

На правах рукописи

Маковская Юлия Владимировна

**Моделирование процесса инкапсуляции
в псевдооживленном слое и
прогнозирование качества покрытий**

05.17.08 Процессы и аппараты химических технологий

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени

кандидата технических наук

Москва – 2011

Работа выполнена в Российском химико-технологическом университете имени Д.И. Менделеева

Научный руководитель доктор технических наук, профессор
Меньшутина Наталья Васильевна

Официальные оппоненты: доктор технических наук, профессор,
заведующий кафедрой «Автоматизированное
конструирование машин и аппаратов»,
Московский государственный университет
инженерной экологии,
Тимонин Александр Семенович

кандидат технических наук,
преподаватель, Негосударственное
образовательное учреждение
Учебный центр «Сетевая Академия»
Гузев Олег Юрьевич

Ведущая организация: **Московский государственный университет
тонких химических технологий имени
М.В. Ломоносова (г. Москва)**

Защита состоится «17» ноября 2011 года в 14-00 на заседании диссертационного совета Д 212.204.03 при РХТУ им. Д.И. Менделеева (125047, г. Москва, Миусская пл., д. 9) в конференц-зале.

С диссертацией можно ознакомиться в Информационно-библиотечном центре РХТУ им. Д.И. Менделеева.

Автореферат диссертации разослан «___» октября 2011 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета Д 212.204.03

(Женса А.В.)

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы. В настоящее время в химической и других отраслях промышленности огромное внимание уделяется модернизации производства, совершенствованию технологий, возможности быстрой и эффективной переориентации на новую продукцию.

В этом свете большой перспективностью обладают универсальные способы модификации свойств продуктов. Одним из таких способов является заключение целевого материала в функциональную оболочку. Технология инкапсуляции путем нанесения на исходное вещество функционального покрытия, свойства которого определяют задачи дальнейшего использования инкапсулируемого продукта, широко распространена в таких отраслях химической промышленности, как агрохимия, общая химия, химия лаков и красок, синтетическая химия и многих других. Инкапсуляция позволяет улучшать и модифицировать свойства, расширять область применения удобрений, пестицидов, семян, пигментов и красителей, фармацевтических препаратов, моющих средств, катализаторов, огнеупорных и взрывчатых веществ. Несмотря на успешное применение технологии инкапсуляции в псевдооживленном слое во многих областях промышленности, масштабирование и оптимизация этих процессов вызывают серьезные затруднения.

Разработка математического описания, позволяющего сократить период подбора условий проведения процесса, потери дорогостоящего материала во время экспериментальных исследований и предсказать качество инкапсулированного продукта, имеет большую ценность как для разработки новых технологий, так и для модернизации работающих производств.

Работа выполнялась в соответствии с заданием Министерства образования и науки РФ в рамках ФЦНТП «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007-2012 годы»: ГК № 02.513.11.3359 «Индустриализация технологий получения наночастиц и наноструктурированных материалов как основы лекарственных препаратов нового поколения»; при поддержке Фонда содействия развитию малых форм предприятий в научно-технической сфере, программа «Участник молодежного научно-инновационного конкурса» (2009 – 2010 гг.).

Цель работы заключается в исследовании и моделировании процесса инкапсуляции в псевдооживленном слое, что позволит рассчитывать параметры проведения процесса и прогнозировать качество покрытия. Для достижения указанной цели были поставлены и решены следующие научно-технические задачи:

1. Проведен системный анализ явлений, протекающих на микроуровне в процессе инкапсуляции в псевдооживленном слое, и учет их влияния на качество покрытия.

2. Исследован ряд объектов инкапсуляции и определен коридор допустимых значений параметров проведения процесса, проведены экспериментальные и аналитические исследования по инкапсуляции в псевдооживленном слое согласно разработанным общим методикам с использованием методов планирования многофакторного эксперимента. Исследования полученных продуктов включали определение насыпной плотности, остаточного влагосодержания, сыпучести, оценку качества поверхности продукта, исследования гранулометрического состава продукта и определение эффективности процесса по нанесенному полимерному составу.

3. Проведены факторный и регрессионный анализы результатов исследований и выявлены ключевые факторы проведения процесса, оказывающие наибольшее влияние на качество продукта.

4. Разработан комплексный подход к математическому описанию процесса инкапсуляции, в рамках которого сформулирована математическая модель массо- и теплообмена для расчета количественных показателей процесса и модель на основе искусственной нейронной сети для прогнозирования качества получаемого покрытия.

5. Создан компьютерный программный комплекс на основе разработанного математического описания процесса инкапсуляции в псевдооживленном слое для расчета параметров проведения процесса и прогнозирования качества покрытия.

Научная новизна. Впервые разработан комплексный подход к математическому моделированию сложного гетерогенного трехфазного (твердое, жидкость, газ) процесса инкапсуляции в псевдооживленном слое, описывающий различные явления несколькими математическими методами. Подход основан на сочетании статистических методов для выявления ключевых параметров проведения процесса, модели массо- и теплообмена с учетом гидродинамики для расчета количественных параметров проведения процесса и нейросетевой модели прогнозирования качественных характеристик продукта.

Разработана математическая модель массо- и теплообмена при инкапсуляции с учетом гидродинамики псевдооживленного слоя, явлений столкновения капель с частицами и адгезии их к поверхности, кинетики сушки полимерного раствора на поверхности частиц. Разработана нейросетевая модель

для прогнозирования качества покрытия, получаемого в процессе инкапсуляции в псевдооживленном слое. Комплекс разработанных математических моделей позволяет проводить расчет параметров проведения процесса и прогнозирование качества продукта, расчет продолжительности процесса для достижения заданной толщины покрытия, сокращение экспериментальных исследований, расчет и минимизацию потерь наносимого материала, масштабирование технологии инкапсуляции в псевдооживленном слое.

Практическая ценность. Проведен системный анализ процессов и явлений, протекающих на микроуровне при инкапсуляции в псевдооживленном слое. Проведены факторный и регрессионный анализы влияния параметров проведения процесса на качество продукта. На основании результатов анализа выявлены **ключевые** для математического описания параметры проведения процесса (температура воздуха, концентрация и расход диспергируемого полимерного раствора) и ключевые характеристики качества продукта.

Создан программный комплекс для расчета параметров проведения процесса инкапсуляции в псевдооживленном слое и прогнозирования качества инкапсулированного продукта, позволяющий снизить потери дорогостоящего материала, сократить время проведения процесса и количество экспериментальных исследований.

