



На правах рукописи

Иванов Святослав Игоревич

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ РАСТВОРЕНИЯ И  
ДЕФОРМАЦИИ ТВЕРДЫХ ТЕЛ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ  
ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ**

05.17.08 Процессы и аппараты химических технологий

05.13.18 Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

**АВТОРЕФЕРАТ**

диссертации на соискание ученой степени

кандидата технических наук

Москва 2013

Работа выполнена на кафедре кибернетики химико-технологических процессов  
Российского химико-технологического университета имени Д.И. