

1. **Boyadjiev, C., & Popova-Krumova, P. (2022). Introduction in the Biotechnology Processes Modeling. *Progress in Chemical Science Research Vol. 2*, 1–13.**

<https://doi.org/10.9734/bpi/pcsr/v2/1920A>

Резюме: Представен е теоретичен анализ на методите за моделиране на биотехнологични процеси. Методите за моделиране на конкретните процеси могат да бъдат различни, но те трябва да доближат математическото описание до реалния процес чрез използване на подходящи експериментални данни. Тези методи са представени за биотехнологични процеси в колонни апарати, в случаите на многопараметрични модели и моделиране на процеси с неизвестен механизъм.

2. **Boyadjiev, Chr., Dzhonova, D., Stefanova, K., Panyovska, St., Popova, P., Pavlenko, A., Zhukov, V., & Slesareva, E. (2020). On the phases' distribution in packed columns. *Journal of Physics: Conference Series*, (Vol. 1677, No. 1, p. 012054).**

IOP Publishing. ISSN: 1742-6588, doi:10.1088/1742-6596/1677/1/012054.

Резюме: Колоните с пълнеж са типични апарати за процеси на разделяне, които са важни за производството на гориво и енергия и намаляване на вредните емисии в атмосферата. Ефективността на процесите в тях е силно зависима от закономерното разпределение на фазите. Неправилното разпределение на течности и газове е обект на дълги интензивни изследвания. Установено е, че образуването на поток от течна стена е един от основните фактори за широкомащабната радиална неравномерност на разпределението на течност и газ. Прогнозирането и контролът на това явление все още е незадоволително. Нашата работа предлага нов подход за оценка на стенния поток при противоточна абсорбция в колони с ненареден пълнеж. Този подход използва математически апарат и се основава на експериментални данни за стенния поток по височина на колоната. Това позволява получаване на информация за течния поток и оценка на обема на стенния поток като критерий за ефективност за сравнение на пълнежите. Моделът е построен за случая с експериментални данни за метални пръстени „Pall“.

3. **Boyadjiev, Chr., Dzhonova-Atanasova, D., Popova-Krumova, P., Stefanova, K., Pavlenko, A., Zhukov, V., & Slesareva, E. (2020). Liquid wall flow in counter-current**

Резюме: Абсорбционните процеси намират широко приложение в химичното инженерство. Важни съвременни приложения са производството на горива и пречистването на отпадъчни газове и течности, с цел опазване на околната среда и производство на ценни продукти. Колоните с пълнеж са типични апарати за осъществяване на тези процеси. Тяхната ефективна работа е силно зависима от равномерното разпределение на течната и газовата фаза. Образуването на течен стенен поток е една от основните причини за широкомащабно неправилно разпределение в пълнежните слоеве. Прогнозирането на неправилното разпределение на течността е необходимо за оценка на ефективността на масопреноса. Настоящата работа използва нов подход за моделиране на течния стенен поток в различни видове ненаредени пълнежи. Резултатите от моделирането, в съответствие с експерименталните данни, показват ефекта на параметрите върху развитието на стенния поток по протежение на колоната. Параметърът на неправилно разпределение се изчислява като база за сравнение на неправилното разпределение на течността в пълнежа. Настоящият метод за оценка на стенния поток е предназначен за по-нататъшно моделиране на ефективността на разделяне в колони с пълнеж.

- 4. Pavlenko, A., Zhukov, V., Slesareva, E., Boyadjiev, Chr., Boyadjiev, B., Dzhonova-Atanasova, D., & Popova-Krumova, P. (2020). Large-scale maldistributions of local flow parameters at distillation on a structured packing. Bulg. Chem. Commun., Volume 52, 42-46. ISSN: 0324-1130, DOI: 10.34049/bcc.52.F.0007**

