

ИМИТАЦИОННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ЭЛЕКТРОСИНТЕЗА ОЗОНА

Бобков С.П., Астраханцева И.А., Галиаскаров Э.Г., Бобкова Е.С.

Бобков Сергей Петрович (ORCID 0000-0001-7315-1625),
Астраханцева Ирина Александровна (ORCID 0000-0003-2841-8639),
Галиаскаров Эдуард Геннадьевич (ORCID: 0000-0002-7491-9189)
Ивановский государственный химико-технологический университет,
г. Иваново, Россия. 153000, Ивановская область, г. Иваново, пр. Шереметевский, д. 7.
E-mail: bsp@isuct.ru, i.astrakhantseva@mail.ru, galiaskarov_eg@isuct.ru.
Бобкова Елена Сергеевна (ORCID 0009-0009-4311-997X)
Российский государственный университет нефти и газа (НИУ) имени И.М. Губкина,
Москва, Россия, 119991, пр. Ленинский, д. 65, корп. 1.
E-mail: lenabobkova777@gmail.com

В настоящее время в промышленных технологиях часто применяется озон в качестве сильного окислителя. Массовое использование этого газа вызывает необходимость разработки эффективных методов его получения. Одним из таких способов является синтез озона в диэлектрическом барьерном разряде.

В данной статье рассматривается описание имитационного подхода к моделированию процесса электросинтеза озона в коаксиальном трубчатом реакторе барьерного разряда. При этом используется дискретный стохастический подход. Он базируется на исследовании функционирования отдельных элементов системы, которые, в результате, формируют поведение системы в целом. Подход учитывает значительное влияние случайных факторов на протекание исследуемых явлений. Вероятностный характер изучаемого процесса моделируется путем применения процедур, присущих методам Монте-Карло. В статье описывается алгоритм имитационного компьютерного моделирования. Схема действий учитывает следующие составляющие процесса электросинтеза озона: образование озона под действие электрического разряда; разложение озона с течением времени; перемещение газов внутри рабочей зоны реактора.

В работе приводятся результаты имитационного моделирования, как отдельный стадий синтеза озона, так и процесса в целом. Описаны итоги сравнения данных компьютерного моделирования с данными экспериментов, проведенных на реальной лабораторной установке. Делаются выводы об адекватности предлагаемой имитационной модели, о возможностях ее применения в исследовательской практике, отмечаются достоинства и недостатки описанного подхода.

Ключевые слова: имитационное моделирование; случайные процессы; дискретные модели; диэлектрический барьерный разряд

IMITATION MODELING OF THE OZONE ELECTROSYNTHESIS PROCESS

Bobkov S.P., Astrakhantseva I.A., Galiaskarov E.G., Bobkova E.S.

Bobkov Sergey Petrovich (ORCID 0000-0001-7315-1625),
Astrakhantseva Irina Aleksandrovna (ORCID 0000-0003-2841-8639),
Galiaskarov Eduard Gennadievich (ORCID: 0000-0002-7491-9189)
Ivanovo State University of Chemical Technology,
Ivanovo, Russia. 153000, Ivanovo region, Ivanovo, Sheremetevsky ave., 7.
E-mail: bsp@isuct.ru, i.astrakhantseva@mail.ru, galiaskarov_eg@isuct.ru.
Bobkova Elena Sergeevna (ORCID 0009-0009-4311-997X),
Russian State University of Oil and Gas (NRU) named after I.M. Gubkin,
Moscow, Russia, 119991, Leninsky av., 65, build. 1.
E-mail: lenabobkova777@gmail.com

Currently, industrial technologies often use ozone as a strong oxidizing agent. The massive use of this gas necessitates the development of effective methods for its production. One such method is the synthesis of ozone in a dielectric barrier discharge.

This article discusses a description of a simulation approach to modeling the process of ozone electrosynthesis in a coaxial tubular barrier discharge reactor. In this case, a discrete stochastic approach is used. It is based on the study of the functioning of individual elements of the system, which, as a result, shape the behavior of the system as a whole. The approach takes into account the significant influence of random factors on the course of the phenomena under study. The probabilistic nature of the process being studied is modeled by applying procedures inherent in Monte Carlo methods. The article describes a computer simulation algorithm. The action plan takes into account the following components of the ozone electrosynthesis process: ozone formation under the influence of an electric discharge; ozone decomposition over time; movement of gases within the working zone of the reactor.

The work presents the results of simulation modeling of both individual stages of ozone synthesis and the process as a whole. The results of a comparison of computer simulation data with experimental data conducted on a real laboratory installation are described. Conclusions are drawn about the adequacy of the proposed simulation model, about the possibilities of its application in research practice, and the advantages and disadvantages of the described approach are noted.