Апробация. Основные результаты диссертационной работы были доложены на Международной конференции молодых ученых по химии и химической технологии, Москва, 2008 – 2010 гг.; XVI Международной конференции по инкапсуляции, Дублин, 2008 г.; Международном симпозиуме по сушке «IDS-2008», Хайдарабад, 2008 г.; 29^{ом} Международном конгрессе по химической технологии «АСНEMA-2009», Франкфурт, 2009 г.; XXII Международной конференции «Математические методы в технике и технологиях ММТТ-22», Псков, 2009 г.; Европейском симпозиуме по информационным технологиям и управлению «ESCAPE», 2009 – 2010 гг.; 8^{ом} Мировом Конгрессе по химической технологии «WCCE-8», Монреаль, 2009 г.; 4ой Международной конференции по сушке «NDC 2009», Рейкьявик, 2009 г.; Польском симпозиуме по сушке «PDS XII», Лодзь, 2009 г.; Международной конференции РХО им. Д.И. Менделеева «Ресурсо- и энергосберегающие технологии в химической и нефтехимической промышленности», Москва, 2009 г.; Международной конференции в рамках X Московского Международного салона инноваций и инвестиций, Москва, 2010 г.; Международной конференции по

сушке «NDC 2011», Хельсинки, 2011 г., где работа была отмечена наградой конференции «Best Poster at NDC 2011».

Публикации. По теме диссертации опубликована 21 печатная работа, в том числе 5 работ в ведущих рецензируемых журналах, определенных Высшей аттестационной комиссией.

Объем и структура работы. Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы из 175 наименований. Общий объем составляет 199 страниц печатного текста, включая 28 таблиц и 82 рисунка.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении отражена и обоснована актуальность поставленной задачи.

В первой главе проведен обзор процессов и аппаратов для инкапсуляции в псевдооживленном слое, используемых в химической технологии. Проведен обзор существующих подходов к математическому моделированию процесса инкапсуляции как с количественной, так и с качественной стороны. В ходе литературного обзора было установлено, что инкапсуляция в псевдооживленном слое – востребованная и перспективная технология, для описания которой отсутствуют общие математические модели.

В соответствии с целью работы и на основании результатов анализа литературы была сформулирована постановка задачи исследования и намечены этапы ее решения (рис. 1).

Во второй главе проведен системный анализ процессов, происходящих на микроуровне в ходе процесса инкапсуляции в псевдооживленном слое, проанализирована степень контролируемости каждого из них, и выбраны подходы к математическому моделированию рассмотренных явлений. Определены ключевые явления, протекающие на микроуровне, которые должны быть учтены в математическом описании процесса (рис. 2).

На основании проведенного анализа поставлена задача проведения комплекса экспериментальных исследований с применением методов планирования многофакторного эксперимента с целью сокращения количества учитываемых явлений и качественных характеристик при математическом моделировании процесса инкапсуляции в псевдооживленном слое.



Рис. 1. Общая стратегия решения поставленной задачи

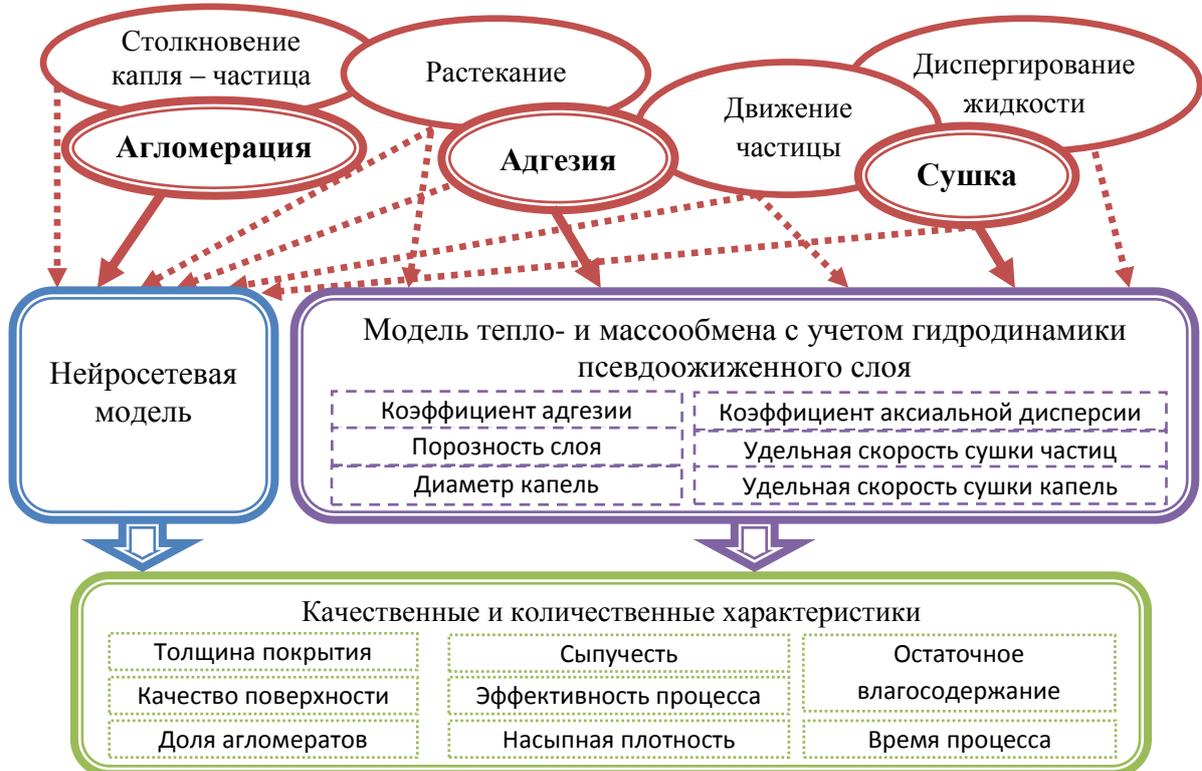


Рис. 2. Явления, протекающие на микроуровне, и математическое моделирование с учетом их влияния на качество продукта

В третьей главе представлен проведенный комплекс экспериментальных и аналитических исследований процесса инкапсуляции частиц-плацебо из микрокристаллической целлюлозы с использованием методов многофакторного планирования, в котором варьировались расход и температура псевдоожигающего воздуха, концентрация и расход полимерного раствора, размер инкапсулируемых частиц и полимерное покрытие.

Была проведена серия предварительных исследований по установлению коридора допустимых значений параметров проведения процесса инкапсуляции. В установленных диапазонах проведено 55 экспериментов по инкапсуляции в два полимерных покрытия на основе сополимеров метакриловой кислоты Kollicoat MAE 100P (BASF®) и Acryl-EZE (Colorcon®). Для унификации исследований по инкапсуляции частиц в покрытия различного состава и обобщения результатов в единую систему были разработаны общие методики проведения экспериментальных и аналитических исследований.

Экспериментальные исследования проводились в аппарате псевдоожигенного слоя Hüttlin Mycrolab (рис. 3).



Рис. 3. Лабораторная установка Hüttlin Mycrolab, OYSTAR GmbH

Псевдоожигенный слой в аппарате создается за счет нагнетания воздуха в нижнюю часть рабочей камеры через газораспределительную решетку. В ходе процесса в слой частиц подается полимерный раствор, который диспергируется при помощи пневматической форсунки, установленной в центре газораспределительной решетки. Процесс периодический, после нанесения требуемого количества раствора прекращается подача воздуха, и полученный инкапсулированный продукт выгружается для исследований. Процесс

формирования покрытия на частицах при инкапсуляции представлен на рис. 4.