Резюме: Резултатите от изследванията и експлоатацията на промишлени дестилационни колони с най-широко използвания пълнеж показаха, че ефективността на разделяне с увеличаване на диаметъра може значително да намалее поради образуването на мащабна неравномерност на течните потоци, както и концентрации по протежение на колоната, което значително влияе върху производителността и чистотата на крайния продукт. Експериментите бяха проведени на широкомащабна експериментална инсталация, предназначена да изследва интегралните и локалните характеристики на разделянето на

сместа чрез дестилация върху структуриран пълнеж. За симулиране на процеса на отделяне на втечнен въздух е използвана смес от фреон R114/R21. Разделянето на сместа е изследвано върху структуриран пълнеж Mellapak 350.Y с диаметър 0,9 m и височина 2100 mm. Изследвахме ефективността на разделянето на сместа, динамиката на образуване на широкомащабна неравномерност на температурното поле по напречното сечение на колоната по време на разделянето на сместа и разпределението на плътността на местните скорости на потока течност на изхода на пълнежа. Експериментите бяха проведени при налягане от 0,3 МПа и начална концентрация на сместа R114 / R21 от 12%. Проведените експериментални изследвания показват, че се образува широкомащабно температурно разпределение по напречното сечение и височина на дестилационната колона. Разгледани са условията, водещи до образуването на тази неравномерност. Получените експериментални данни ще бъдат използвани при разработването на нови подходи за числено симулиране на масопреноса и ефективността на разделяне на сместа в дестилационни колони със структуриран пълнеж в рамките на съвместен проект.

- 5. Boyadjiev, B., Boyadjiev, Chr., & Popova-Krumova, P. (2020). Convective type models of co-current absorption processes in column apparatuses. Bulg. Chem. Commun., 52, 86-94. ISSN: 0324-1130, DOI: 10.34049/bcc.52.F.0015**

Резюме: Представен е нов подход за моделиране на абсорбционните процеси в правоточни колонни апарати в промишлени условия, като моделите са от конвективен тип. Използването на експериментални данни за средната концентрация в края на колоната, в случаите на силно разтворими и слабо разтворими газове, позволява да се получат параметрите на модела, свързани с радиалната неравномерност на скоростта в газовата и течната фази. Тези експериментални стойности на параметрите позволяват да се получи коефициентът на масопреносяне в случаите на физична и химическа абсорбция на средноразтворими газове.

- 6. Boyadjiev, Doichinova, M., C., Boyadjiev, B., & Popova-Krumova, P. (2017). Transfer processes in industrial column apparatuses. Mathematical modeling, 1 (1), 23-27. ISSN: 2535-0978**

Резюме: Докладът е представяне на монографията “Chr. Boyadjiev, M. Doichinova, B. Boyadjiev, P. Popova-Krumova, Modeling of Column Apparatus Processes, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2016, pp. 313.

Нов подход за моделиране на масопреносните процеси в индустриални колонни апарати, в приближенията на механиката на непрекъснатите среди, се използва за създаване на модел на конвекция-дифузия и средно концентрационни модели. Представени са модели на химични, абсорбционни, адсорбционни и каталитични процеси.

- 7. Boyadjiev, Chr., Doichinova, M., Popova-Krumova, P., & Boyadjiev, B. (2015). On the gas purification from low SO₂ concentration. 1. Absorption processes modeling. Int. J. Eng. Res, 4 (10), 550-557. ISSN: 2347-5013**

Резюме: Представен е теоретичен анализ на процесите за пречистване на газовете от ниско съдържание на SO₂ в топлоелектрическите централи. Предложен е нов подход за качествен анализ (модел на конвекция-дифузия) и количествено описание (модел на средните концентрации) на абсорбционните процеси в колонни апарати. Показан е теоретичен анализ на физическата абсорбция, химичната абсорбция и абсорбцията с двуфазен абсорбент. Представеният теоретичен анализ на методите и апаратите за пречистване на отпадъчните газове от SO₂ с помощта на двуфазен абсорбент (суспензия на CaCO₃), показва, че процесът на практика е физическа абсорбция и съпротивленията на масопренос в газовата и течната фази са 44% и 56% съответно. При тези условия се предлага нов патент, при който оптимизацията на процеса се реализира в двузонова колона, където горната зона е физическа абсорбция в система с капки газ-течност, а долната зона е физическа абсорбция в система с мехурчета течност-газ.