Keywords: simulation modeling; random processes; discrete models; dielectric barrier discharge

АКТУАЛЬНОСТЬ ПРОБЛЕМЫ

Современные технологии довольно широко используют озон в таких отраслях, как нефтехимическая, пищевая, электронная промышленности, в медицине, коммунальном и сельском хозяйстве. Этому способствуют то обстоятельство, что этот газ обладает сильными окисляющими и дезинфицирующими свойствами. В то же время, разлагаясь, озон практически не образует токсинов, как например хлор, применяемый с аналогичными целями [1]. Массовое распространение озона требует производства этого газа в достаточном количестве. Экономически наиболее выгодным способом получения озона в настоящее время считается его электрический синтез из кислорода [2]. При этом молекулы кислорода (O_2) подвергаются воздействию высоковольтных электрических разрядов и трансформируются, образуя озон (O_3).

Согласно современным представлениям к синтезу озона приводит группа реакций, при которых под действием электронов либо образуется атомарный кислород, либо молекулярный кислород диссоциирует на атомы. Затем, атомарный кислород взаимодействует с молекулярным и образует озон. В то же время, одновременно с синтезом озона протекают обратные реакции, в результате которых озон разлагается [3]. Брутто-уравнение обратимой реакции образования озона, которое описывает процесс в целом, можно представить в следующем виде:



Нетрудно заметить, что получение озона достаточно энергоёмкий процесс. Следовательно, задачи совершенствования конструкций оборудо-

вания для синтеза озона становятся весьма важными. Для эффективного решения этих задач успешно применяются методы моделирования.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Для синтеза озона, как в промышленных, так и лабораторных условиях часто используются реакторы, в которых реализуется диэлектрический барьерный разряд [4, 5]. Прежде всего, это вызвано экономическими соображениями. Барьерная форма электрического разряда возникает между электродами, к которым приложена достаточная разность потенциалов. При этом электроды разделены диэлектрическим барьером и разрядным промежутком, где, собственно, и протекает процесс синтеза озона. Барьерный разряд удобен также тем, что он осуществим в потоке газа при достаточно нормальном давлении.

Существует несколько вариантов конструктивного оформления реакторов барьерного разряда. На практике большое распространение получила коаксиальная конструкция реактора [6]. В этом случае реакционной зоной является кольцевой зазор между коаксиально расположенными цилиндрическими электродами – центральным и внешним. При этом внешний электрод изолирован диэлектрической стенкой [1]. Газовая смесь подается в реакционную зону, обрабатывается там плазмой барьерного разряда, насыщается озоном и покидает аппарат.

Таким образом, создаваемая модель должна позволить имитировать три основных процесса, непрерывно и одновременно протекающих в реакторе синтеза:

- Образование озона.

- Разложение озона.
- Перемещение газа внутри рабочей зоны реактора.

В качестве методологической основы модели был выбран дискретный стохастический подход. Он предполагает рассмотрение эволюции системы конечных элементов пространства по шагам дискретного времени. Кроме того, как следует из названия, подход учитывает существенное влияние случайных факторов на динамику исследуемого процесса. Последнее обстоятельство позволяет использовать при моделировании приемы, характерные для методов Монте-Карло [7]. Следует отметить, что интерес к дискретным подходам в моделировании значительно возрос в последние годы, что, очевидно, обусловлено ростом вычислительной мощности современных компьютеров. В рамках дискретного стохастического подхода объединены методы моделирования, основанные на следующей базовой идее. Утверждается, что функционирование системы полностью определяется поведением элементов, из которых система состоит. Принимается, что отдельные элементы системы взаимодействуют между собой и с окружающей средой, подчиняясь одинаковым правилам. Данные правила поведения могут иметь как вероятностный характер, так и быть детерми-

рованными. Дискретные подходы к моделированию, такие, как модели решеточных газов, системы клеточных автоматов, агентные модели и пр. [8, 9] эффективно используются в самых различных областях исследований [10, 11].

В данных исследованиях использовалась модификация агентного метода имитационного моделирования. В качестве агентов рассматривались элементы большой системы, которые расположены в дискретном пространстве и функционируют по шагам дискретного времени. Их состояние и локализация подчиняются установленным правилам и алгоритмически закодированы в компьютерной программе.

При получении дискретной модели реактора-озонатора выдвинем следующие гипотезы. Сплошной поток непрерывной среды в аппарате будем рассматривать состоящим из множества отдельных элементов, размер которых позволяет реализоваться макроскопическим характеристикам движущегося газа. При этом указанные макроэлементы могут перемещаться строго между узлами воображаемой пространственной решетки [12]. Ограничимся двухмерным случаем и будем рассматривать регулярную ортогональную решетку (рис. 1).

