in that the phenomenon of swarming, accompanied by aggregation, arising under the influence of attraction centers, is modeled using a special probabilistic calculation scheme that is allowing to offer a universal approach to modeling attractive swarming under different physical nature of the interaction. The paper presents the algorithm, results of numerical experiments and gives their brief interpretation.

Keywords: *aggregation, attraction swarming, clusters, modeling, dispersed systems, stochastic lattice.*