- 8. Boyadjiev, Chr., Doichinova, M., Popova-Krumova, P., & Boyadjiev, B. (2015). On the gas purification from low SO₂ concentration. 2. Two-steps chemical absorption modeling. Int. J. Eng. Res, 4 (10), 557-561. ISSN: 2347-5013**

Резюме: Представено е моделирането на абсорбция на газ в нов колонен апарат за пречистване на отпадъчни газове от SO_2 , използващ двуфазен абсорбент (суспензия $\text{CaCO}_3 / \text{H}_2\text{O}$). Процесът се осъществява в тризонна колона. В горната зона се осъществява физическа абсорбция в системата капки газ-течност и конвективния пренос в газовата фаза води до намаляване на съпротивленията на масопренос в тази фаза. В средната зона се извършва химическа абсорбция в системата мехурчета течност-газ и конвективния пренос в течната фаза води до намаляване на съпротивленията на масопренос в тази фаза. Големият обем на течността в средната зона води до увеличаване на времето за химическа реакция и в резултат на това се осъществява по-нататъшно намаляване на съпротивленията на масопренос в течните фази. Третата зона е резервоарът на колоната, където протича само химичната реакция.

9. Boyadjiev, C., Boyadjiev, B., Doichinova, M., & Popova-Krumova, P. (2015). Co-Current apparatus for gas purification from SO_2 . Recent Innovations in Chemical Engineering (Formerly Recent Patents on Chemical Engineering), 8(1), 25-29.

Резюме: Представен е нов патентован правотоков апарат за пречистване на газове от SO_2 . В сравнение с противоточните газови абсорбери, скоростта на газа в павоточния апарат се увеличава 5-6 пъти и в резултат на това диаметърът на колоната намалява повече от 2 пъти. Новият подход за моделиране на колонните апарати е използван за моделиране на абсорбцията на SO_2 в правоточен апарат. Използва се конвекционно-дифузионният модел за качествен анализ и идентифициране на механизма на процеса. Представен е моделът на средните концентрации за количествен анализ.

10. Boyadjiev, Chr., Boyadjiev, B., Popova-Krumova, P., & Doichinova, M. (2015). An innovative approach for adsorption column modeling. Chemical Engineering & Technology, 38 (4), 675-682.

Резюме: Представен е нов метод за моделиране на физична и химична адсорбция в колонни апарати. Получен е модел на конвекция-дифузия в приближенията на механиката на непрекъснатите среди, където математическата точка е еквивалентна на средния

елементарен обем, който е достатъчно малък по отношение на обема на колоната и в същото време достатъчно голям по отношение на междумолекулните обеми на средата. Създаденият модел от конвекционно-дифузионен тип позволява извършването на качествен анализ на процеса и получаване на ефекта на радиалната неравномерност на скоростта в колоната. Приложен е модел на средните концентрации за количествено описание на физична и химична адсорбция в колонния апарат. Описани са методите за решаване на моделните уравнения и идентифициране на параметрите в модела.

11. Boyadjiev Chr., Doichinova M., Popova-Krumova P., & Boyadjiev B. (2014). Intensive column apparatus for chemical reactions. Open Access Library Journal, 1 (3), 1-9.

Резюме: Представено е решение на проблема с интензификацията на колонните химични реактори в приближението на механиката на непрекъснатите среди. Анализирани са влиянието на радиалната неравномерност на разпределението на скоростта, влиянието на тангенциалния поток и едновременните процеси на масо- и на топлопренасяне. Представен е теоретичен анализ на едновременните процеси на масо- и топлопренасяне в колонни химични реактори.