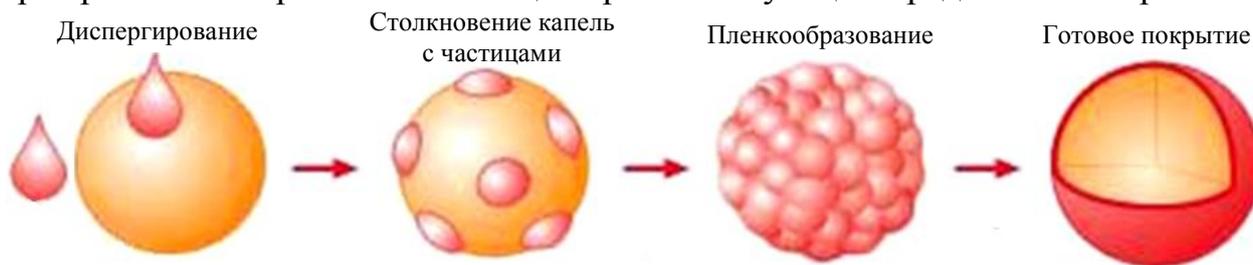


Рис. 4. Процесс формирования покрытия

Исследования полученных частиц включали определение остаточного влагосодержания инкапсулированного продукта, измерение сыпучести и насыпной плотности, исследования гранулометрического состава (определение доли агломератов), определение доли нанесенного полимера (эффективность процесса), качественную оценку поверхности, косвенными методами рассчитывалась толщина покрытия. На рис. 5 приведены изображения инкапсулированных частиц и фотография поверхности, полученная при помощи сканирующего электронного микроскопа.

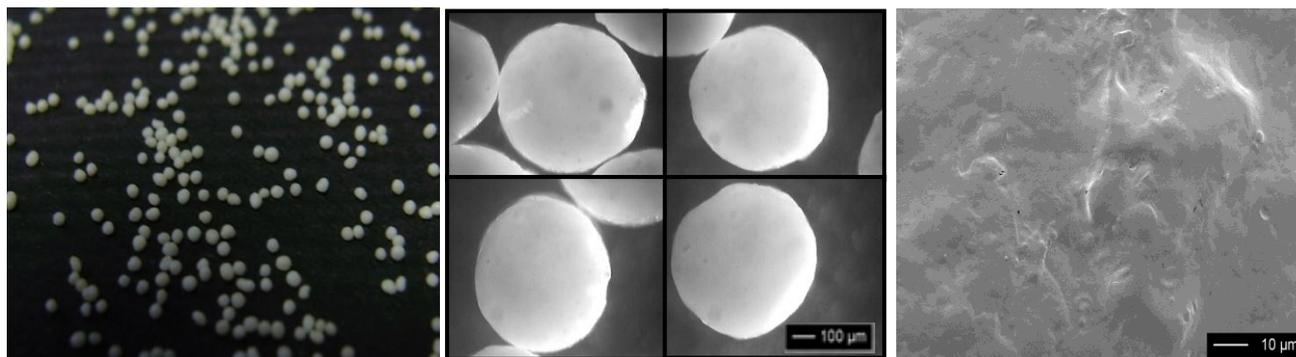


Рис. 5. Внешний вид частиц с покрытием и фотография поверхности

При помощи методов статистики было минимизировано количество проводимых экспериментов и найдены оптимальные условия проведения процесса инкапсуляции в использованные полимерные составы.

На основании результатов регрессионного и факторного анализов определены ключевые параметры проведения инкапсуляции (температура охлаждающего воздуха, расход и концентрация диспергируемого полимерного раствора), оказывающие наибольшее влияние на качество продукта и эффективность процесса, и ключевые показатели качества продукта (доля агломератов, оценка качества поверхности, сыпучесть продукта), которые были включены в нейросетевую модель в качестве входов и выходов соответственно.

В четвертой главе представлено комплексное математическое описание гетерогенного трехфазного (твердое, жидкость, газ) процесса инкапсуляции в

псевдооживленном слое, объединяющее математические подходы на основе уравнений массо- и теплообмена при инкапсуляции и искусственной нейронной сети для прогнозирования качества покрытия. Разработанный комплексный подход заключается в учете различных аспектов протекания процесса инкапсуляции на микроуровне несколькими математическими инструментами и интеграции их в единую систему, позволяющую рассчитывать количественные характеристики процесса и качество получаемого продукта.

В основе разработанного математического описания лежат модель тепло- и массообмена в аппарате, учитывающая кинетику сушки на уровне единичной частицы, адгезию капель к поверхности частиц, гидродинамику потоков, и модель на основе искусственной нейронной сети, прогнозирующая влияние параметров проведения процесса на качество покрытия.

Модель, описывающая тепло- и массообмен в процессе инкапсуляции в псевдооживленном слое, состоит из уравнений изменения влагосодержания для трех взаимодействующих фаз: инкапсулируемых частиц, капель полимерного раствора и воздуха; уравнений, описывающих изменение температуры каждой из трех фаз; уравнения изменения количества полимерного покрытия на частице и уравнения изменения количества капель по высоте слоя. При разработке модели были сделаны следующие допущения:

- Изменение параметров происходит по высоте слоя и во времени, без учета радиальной составляющей.
- Рабочий объем камеры разделен по высоте на n слоёв, каждый из которых характеризуется постоянным объемом и постоянным числом частиц. В каждом слое все фазы идеально перемешаны.
- Поток воздуха перемещается между слоями в режиме идеального вытеснения, порозность слоя по высоте одинакова.
- Частицы монодисперсны, непористые, агломерация отсутствует. Интенсивность перемешивания частиц между слоями описывается коэффициентом аксиальной дисперсии r , который зависит от скорости движения газовой фазы, а также свойств частиц.
- Инкапсуляция характеризуется малой толщиной пленки, масса частиц меняется незначительно, и этим изменением можно пренебречь.

• Капли, получаемые при помощи пневматической форсунки в данном аппарате, имеют узкое распределение по размеру, что позволяет рассматривать их как монодисперсную фазу. Между каплями отсутствуют соударения и слипание, нет налипания на стенках аппарата. Капли движутся через псевдооживленный слой сонаправленно с потоком воздуха.

На рис. 6 представлен характер взаимодействия фаз между собой с учетом принятых допущений, и обозначены основные характеристики состояния фаз, согласно принятой схеме разбиения аппарата на слои.