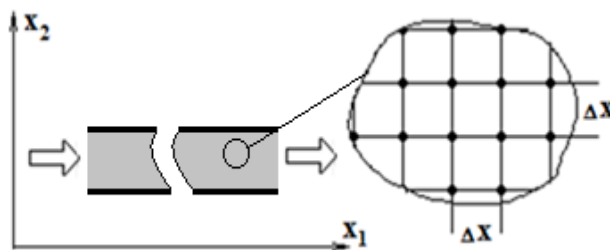


Рис. 1. Концепция дискретной модели
Fig.1. The concept of a discrete model

Вторая гипотеза предполагает, что дискретные макроэлементы рассматриваемой системы находятся в одном из двух состояний – неактивном или активном. Для последнего будем считать, что активный элемент содержит макроскопически достаточное количество озона, чего нет в неактивном элементе.

Имитация процесса развития системы заключается в том, что на каждом шаге по времени может происходить синхронное изменение состояния каждого макроэлемента и обновление его положения на решетке. Данные процессы определяются правилами, которые описаны ниже.

Моделирование образования озона. Было принято, что образование озона в реакторе происходит по следующему механизму. Находящийся внутри аппарата неактивный макроэлемент среды

на каждом шаге по времени может перейти в активное состояние с вероятностью P_1 . Эту вероятность можно интерпретировать, как отношение количества появившихся на данном временном отрезке активных макроэлементов к общему количеству макроэлементов. Вероятность P_1 зависит от конструкции реактора, параметров электрического разряда, состава газовой фазы, но не зависит от расхода газа через аппарат и от времени пребывания газа в рабочей зоне. Предварительная оценка данного показателя проводилась с использованием имеющихся кинетических параметров реакций образования озона [13]. Возможное количество появившихся активных элементов определялось, исходя из скорости образования озона, объема макроэлемента и шага по времени. Впоследствии вычисленные значения уточнялись на осно-

ве экспериментальных данных. Поскольку при работе с моделью использовалась пространственная решетка с шагом в пределах $(1,0 \div 0,25)$ мм, величина вероятности P_1 лежала в диапазоне значений $(2 \cdot 10^{-3} \div 0,5 \cdot 10^{-3})$.

Алгоритм моделирования образования активных макроэлементов включал в себя следующие этапы:

1. Исходя из заданного значения вероятности возникновения активного элемента и размеров решетки, вычислялось среднее количество активных элементов, появляющихся на каждом шаге по времени n_{cp} :

$$n_{cp} = P_1 \cdot N \cdot M, \quad (2)$$

где N и M – количество узлов решетки в направлении соответствующих осей.

Затем имитировалось конкретное число появившихся активных элементов n_k . Оно генерировалось, как целая случайная величина, равномерно распределенная от 1 до $2n_{cp}$.

2. Далее координаты (положение на решетке) каждого нового активного элемента определялись путем случайного выбора узла решетки.

Моделирование разложения озона. Разложение озона означает, что активный элемент среды возвращается в неактивное состояние. Положим, что этот процесс характеризуется вероятностью перехода активного элемента в пассивное состояние $-P_2$. Будем считать, что этот показатель не только зависит от конструкции реактора и состава среды, но и увеличивается с возрастанием продолжительности «жизни» конкретного активного макроэлемента. Величина P_2 рассматривалась, как непрерывная случайная экспоненциально распределенная величина:

$$P_2(\tau) = 1 - e^{-\lambda\tau} \quad (3)$$

где τ – продолжительность существования активного элемента; λ – параметр, связанный с количеством событий дезактивации элементов в единицу времени.

Если обозначить среднее число элементов, погибающих на каждом шаге по времени, как m_{cp} , то можно записать:

$$\lambda = 1/m_{cp} \quad (4)$$

Величина m_{cp} должна коррелировать с показателем скорости появления активных элементов n_{cp} . С учетом сравнения кинетических параметров реакций образования и разрушения озона [13], значение m_{cp} , определялось, как непрерывная случайная величина, равномерно распределенная от 1 до n_{cp} . В проведенных имитационных экспериментах вероятность P_2 составляла $(0,02 \div 0,65)$ в зависимости от продолжительности активного состояния макроэлемента.

Алгоритм моделирования перехода активных макроэлементов в исходное состояние следующий:

1. Выбор очередного активного элемента и расчет вероятности его дезактивации P_2 по выражениям (3) и (4).

2. Имитация события. При этом генерируется случайное число ξ , равномерно распределенное в диапазоне $[0 \div 1]$. Если выполняется условие $\xi < P_2$, то событие произошло.

Моделирование движения макроэлементов. Разработанная модель предполагает, что в движении макроэлементов через реактор задействованы два механизма [14]. Первый из них – плоскопараллельное перемещение макроэлементов в направлении оси течения, которое определяется давлением газа на входе в аппарат. Величина модуля скорости в осевом направлении зависит от расстояния элемента от оси аппарата и уменьшается по мере приближения к его стенке. Для расчета данной составляющей скорости используется выражение, вытекающее из закона Пуазейля:

$$v(r) = \frac{\Delta P(R^2 - r^2)}{4\mu l} \quad (5)$$

где $v(r)$ – скорость в осевом направлении; P – давление газа; μ – вязкость газа; R – радиус рабочей зоны реактора; r – расстояние до оси реактора; l – длина рабочей зоны реактора.