12. Boyadjiev, C., Doichinova, M., Popova-Krumova, P., & Boyadjiev, B. (2014). On the gas purification from low SO₂ concentration. Recent Innovations in Chemical Engineering (Formerly Recent Patents on Chemical Engineering), 7(1), 39-46.

Резюме: Изгарянето на твърдо гориво в топлоцентралите, които използват богати на сяра горива, поставя проблема с отстраняването на SO₂ от отпадъчните газове. Този проблем се усложнява от факта, че е необходимо да се пречистват огромни количества газ с ниска концентрация на SO₂. Огромните количества газ изискват апарати с големи размери, които е възможно да бъдат намалени, ако степента на абсорбция е максимална. Теоретичният анализ на методите за пречистване на отпадъчните газове от SO₂, с помощта на двуфазен абсорбент (суспензия на CaCO₃) показва, че процесът на практика е физическа абсорбция и съпротивленията на масопренос в газовата и течната фази са 44 % и 56 %, съответно. При

тези условия се предлага нов патент, където процесът на оптимизация се реализира в три зони в колоната, където горната зона е физическа абсорбция в система с капки газ-течност, средната зона е физическа абсорбция в система с мехурчета течност-газ и химическата реакция протича в долната част на колоната. Конвективно-дифузионният тип модели позволява да се създадат модели на средните концентрации и да се даде количествено описание на процесите на абсорбция.

13. Doichinova, M., Popova-Krumova, P., Boyadjiev, Chr., & Boyadjiev, B. (2014). Gas Purification from SO₂ in Thermal Power Plants. Chemical Engineering & Technology, 37 (7), 1243–1250.

Резюме: Изгарянето на твърдо гориво в топлоелектрически централи, които използват богати на сяра горива, поставя проблема с отстраняването на SO₂ от отпадъчните газове. Освен това е необходимо пречистване на огромни количества газ с ниска концентрация на SO₂. Максималната степен на абсорбция може да намали размера на апаратите. Теоретично е анализирано пречистването на газ от нискоконцентриран SO₂ при физична и химична абсорбция. За създаване на модели на средните концентрации и за количествено описание на абсорбционните процеси се използват модели на конвекция-дифузия. Теоретичният анализ на методите и устройствата за пречистване на отпадъчни газове от SO₂ чрез суспензия на CaCO₃ показва, че процесът на практика е физическа абсорбция.

14. Popova-Krumova, P., Yankova, S., & Ilieva, B. (2013, December). Mathematical modeling of glycerol biotransformation. In AIP Conference Proceedings (Vol. 1570, No. 1, pp. 74-79). American Institute of Physics. <http://dx.doi.org/10.1063/1.4854744>

Резюме: Представен е метод за математическо моделиране на биотрансформация на глицерол от *Klebsiella oxytoca*. Глицеролът е възобновяем ресурс, тъй като се образува като страничен продукт от производството на биодизел. Поради големия обем на производството е необходимо да се разработи технология, която превръща тези отпадъчни продукти в продукти с висока стойност (1,3-пропандиол; 2,3-бутандиол). Кинетичният модел на този процес се състои от много уравнения и параметри. Минимизирането на

функцията на най-малките квадрати ще се използва за определяне на параметрите в модела. В случаите на идентифициране на параметри в многопараметрични модели, минимизирането на функцията на най-малките квадрати е много трудно, тъй като тя е многоекстремална. Това е основният проблем при минимизирането на многоекстремална функция, който ще бъде решен посредством йерархичен подход, използвайки полиномна апроксимация на експерименталните данни.

15. Doichinova, M., & Popova-Krumova, P. (2013, December). Modeling of column apparatuses: A review. In AIP Conference Proceedings (Vol. 1570, No. 1, pp. 45-53). American Institute of Physics. <http://dx.doi.org/10.1063/1.4854741>

Резюме: Тази статия представя метод за моделиране на базата на физическите приближения на механиката на непрекъснатите среди, които са разработени за процеси в колонни апарати. Този метод включва дифузионен тип модел за моделиране на масопренасяне с химическа реакция в колонни апарати със и без циркулационни зони. Дифузионният тип модел се използва и за моделиране на мащабния ефект в колонни апарати. Проучването показва, че предложеният метод на предложението е възможност за изследване на влиянието на радиалната неравномерност на разпределението на скоростта върху ефективността на процеса, влиянието на ширините на зоните върху ефективността на масопреноса в колоната. Методът за моделиране на колонни апарати може да се използва за моделиране на физична и химична абсорбция, химическа адсорбция, хомогенни и хетерогенни (каталитични) химични реакции и реактори „airlift“ за химични и фотохимични реакции.