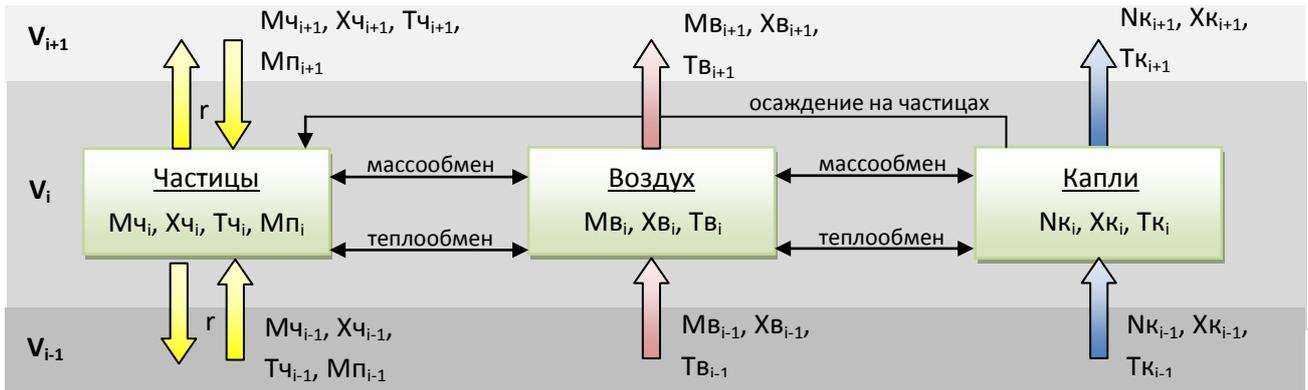


Рис. 6. Схема массо- и теплообмена между фазами

Суммарно систему уравнений математической модели после введения допущений и перехода к обычным дифференциальным уравнениям для каждой из трех фаз в i -ом слое согласно схеме (рис. 6) можно представить в виде:

Изменение удельного влагосодержания частиц:

$$M_q N_q \frac{dX_{q,i}}{dt} = M_q N_q r_{i-1} X_{q,i-1} + M_q N_q r_i X_{q,i+1} - M_q N_q (r_i + r_{i-1}) X_{q,i} - R_{q,i} X_{q,i} M_q N_q + R_i^{ad\omega} X_{k,i} M_q N_q \quad (1)$$

Изменение удельного влагосодержания капель:

$$M_{k,i} N_{k,i} \frac{dX_{k,i}}{dt} = G_{k,i-1} X_{k,i-1} - G_{k,i} X_{k,i} - R_{k,i} N_{k,i} M_{k,i} - R_i^{ad\omega} X_{k,i} N_{k,i} M_{k,i} \quad (2)$$

Изменение удельного влагосодержания воздуха:

$$M_v \frac{dX_{v,i}}{dt} = G_{v,i-1} X_{v,i-1} - G_{v,i} X_{v,i} + R_{q,i} N_q M_q + R_{k,i} N_{k,i} M_{k,i} \quad (3)$$

Изменение удельного содержания полимера на частицах:

$$M_q N_q \frac{dY_i}{dt} = M_q N_q r_{i-1} Y_{i-1} + M_q N_q r_i Y_i - M_q N_q (r_i + r_{i-1}) Y_i + R_i^{ad\omega} (1 - X_{k,i}) M_q N_q \quad (4)$$

Изменение температуры частиц:

$$M_q N_q C_{p,q,i} \frac{dT_{q,i}}{dt} = M_q N_q r_{i-1} C_{p,q,i-1} T_{q,i-1} + M_q N_q r_i C_{p,q,i+1} T_{q,i+1} - M_q N_q (r_i + r_{i-1}) C_{p,q,i} T_{q,i} + \alpha_{q,i} N_q A_q (T_{v,i} - T_{q,i}) - R_i^{ad\omega} N_q M_q C_{p,k,i} (T_{q,i} - T_{k,i}) - R_{q,i} M_q N_q Q_{усч} \quad (5)$$

Изменение температуры капель:

$$M_{k,i} N_{k,i} C_{p_{k,i}} \frac{dT_{k,i}}{dt} = G_{k,i-1} C_{p_{k,i-1}} T_{k,i-1} - G_{k,i} C_{p_{k,i}} T_{k,i} - R_i^{ad\sigma} N_{k,i} M_{k,i} C_{p_{k,i}} T_{k,i} - R_{k,i} N_{k,i} M_{k,i} Q_{ucn,i} + \alpha_{k,i} N_{k,i} A_{k,i} (T_{\theta,i} - T_{k,i}) \quad (6)$$

Изменение температуры воздуха:

$$M_{\theta,i} C_{p_{\theta,i}} \frac{dT_{\theta,i}}{dt} = G_{\theta,i-1} C_{p_{\theta,i-1}} T_{\theta,i-1} - G_{\theta,i} C_{p_{\theta,i}} T_{\theta,i} - \alpha_{\theta,i} N_{\theta,i} A_{\theta,i} (T_{\theta,i} - T_{\theta,i}) - \alpha_{k,i} N_{k,i} A_{k,i} (T_{\theta,i} - T_{k,i}) - R_{k,i} N_{k,i} M_{k,i} Q_{ucn} - R_{\theta,i} N_{\theta,i} M_{\theta,i} Q_{ucn} \quad (7)$$

Изменение количества капель:

$$\frac{dN_{k,i}}{dt} = N_{k,i} - \frac{6}{\pi \rho_{k,i} d_{k,i}^3} R_i^{ad\sigma} N_{k,i} M_{k,i} \quad (8)$$

В уравнениях (1 – 8) приняты следующие обозначения: N – количество капель или частиц; X – удельное содержание влаги, $\text{кг}_{\text{влаг}}/\text{кг}_{\text{сух}}$; r – коэффициент аксиальной дисперсии частиц, с^{-1} ; $R^{ad\sigma}$ – удельная скорость столкновения капель с частицей, $\text{кг}_{\text{капель}}/(\text{кг}_{\text{частиц}} \cdot \text{с})$; R – удельная скорость сушки влаги на частицах или в каплях, $\text{кг}_{\text{исп.влаг}}/(\text{кг} \cdot \text{с})$; Y – удельное содержание покрытия на частицах, $\text{кг}_{\text{полимера}}/\text{кг}_{\text{частиц}}$; M – масса, кг ; G – массовый расход, $\text{кг}/\text{с}$; α – коэффициент теплопередачи, $\text{Вт}/(\text{м}^2 \cdot \text{К})$; Q_{ucn} – удельная теплота испарения воды, $\text{Дж}/\text{кг}$; C_p – удельная теплоемкость, $\text{Дж}/(\text{кг} \cdot \text{К})$; нижние индексы: k – капли, θ – воздух, θ – частицы. Уравнения (1) и (4) приведены без сокращений для сохранения физического смысла членов уравнений.

Система уравнений (1 – 8) была дополнена эмпирическими соотношениями для расчета удельной скорости сушки, удельной скорости оседания капель на частицах в результате адгезии, коэффициента аксиальной дисперсии частиц, коэффициентов теплопередачи, соотношениями для расчета потерь материала и толщины слоя покрытия, массы капель с учетом изменения влагосодержания, а также начальными и граничными условиями.