В качестве второго механизма движения газовой среды рассматривается случайное перемещение элемента в один из соседних узлов решетки, т.е. аналог простейшей диффузии. Для выбора конкретного направления нами использовался метод «выбора по жребии», который описывается таким оператором:

$$\begin{cases} m(x_i, x_j) \rightarrow m(x_i, x_j + 1) & \text{если } 0 < \xi \leq d_1 \\ m(x_i, x_j) \rightarrow m(x_i + 1, x_j) & \text{если } d_1 < \xi \leq d_1 + d_2 \\ m(x_i, x_j) \rightarrow m(x_i, x_j - 1) & \text{если } d_1 + d_2 < \xi \leq d_1 + d_2 + d_3 \\ m(x_i, x_j) \rightarrow m(x_i - 1, x_j) & \text{если } d_1 + d_2 + d_3 < \xi \leq 1 \end{cases} \quad (6)$$

где $m(x_1, x_2)$ – координата узла;

ξ – случайное число, равномерно распределенное в диапазоне $[0 \div 1]$;

d_i – вероятности движения в соответствующем направлении.

Алгоритм моделирования движения включает такие действия.

1. Выбирается очередной активный макроэлемент. Исходя из его координат на решетке и исходных данных по уравнению (5) для него вычисляется модуль осевой скорости.
2. Полученная величина, квантованная с учетом шага решетки, позволяет определить

предварительные координаты нового положения элемента.

3. Окончательные координаты элемента определяются с учетом влияния диффузионной составляющей. При этом генерируется случайное число ξ , и проверяются условия (6). При моделировании нами рассматривался простейший случай, когда вероятности движения принимались одинаковыми: $d_1 = d_2 = d_3 = d_4 = 0,25$.

ОПИСАНИЕ АЛГОРИТМА МОДЕЛИРОВАНИЯ

Укрупненная блок-схема алгоритма моделирования представлена на рис. 2.

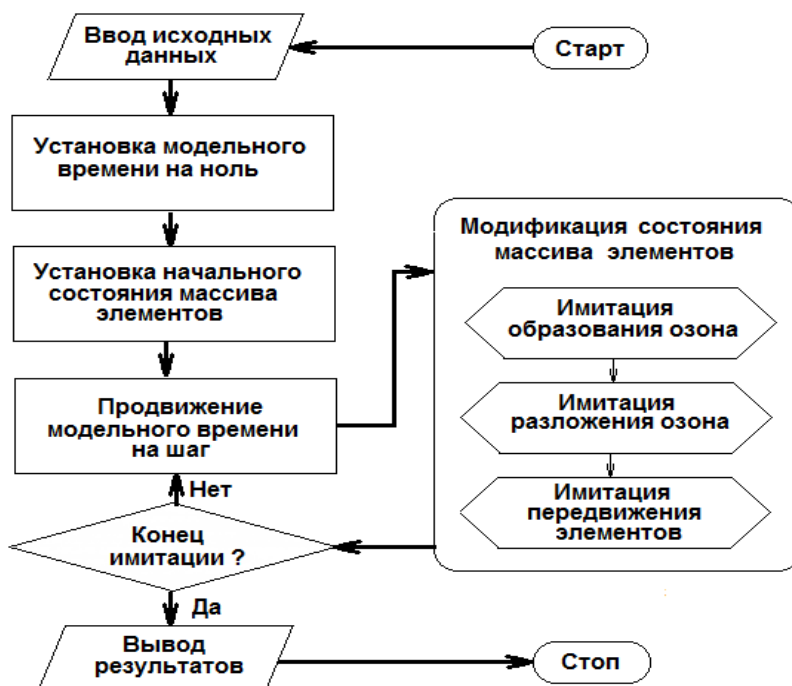


Рис. 2. Блок-схема алгоритма имитационного моделирования
Fig. 2. Block diagram of the simulation algorithm

Компьютерная имитация процесса синтеза озона состоит из следующих этапов.

1. Ввод исходных данных: длина и радиус рабочей зоны реактора (l и R); давление газовой смеси на входе в реактор (P); вязкость среды (μ); шаг дискретизации пространства (x); шаг дискретизации времени; общее число шагов моделирования (T); вектор вероятностей случайного перемещения элементов (d_i), вероятность возникновения активного элемента (P_1).

2. Установка начального значения времени и начального состояния массива макроэлементов (их исходное размещение).

3. Продвижение имитационного времени на один шаг.