16. Boyadjiev Chr., Doichinova M., & Popova P. (2012). On the SO₂ Problem in Power Engineering. Transactions of Academenergo, 2, 44-65.

Резюме: Представен е теоретичен анализ на абсорбцията на SO₂ с алкални абсорбенти в колони с пълнеж, в случаите на едно- и двуфазни абсорбенти. Анализирана е кинетиката на абсорбцията в случаите на необратими химични реакции на базата на качествен анализ на

математичния модел. Използват се дифузионен тип модел и модел на средните концентрации за моделиране на абсорбцията на газ в колонни апарати.

17. Popova, P., & Boyadjiev, Chr. (2010). On the modeling of moisture adsorption in a packed bed. Journal of International Scientific Publication: Materials, Methods and Technologies, 4 (2), 105-111, Sunny Beach, Bulgaria.

Резюме: Тази статия представя математичен модел, който описва процеса на пренос на влага от слоя адсорбент и въздуха, филтриран през слоя. Моделът на колоната с пълнежен слой взема под внимание преноса на маса в слоя, както и водната дифузия и адсорбция в нов композитен сорбент „CaCl₂/алуминиев оксид“. Моделът се прилага за описание на концентрацията на парите на изход от експерименталната инсталация за регенериране на влага във вентилационни системи, която наскоро беше предложена, изградена и тествана. Сорбционното равновесие на водната пара върху новия сорбент е изследвано, за да се използва като входен параметър в модела. Доброто съответствие между експерименталните и изчислителните данни показва, че моделът адекватно отразява основните физични и химични характеристики на процесите на регенерация. Следователно може да се използва за моделиране на мащабния ефект.

18. Doichinova, M., Popova, P., & Boyadjiev, Chr. (2010). Mass Transfer in counter-current flows. Transactions of Academenergo, 4, 4-22.

Резюме: Направен е теоретичен анализ на поток газ-течност в режим на противоток в ламинарни гранични слоеве с плоска фазова граница. Получените числени резултати за разсейването на енергията, скоростта на масопреносяне и тяхното съотношение са сравнени с аналогични резултати за съпътстващи течения. Предложен е дифузионен тип модел за моделиране на масопреноса с химична реакция в колонни апарати в случаите на наличие на циркулационни зони. Наличието на възходящ и низходящ поток (промяната на посоката на скоростта в този течен противоток) води до използването на три координатни системи. Предложен е итеративен алгоритъм за изчисляване на разпределението на концентрацията.

Изследвано е влиянието на ширината на зоните върху ефективността на маспреноса в колоната.

- 19. Popova, P., & Boyadjiev, Chr. (2008). About microalgae growth kinetics modeling. Chemical and Biochemical Engineering Quarterly, 22 (4), 491-497.**
<https://doi.org/10.15255/CABEQ.2014.344>

Резюме: Представен е метод за моделиране на кинетиката на растеж на микроводорасли. Параметрите на модела са получени с помощта на експериментални данни само за концентрацията на биомасата. Получена е връзката между концентрацията на биомасата и концентрацията на CO₂ в течната фаза. Предложеният модел е в добро съответствие с експерименталните данни. Представеният метод е приложим за различни фотосинтезни процеси.