Скорость оседания капель на частицах в результате адгезии $R^{ad\sigma}$ рассчитывалась согласно эмпирическому соотношению, учитывающему эффективность столкновения капель с частицами χ_k :

$$R^{ad\sigma} = \frac{G_{\text{раствора}}}{M_{\text{загрузки}}} \chi_k, \quad \chi_k = \left(\frac{S_k}{S_k + a} \right)^b, \quad S_k = \frac{\rho_k \cdot v_{\theta} \cdot d_k^2}{\mu_{\theta} \cdot d_{\theta}}$$

где $G_{\text{раствора}}$ – массовый расход раствора, кг/с; χ_k – эффективность столкновения капель с частицами, б/р; S_k – число Стокса для капель, б/р; a и b – эмпирические коэффициенты, зависящие от режима движения газового потока.

Разработанная математическая модель тепло- и массообмена процесса инкапсуляции в псевдооживленном слое учитывает явления столкновения капель с частицами, адгезии их к поверхности, испарения влаги с поверхности частиц и капель, процессы массо- и теплообмена между взаимодействующими фазами и позволяет рассчитывать значения параметров протекания процесса (температуру в слое и на выходе, время процесса) и показатели готового продукта (толщину слоя покрытия, потери материала, влагосодержание материала). Однако данная модель не позволяет предсказать качество покрытия и не учитывает процесс агломерации.

Для прогнозирования качества покрытия в зависимости от параметров проведения процесса использовалась модель на основе искусственной нейронной сети. В качестве входов нейронной сети вводились значения ключевых параметров проведения процесса (температура оживляющего воздуха, расход и вязкость полимерного раствора), и параметры, характеризующие гидродинамический режим в аппарате (размер частиц и расход воздуха). Для расширения возможностей применения нейросетевой модели часть макроскопических параметров задавалась в виде относительных величин. Расход воздуха был отнесен к массе загрузки исходных частиц, расход диспергируемого раствора был отнесен к расходу воздуха. Это позволяет использовать модель для масштабирования процесса.

В качестве выходов нейронной сети использовались ключевые показатели качества продукта (доля агломератов, качество поверхности, оцененное в баллах, сыпучесть продукта). Обучение нейронной сети проводилось на результатах 50 экспериментов. В качестве алгоритма обучения использовался алгоритм обратного распространения ошибки, успешно применяющийся для многослойных перцептронов.

Анализ предсказательной способности 14 нейронных сетей различной структуры проводился путем сравнения результатов тестовых экспериментальных исследований с предсказанными значениями. Была определена структура нейронной сети, наиболее точно прогнозирующей качество продукта в процессе инкапсуляции в псевдооживленном слое, – это сеть с двумя скрытыми нейронными слоями, четыре нейрона в первом слое, три во втором, и

тремя выходами (рис. 7). Сеть данной структуры была использована для прогнозирования качества получаемого покрытия при заданных условиях проведения процесса.

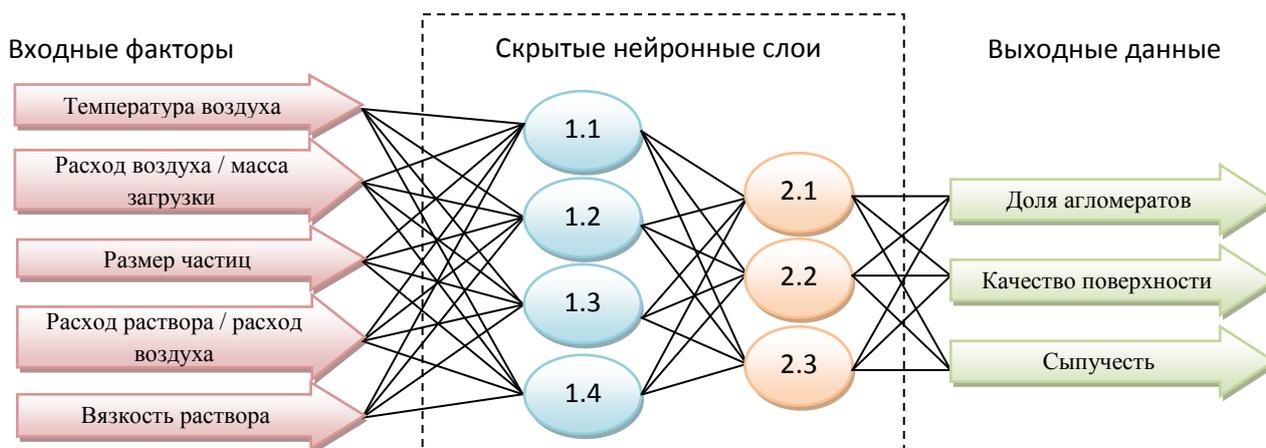


Рис. 7. Структура нейронной сети, встроенной в программный комплекс

На рис. 8 приведены графики сравнения экспериментальных данных с прогнозируемыми по модели значениями качественных показателей продукта для пяти тестовых экспериментов, проведенных дополнительно. Анализ результатов подтверждает адекватность нейросетевой модели установленной структуры.

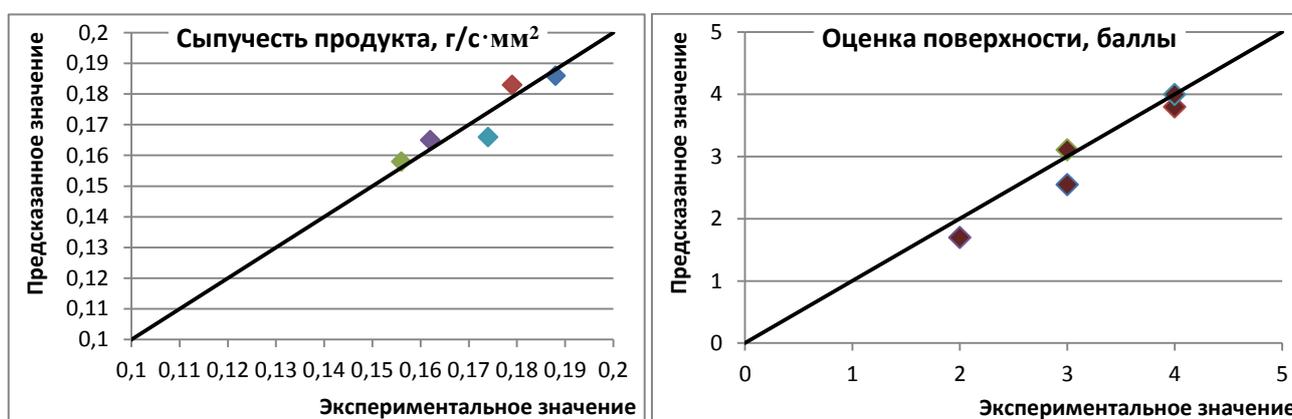


Рис. 8. Экспериментальные и расчетные значения характеристик продукта

Для реализации разработанного математического описания процесса инкапсуляции в псевдооживленном слое был создан программный комплекс, включающий в себя расчетный блок, состоящий из модели тепло- и массообмена для расчета количественных показателей и нейросетевой модели для прогнозирования качества покрытия, блок визуализации результатов расчета и блок данных о физико-химических свойствах трех взаимодействующих фаз. Структура и взаимодействие между основными блоками программного комплекса представлены на рис. 9.