4. Имитация процессов в рабочей зоне реактора согласно методикам, описанным выше: образование активных макроэлементов, «гибель» активных макроэлементов, перемещение в узел с новыми координатами. К концу данного этапа формируется массив состояния элементов на данном шаге по времени.

5. Если шаги имитационного времени не исчерпаны, то происходит возврат к этапу 3.

6. Вывод и визуализация результатов. Полученная последовательность массивов состояния элементов подвергается статистическому анализу и служит основой для создания графических иллюстраций моделируемого явления. Описанный алгоритм был реализован в программной среде MatLab.

РЕЗУЛЬТАТЫ ИМИТАЦИОННОГО
МОДЕЛИРОВАНИЯ

Физическим прототипом при имитационном моделировании являлся лабораторный реактор диэлектрического барьерного разряда коаксиального типа, ранее описанный в литературе [15]. Он имел следующие геометрические размеры: длина активной зоны 120 мм, внешний и внутренний радиусы 9 мм и 4,5 мм. Барьерный разряд создавался током промышленной частоты и напряжением до 20 кВ.

В реактор подавалась газовая смесь, содержащая технический кислород. Динамическая вязкость смеси составляла $20,1 \cdot 10^{-6}$ Па·с. Расход сплошной среды регулировался, что позволяло менять среднюю скорость и, соответственно, продолжительность контакта смеси с зоной разряда. При физических экспериментах средняя скорость газа менялась в пределах $(0,01 \div 0,04)$ м/с.

Для упрощения модели коаксиальное сечение рабочей зоны рассматривалось, как круглое. Чтобы режим течения смеси остался идентичным был рассчитан эквивалентный гидравлический радиус [16], который в данном случае составил 7,5 мм. Также проверены значения критерия подобия. Расчет показал, что в указанном диапазоне изменения скоростей потока величина критерия Рейнольдса составляла $10,3 \div 41,2$. Указанные значения позволили считать режим течения ламинарным, что позволяет считать правомерным использование в модели уравнения (5).

При дискретизации пространства в имитационной модели был выбран шаг $x = 0,1$ мм, время квантовалось с шагом $\tau = 0,02$ с.

В процессе имитационного моделирования определялись несколько реализаций изучаемого случайного процесса, далее полученные данные подвергались статистической обработке.

Ниже представлены некоторые результаты компьютерной имитации электросинтеза озона.

На рис. 3. иллюстрируется процесс образования активных макроэлементов по шагам дискретного времени. По оси абсцисс, в данном и двух последующих рисунках, отложено модельное время. По оси ординат – количество появившихся активных элементов.

Результаты, представленные на рис. 3 получены при вероятности образования P_1 , равной $1,5 \cdot 10^{-3}$. Модельное время 400 тактов, что соответствует восьми секундам реального времени. Результаты показывают, что в течение одного шага по времени в системе может появляться от 5 до 270 активных элементов. Среднее количество появляющихся элементов – 135 шт.

Рис. 4 показывает итоги имитации процесса разложения озона, т.е. перехода активных элементов обратно в неактивное состояние. Здесь по оси ординат приведено количество активных элементов, возвратившихся в исходное состояние.

Представленные данные показывают, что в исследуемой системе за один шаг дискретного времени перестают быть активными, в среднем 12 элементов. Результат работы реактора – суммарное количество активных макроэлементов, покидающих зону контакта, изображено на рис. 5 (по оси ординат). Процесс имитировался от момента запуска.