- 20. Popova P., & Boyadjiev Chr. (2008). Hierarchical approach for parameter identification of multiparameter models. Biochemical Engineering Journal, 39, 397-402. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.bej.2007.09.014>**

Резюме: Анализирани са проблемът за идентифициране на параметри в многопараметрични модели на сложни кинетични процеси. В този случай минимизирането на функцията на най-малките квадрати е много трудно, тъй като тя е многоекстремална. Решението на проблема е да се получат много добри начални стойности на моделните параметри. Полиномната апроксимация на експерименталните данни позволява да се предложи йерархичен подход за получаване на началните стойности на параметрите в областта на глобалния минимум, като се използва метод на последователни приближения. Методът за параметрична идентификация на многопараметрични модели е тестван за моделиране на ферментационен процес. Стойностите на параметрите на модела са получени на базата на реални експериментални данни. Получените резултати показват намаляване на дисперсията на грешката на модела на всяко следващо йерархично ниво и добро съответствие с експерименталните данни на последното ниво.

- 21. Aristov, Yu., Mezentsev, I., Mukhin, V., Boyadjiev, Chr., Doichinova, M., & Popova, P. (2006, September). New approach to regenerate heat and moisture in a ventilation system: Experiment. In 11th Workshop on “Transport Phenomena in Two-Phase Flow” Proceedings, Bulgaria, (pp. 77-85).**

Резюме: За страни със студен климат голямата разлика през зимата между вътрешни и външни температури води до а) големи загуби на топлина във вентилационните системи; б) замръзване на влагата на изхода на системите и в) голямо намаляване на вътрешната влажност. Тук представяме и обсъждаме нов подход за регенериране на топлина и влага във вентилационни системи в студен климат, който позволява разрешаването на тези проблеми. Методът е тестван в климатичните условия на Южен Сибир (зима 2005-2006 г.). Нов композитен десикант „CaCl₂ в алуминиев оксид“ беше използван като воден буфер и показва по-добра производителност от обикновените адсорбенти. Разработен е нов математически модел на процеса, за да опише получените експериментални данни, да оптимизира работата и да реши проблемите с мащабирането. Разглеждат се технически, икономически и социални аспекти на този подход.

- 22. Boyadjiev, Chr., Doichinova, M., Popova, P., & Aristov, Yu. (2006, September). New approach to regenerate heat and moisture in a ventilation system: 2. Modeling. In 11th Workshop on “Transport Phenomena in Two-Phase Flow” Proceedings, Bulgaria, (pp. 85-93).**

Резюме: Представен е математичен модел на колона с пълнеж, който отчита топло- и масообмена в слоя, както и хемосорбцията на газа от нов композитен адсорбент. Моделът от дифузионен тип се използва за описание, анализиране и оптимизиране на ново устройство *Ventireg* за регенериране на топлина и влага във вентилационни системи, което беше предложено наскоро. Въвеждането на средната концентрация и температура позволява моделирането мащабния ефект. Крайната цел е да се изпълнят стандартите за качество на вътрешния въздух и спестяване на енергия в такива жилища.

- 23. Popova, P., & Boyadjiev, Chr. (2005, September). On the Modeling of Fermentation Systems. In 10th Workshop on “Transport Phenomena in Two-Phase Flow” Proceedings, Bulgaria, (pp. 149-158).**

Резюме: Предложен е метод за моделиране на ферментационни системи. Полиномната апроксимация на експерименталните данни позволява използването на йерархичен подход за идентифициране на параметрите на модела. Получени са точните стойности на моделните параметри на базата на реални експериментални данни.

- 24. Popova, P., & Boyadjiev, Chr. (2004, September). On the regularization of the parameter identification problems, In 9th Workshop on “Transport Phenomena in Two-Phase Flow” Proceedings, Bulgaria, (pp. 145-151).**

Резюме: Решението на параметричната идентификационна задача чрез минимизиране на функцията на най-малките квадрати не е правилно в случаите, когато обратната задача е некоректна или съществено некоректна, т.е. в случаите на чувствителност на решението поради грешки на „експерименталните“ данни. Сравнителният анализ на методите за минимизиране показва влиянието на допълнително условие за регулиране на решението.