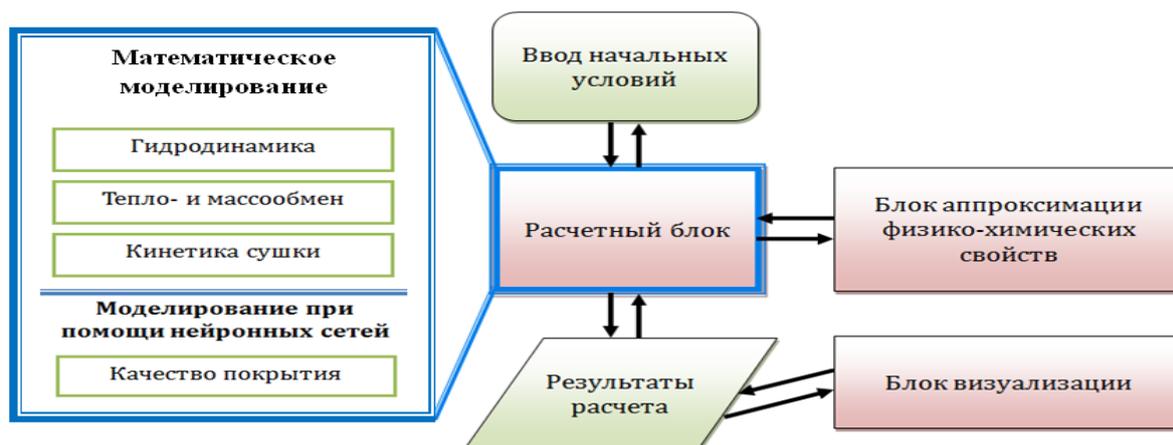


Рис. 9. Структура программного комплекса для математического описания процесса инкапсуляции в псевдооживленном слое

В первом блоке программного комплекса задаются конфигурация аппарата и значения параметров проведения процесса, устанавливаются начальные и граничные условия. Для заданных условий в расчетном блоке при помощи нейросетевой модели происходит прогнозирование качества получаемого продукта. Если качество покрытия не удовлетворяет каким-либо критериям, существует возможность коррекции входных данных для поиска оптимальных параметров процесса. При удовлетворительном качестве покрытия производится расчет по математической модели тепло- и массообмена для трех взаимодействующих фаз (воздух, частицы, капли), решается система дифференциальных уравнений (1 – 8). Расчет параметров процесса проводится в двух циклах. Условием выхода из внешнего цикла является достижение параметра, который задаёт пользователь (конечная толщина полимерной плёнки или время процесса). Во втором цикле, вложенном в первый, ведётся расчет параметров процесса по высоте рабочего объёма камеры аппарата.

Разработанный программный комплекс на основе математического описания процесса инкапсуляции в псевдооживленном слое позволяет рассчитать распределение влагосодержания и температуры для каждой фазы по высоте аппарата и во времени процесса, динамику роста толщины покрытия.

На рис. 10 представлены результаты расчета, полученные при помощи программного комплекса, отражающие динамику изменения температур для трех взаимодействующих фаз при различной температуре входящего воздуха и скорости подачи полимерного раствора (расход воздуха $20 \text{ м}^3/\text{час}$, концентрация раствора 20 % масс., диаметр частиц 1000 мкм).

Условия проведения процесса, при которых температуры взаимодействующих фаз быстрее становятся постоянными (значение не изменяется во времени процесса), обеспечивают качество продукта и снижение доли агломератов, так как отсутствуют условия формирования и затвердевания жидких мостиков между частицами.

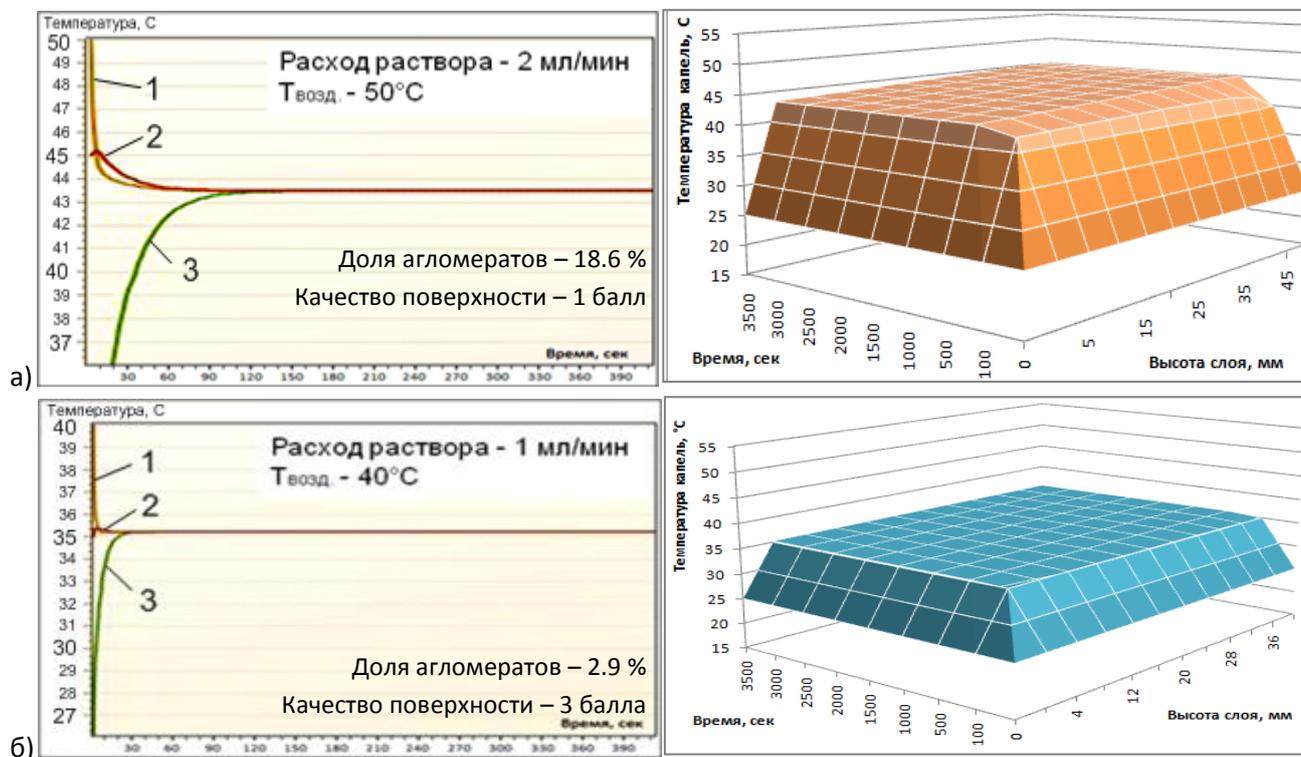


Рис. 10. Динамика изменения температур для каждой фазы (1 – воздух, 2 – частицы, 3 – капли) и изменение температуры капель по высоте и во времени

На рис. 11 представлены графики роста толщины покрытия на инкапсулируемых частицах при различных условиях проведения процесса, а также приведены спрогнозированные характеристики качества продукта.

Увеличение скорости подачи полимерного раствора снижает продолжительность процесса при условии достижения заданной толщины покрытия, но может приводить к увеличению доли агломератов и ухудшению качества поверхности. Производительность можно повысить увеличением концентрации (вязкости) раствора при снижении скорости его подачи, при этом доля агломератов снижается до 1.1 %. Однако повышение вязкости раствора может привести к увеличению потерь по наносимому полимеру и неудовлетворительному качеству поверхности.

Анализ условий проведения процесса инкапсуляции в псевдооживленном слое с целью сокращения времени нанесения покрытия позволил для данного аппарата найти условия проведения процесса (20 %, 40°C, 1.5 мл/мин, 40 м³/час),

при которых за 1.3 часа может быть получен продукт высокого качества. На рис. 12 представлены фотографии частиц, полученных при данных условиях, отражающие высокое качество продукта и равномерное однородное покрытие.

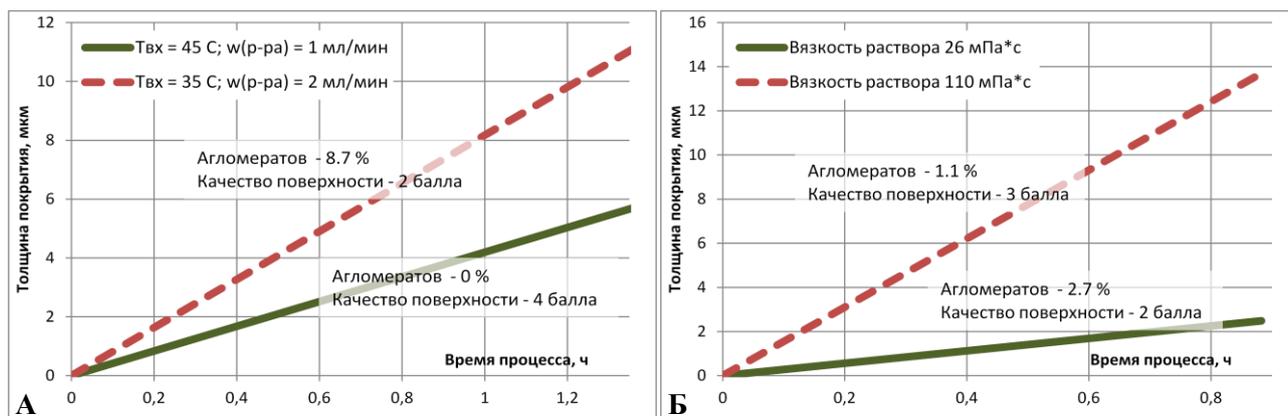


Рис. 11. Динамика изменения толщины покрытия

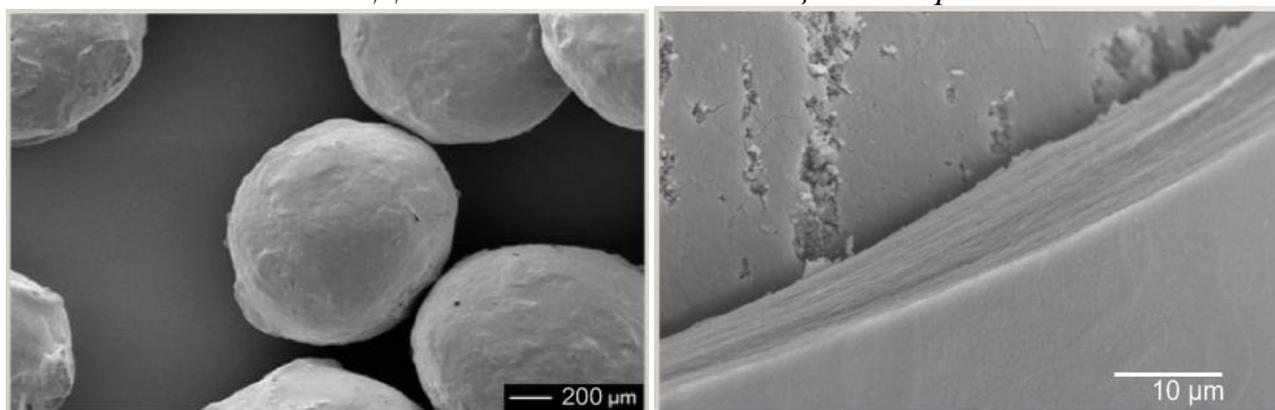


Рис. 12. Фотографии, полученные при помощи сканирующего электронного микроскопа, инкапсулированных частиц и среза покрытия

Созданный программный комплекс для расчета, масштабирования и сопровождения научных исследований процесса инкапсуляции в псевдооживленном слое позволяет рассчитать параметры процесса инкапсуляции при производстве различных продуктов и предсказать качество получаемого покрытия, сократить количество экспериментальных исследований, расход материалов и энергии, что имеет большую ценность как для разработки новых технологий, так и для модернизации работающих производств.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ И ВЫВОДЫ

1. Проведен системный анализ явлений, протекающих на микроуровне в процессе инкапсуляции в псевдооживленном слое, и учет их влияния на качество продукта, определены ключевые явления для математического описания.

2. Проведен комплекс экспериментальных и аналитических исследований процесса инкапсуляции в псевдооживленном слое согласно разработанным

общим методикам с использованием методов планирования многофакторного эксперимента, включающий 55 экспериментов по инкапсуляции и исследования полученного продукта, в том числе определение насыпной плотности, остаточного влагосодержания, сыпучести, исследование гранулометрического состава, оценку качества поверхности частиц и определение эффективности процесса по наносимому полимерному составу.

3. Проведены факторный и регрессионный анализы результатов экспериментальных и аналитических исследований и определены ключевые параметры проведения процесса, оказывающие наибольшее влияние на качество продукта.

4. Разработан комплексный подход к математическому описанию процесса инкапсуляции, основанный на объединении и интеграции в единую систему модели массо- и теплообмена для расчета количественных параметров проведения процесса и нейросетевой модели для прогнозирования качественных характеристик продукта.

5. Разработана математическая модель массо- и теплообмена в ходе процесса инкапсуляции в псевдооживленном слое с учетом гидродинамики, адгезии капель к поверхности частиц и кинетики сушки полимерного раствора.

6. Разработана математическая модель на основе искусственной нейронной сети для прогнозирования качества покрытия, получаемого при инкапсуляции в псевдооживленном слое.