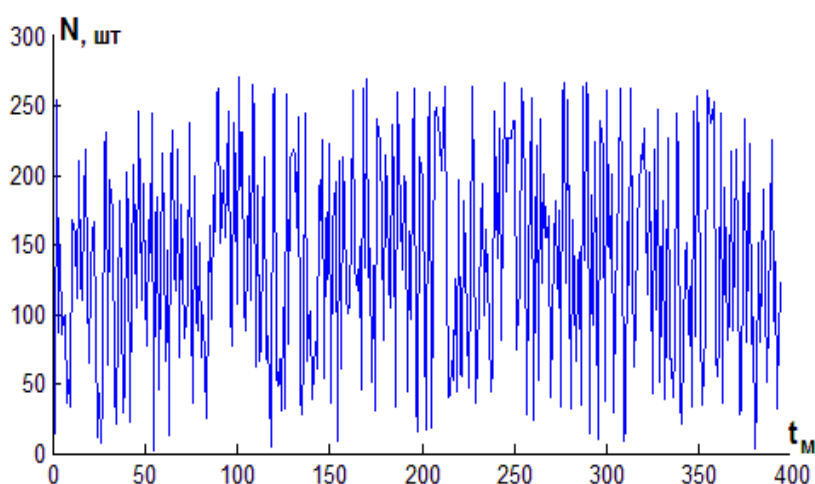


Рис. 3. Образование озона
Fig. 3. Ozone formation

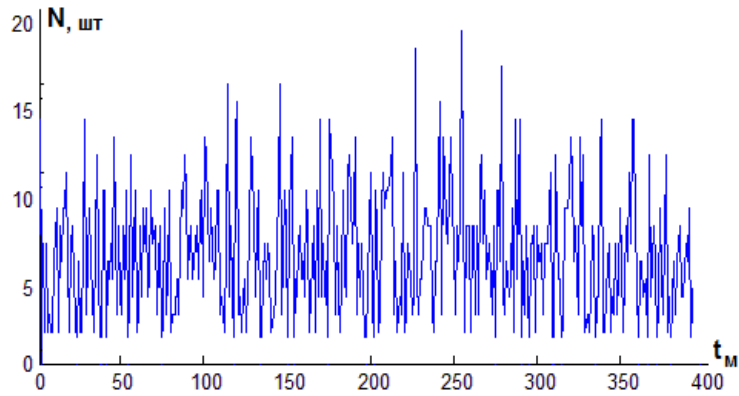


Рис. 4. Разложение озона
Fig. 4. Ozone decomposition

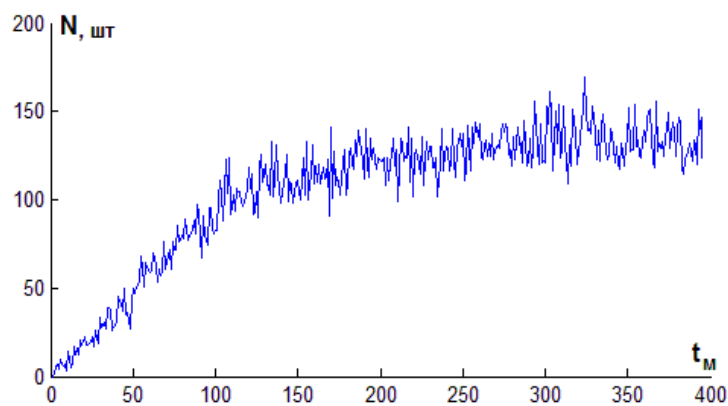


Рис. 5. Выход озона из реактора
Fig. 5. Ozone output from the reactor

Нетрудно заметить, что по мере возрастания времени режим работы аппарата приближается к стационарному, что характерно для подобного оборудования.

Была проверена адекватность предлагаемого имитационного алгоритма. Для этого проведено сравнение результатов, полученных при

компьютерном моделировании с данными физического эксперимента, приведенными в литературе [17]. Рис. 6. дает возможность сопоставить модельные и экспериментальные значения концентрации озона на выходе из реактора при разных скоростях движения газовой смеси.

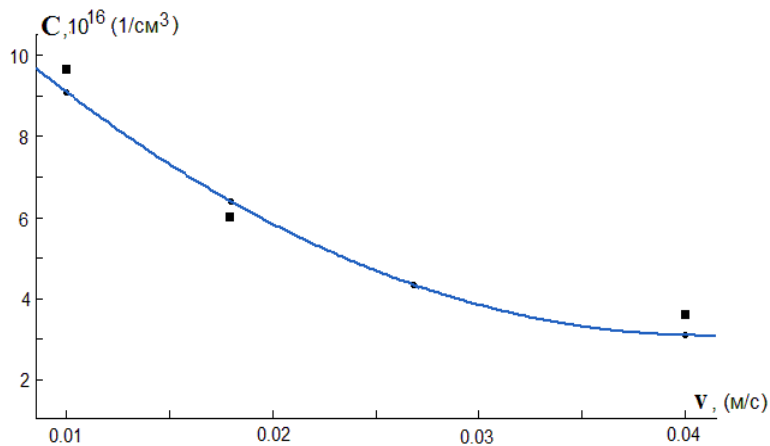


Рис. 6. Сравнение модельных и экспериментальных данных
Fig. 6. Comparison of model and experimental data

На указанном рисунке сплошной кривой представлены данные компьютерной имитации процесса, которые аппроксимированы полиномом третьей степени. Значения, полученные в ходе физического эксперимента, даны в виде точек квадратной формы.

Анализ представленных результатов дает возможность утверждать, что предлагаемый имитационный алгоритм позволяет вполне адекватно моделировать исследуемый процесс. Кроме того, расчеты показали, что относительная погрешность данных моделирования не превышает 15%.

ВЫВОДЫ И РЕКОМЕНДАЦИИ

Следует указать, что данные, полученные с использованием дискретного статистического подхода и реализованного в имитационной модели, не противоречат существующим теоретическим взглядам на изучаемый процесс.

Правомерность дискретного и макроскопического представления о природе вещества была высказана В.П. Майковым около 30-ти лет назад [18]. Предложенная концепция применима к объектам, где неделимыми ячейками являются совокупности частиц, в количестве не менее 10¹⁰ штук. При этом, как бы устанавливается граница между микромиром, где действуют законы квантовой механики и обычным миром, в котором имеют смысл такие макроскопические характеристики вещества, как давление, температура, вязкость и пр. Предложенная В.П. Майковым парадигма позволила внести большой вклад в развитие системной методологии в области теории и практики химической техники. Что касается использования методов Монте-Карло для моделирования

химического взаимодействия, то можно указать, что вероятностные факторы широко используются химической кинетикой. В частности, уравнения для скоростей реакции выводятся из положений молекулярно-кинетической теории газов с использованием элементов статистики и теории вероятности [19]. Относительным недостатком описанного подхода является необходимость определения числовых значений стохастических показателей, что, в прочем, характерно для большинства вероятностных подходов [20].

С практической точки зрения следует обратить внимание на возможность эффективного применения современной вычислительной техники, при работе с дискретными вероятностными моделями. В частности, печатная публикация не позволяет продемонстрировать динамику процесса, протекающего внутри реактора, используя компьютерную анимацию. Для этого не нужны специальные программные средства, достаточно лишь последовательно визуализировать состояние массива элементов по шагам дискретного времени.

Простота исходных положений и физическая ясность используемых преобразований, а также возможность широкого применения цифровых технологий позволяют рекомендовать имитационный подход к внедрению в образовательный процесс при изучении соответствующих инженерных дисциплин.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов, требующего раскрытия в данной статье

The authors declare the absence a conflict of interest warranting disclosure in this article.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Лунин В.В., Самойлович В.Г., Ткаченко С.Н. и др.** Теория и практика получения и применения озона. М.: Издательство Московского университета, 2016. 416 с.
2. **Силкин Е.М.** Синтез озона в электрических разрядах и повышение его эффективности. *Компоненты и технологии*. 2008. №6. С. 136-143.
3. **Лунин В.В., Попович М.П., Ткаченко С.Н.** Физическая химия озона. М.: ООО "МАКС Пресс", 2019. 540 с.
4. **Самойлович В. Г., Гибалов В. И., Козлов К. В.** Физическая химия барьерного разряда. М.: Изд-во Московского университета, 1989. 176 с.
5. **Жилин Ю.Н., Зарубина А.Н., Олиференко Г.Л. [и др]** Инженерная химия. Химические реакторы. М.: ФГБОУ ВО МГУЛ, 2016. 140 с
6. **Гумеров А.М.** Математическое моделирование химико-технологических процессов: Санкт-Петербург: Лань, 2022. 176 с.

REFERENCES

1. **Lunin V.V., Samoylovich V.G., Tkachenko S.N. et al.** Theory and practice of obtaining and using ozone. M.: Moscow University Publishing House, 2016. 416 p.
2. **Silkin E.M.** Synthesis of ozone in electrical discharges and increasing its efficiency. *Components and technologies*. 2008. N 6. P. 136-143.
3. **Lunin V.V., Popovich M.P., Tkachenko S.N.** Physical chemistry of ozone. M.: MAKS Press LLC, 2019. 540 p.
4. **Samoilovich V.G., Gibalov V.I., Kozlov K.V.** Physical chemistry of barrier discharge. M.: Moscow University Publishing House, 1989. 176 p.
5. **Zhilin Yu.N., Zarubina A.N., Oliferenko G.L. [and others].** Engineering chemistry. Chemical reactors. M.: FGBOU VO MGUL, 2016. 140 p.
6. **Gumerov A.M.** Mathematical modeling of chemical and technological processes: St. Petersburg: Lan, 2022. 176 p.

7. **Бобков С.П., Астраханцева И.А.** Использование вероятностных клеточных автоматов для моделирования течения жидкости. *Современные наукоемкие технологии. Региональное приложение*. 2022. № 2(70). С. 47-54. DOI:10.6060/snt.20227002.0006
8. **Бобков С.П., Астраханцева И.А.** Использование многоагентных систем для моделирования технологических процессов. *Journal of Physics: Conference Series*, 2021. 012002 (ITIDMS-II 2021). DOI: 10.1088/1742-6596/2001/1/012002
9. **Бобков С.П., Астраханцева И.А.** Применение агентного подхода для моделирования процессов теплопроводности. *Вестник ИГЭУ*. 2022. № 2. С. 58-66. DOI: 10.17588/2072-2672. 2022.2.058-066
10. **Bobkov S.P.** Use of Discrete Approaches for Simulation the Basic Processes of Chemical Technology. *Russian Journal of General Chemistry*. 2021. Vol. 91, N 6. P. 1190–1197. DOI:10.1134/S1070363221080181
11. **Бобков С.П., Астраханцева И.А.** Дискретная стохастическая модель гидродинамики потока. *Моделирование систем и процессов*. 2023. № 2. С. 7-14. DOI: 10.12737/2219-0767-2023-16-2-7-14
12. **L. Saidiaa., A. Belasria [и др.]**. Исследование физико-химических свойств импульсного разряда в смеси CO₂ - O₂. *Физика плазмы*. 2019. Т. 45, № 5. С. 465–480.
13. **Бобков С.П., Астраханцев Р.Г., Павлова Е.А.** Исследование структуры потоков в технологических аппаратах с использованием дискретных динамических моделей. *Современные наукоемкие технологии. Региональное приложение*. 2024. № 1(77). С. 95-101. DOI:10.6060/snt.20247701.00013
14. **Бобкова Е.С.** Разряд атмосферного давления как источник активных частиц для очистки воды от органических поллютантов. *Известия вузов. Химия и хим. технология*. 2014. Т. 57, № 10. С. 89-91.
15. **Касаткин А.Г.** Основные процессы и аппараты химической технологии: Учебник для вузов. М.: ООО ТИД «Альянс», 2004. 735 с.
16. **Bobkova E.S., Rybkin V.V.** Peculiarities of Energy Efficiency Comparison of Plasma Chemical Reactors for Water Purification from Organic Substances. *Plasma Chem. Plasma Processing*. 2015. V.35, N 1. P. 133-142.
17. **Майков В.П.** Расширенная версия классической термодинамики - физика дискретного пространства-времени. М.: МГУИЭ. 1997. 160 с.
18. **Буданов В.В., Лefeldова О.В.** Химическая кинетика. Иван. гос. хим-технол. ун-т. Иваново, 2011. 177 с.
19. **Ефремов Г.И.** Моделирование химико-технологических процессов. Москва: ИНФРА-М, 2021. 260 с.
7. **Bobkov S.P., Astrakhantseva I.A.** Using probabilistic cellular automata to simulate fluid flow. *Modern high technologies. Regional application*. 2022. N 2(70). P. 47-54. DOI:10.6060/snt.20227002.0006(in Russian)
8. **Bobkov S.P., Astrakhantseva I.A.** Using multi-agent systems for modeling technological processes. *Journal of Physics: Conference Series*, 2021. 012002 (ITIDMS-II 2021). DOI: 10.1088/1742-6596/2001/1/012002
9. **Bobkov S.P., Astrakhantseva I.A.** Application of an agent-based approach to modeling heat conduction processes. *Bulletin of ISUE*. 2022. N 2. P. 58-66. DOI: 10.17588/2072-2672. 2022.2.058-066
10. **Bobkov S.P.** Use of Discrete Approaches for Simulation the Basic Processes of Chemical Technology. *Russian Journal of General Chemistry*. 2021. Vol. 91, N 6. P. 1190–1197. DOI:10.1134/S1070363221080181
11. **Bobkov S.P., Astrakhantseva I.A.** Discrete stochastic model of flow hydrodynamics. *Modeling of systems and processes*. 2023. N 2. P. 7-14. DOI: 10.12737/2219-0767-2023-16-2-7-14
12. **L. Saidiaa., A. Belasria [et al.]**. Study of the physico-chemical properties of a pulsed discharge in a CO₂-O₂ mixture. *Plasma Physics*. 2019. V. 45, N 5. P. 465–480.
13. **Bobkov S.P., Astrakhantsev R.G., Pavlova E.A.** Study of the structure of flows in technological devices using discrete dynamic models. *Modern high technologies. Regional application*. 2024. N 1(77). P. 95-101. DOI: 10.6060/snt.20247701.00013
14. **Bobkova E.S.** Atmospheric pressure discharge as a source of active particles for purifying water from organic pollutants. *News of universities. Chemistry and chem. technology*. 2014. T. 57, N 10. P. 89-91.
15. **Kasatkin A.G.** Basic processes and apparatus of chemical technology: Textbook for universities. М.: LLC TID “Alliance”, 2004. 735 p. (in Russian)
16. **Bobkova E.S., Rybkin V.V.** Peculiarities of Energy Efficiency Comparison of Plasma Chemical Reactors for Water Purification from Organic Substances. *Plasma Chem. Plasma Processing*. 2015. V. 35, N 1. P. 133-142.
17. **Maikov V.P.** An extended version of classical thermodynamics, physics of discrete space-time. М.: MGUIE. 1997. 160 p.
18. **Budanov V.V., Lefeldova O.V.** Chemical kinetics. Ivan. state chemical technology univ. Ivanovo, 2011. 177 p.
19. **Efremov G.I.** Modeling of chemical and technological processes. Moscow: INFRA-M, 2021. 260 p.

Поступила в редакцию 25.03.2024
Принята к опубликованию 08.05.2024

Received 25.03.2024
Accepted 08.05.2024