7. Создан программный комплекс, основанный на разработанном математическом описании процесса инкапсуляции в псевдооживленном слое, для расчета параметров проведения процесса и прогнозирования качества покрытия, визуализации и обработки полученных результатов.

8. При помощи программного комплекса проведены расчеты параметров процесса инкапсуляции в псевдооживленном слое и прогнозирование качества покрытия, подтверждена адекватность математических моделей, лежащих в основе комплекса, и возможность применения программного комплекса для проектных задач, сопровождения научных исследований, масштабирования технологии инкапсуляции в псевдооживленном слое.

СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. **Маковская Ю.В., Голомидов Е.С., Гордиенко М.Г., Меньшутина Н.В. Программный комплекс для расчета процесса нанесения покрытия в псевдооживленном слое // Программные продукты и системы. 2011. №2. С. 151 – 155.**

2. **Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2011615761** «Программный комплекс для расчета и масштабирования процесса нанесения покрытия в аппаратах псевдооживленного слоя «Coating» / Маковская Ю.В., Голомидов Е.С., Гордиенко М.Г., Меньшутина Н.В. // Заявка № 2011613944. Дата регистрации 22.06.2011.
3. Makovskaya Y., Gordienko M., Golomidov E., Goncharova-Alves S., Menshutina N. Investigation of Different types of Artificial Neural Networks for Modelling of Coating Quality // 5th Nordic Drying Conference: CD-ROM Proceedings of Conference, электр. опт. диск. – Helsinki, Finland, 2011. 5 p.
4. **Маковская Ю.В., Голомидов Е.С., Гордиенко М.Г., Матасов А.В. Информационная интеллектуальная система для ресурсоэнергосбережения и прогнозирования качества продукта в процессах нанесения покрытия в псевдооживленном слое // Химическая промышленность сегодня. 2011. №6 /в печати/. 3 с.**
5. **Гордиенко М.Г., Маковская Ю.В., Касимова А.О., Меньшутина Н.В. Исследование и оптимизация процесса инкапсуляции лекарственного вещества в полимерную оболочку в аппарате псевдооживленного слоя // Вестник МИТХТ. 2010. Т. 5, №1. С. 93 – 97.**
6. Makovskaya Y.V. Menshutina N.V., Gordienko M.G., Didenko A.A. Integrated System Approach To Modeling Of Optimal Quality Of Pharmaceutical Encapsulated Products // 20th European Symposium on Computer Aided Process Engineering: CD-ROM Proceedings of Symposium, электр. опт. диск. 2010. Pp. 1509 – 1513.
7. Голомидов Е.С., Маковская Ю.В. Информационная система выбора оборудования и технологии сушки // Международная конференция с элементами научной школы для молодежи «Инновационные материалы и технологии в химической и фармацевтической отраслях промышленности»: сборник трудов. – М.: 2010. С. 106 – 107.
8. Голомидов Е.С., Маковская Ю.В. Информационный портал по технологии сушки // Успехи в химии и химической технологии. Том XXIV, № 1 (106). 2010. С. 55 – 58.
9. Шигорина А.С., Маковская Ю.В., Касимова А.О., Гордиенко М.Г. Исследование и моделирование процесса инкапсуляции методом нанесения пленочного покрытия // XXII Международная конференция «Математические методы в технике и технологиях»: сборник трудов конференции. 2009. Т. 9. С. 118 – 120.
10. Menshutina N.V., Gordienko M.G., Makovskaya Y.V., Kasimova A.O. Fluid-bed layering and enteric-film coating to produce pellets containing phospholipids nanoparticles //ACHEMA – 29th International Exhibition-Congress on Chemical Engineering, Environmental Protection and Biotechnology: Proceedings of Congress. – Frankfurt am Main, Germany, 2009. 6 p.
11. **Меньшутина Н.В., Гордиенко М.Г., Маковская Ю.В., Аванесова А.А., Войновский А.А. Многофункциональное оборудование псевдооживленного слоя для химико-фармацевтической промышленности // Химическая промышленность сегодня. 2009. №6. С. 44 – 48.**

12. Menshutina N.V., Gordienko M.G., Makovskaya J.V., Kasimova A.O., Voinovskiy A.A. System approach to modeling of pharmaceutical integrated processes: drying, layering and coating // Computer Aided Chemical Engineering. 2009. Volume 26. Pp. 501 – 505.
13. Menshutina N.V., Gordienko M.G., Makovskaya J.V., Kasimova A.O. Encapsulation of active substances for production of drug solid dosage form // 8th World Congress of Chemical Engineering: CD-ROM Proceedings of Congress, электр. опт. диск. – Montreal, Canada, 2009. 5 p.
14. Makovskaya Y., Gordienko M., Goncharova-Alves S., Menshutina N. Statistical Mathematical Modelling of Encapsulation of Micellar Formulation // 4th Nordic Drying Conference: CD-ROM Proceedings of Conference, электр. опт. диск.. – Reykjavik, Iceland, 2009. 5 p.
15. Gordienko M.G., Makovskaya Ju.V., Kasimova A.O., Menshutina N.V. Investigation and optimization of fluid-bed encapsulation // XII Polish Drying Symposium: CD-ROM Proceedings of Symposium, электр. опт. диск. – Lodz, Poland, 2009. Pp. 563 – 567.
16. Маковская Ю.В., Гордиенко М.Г. Исследование качества покрытия при инкапсуляции лекарственных веществ в псевдооживленном слое методами статистики // Успехи в химии и химической технологии. 2009. Т. XXIII, №1 (94). С. 39 – 44.
17. Маковская Ю.В., Зеркаев А.И., Гордиенко М.Г., Меньшутина Н.В. Разработка альтернативного энергоресурсосберегающего способа производства гепатопротекторных препаратов // I-ая Международная конференция РХО им. Д. И. Менделеева «Ресурс- и энергосберегающие технологии в химической и нефтехимической промышленности»: Сб. тезисов докладов. – М.: РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2009. С.142 – 143.
18. Маковская Ю.В., Аванесова А.А., Гордиенко М.Г. Исследование и моделирование процесса инкапсуляции // Успехи в химии и химической технологии. 2008. Том XXII. С. 24 – 29.
19. Makovskaya Y., Gordienko M., Menshutina N. Investigation and mathematical modelling of micellar preparation encapsulation // XVI International Conference on Bioencapsulation: Proceedings of Conference. – Dublin, Ireland, 2008. – 4 p.
20. N. Menshutina, M. Gordienko, Y. Makovskaya, A. Avanesova, R. Obryadin Preparation of microspheres containing micellar nanostructures // International Drying Symposium: Proceeding of Symposium. – Hyderabad, India, 2008. – 5 p.
- 21. Меньшутина Н.В., Гордиенко М.Г., Аванесова А.А., Маковская Ю.В. Разработка и моделирование технологии непрерывной распылительной сушки пробиотиков // Вестник МИТХТ. 2008. Т. 3, №6. С. 45-50.**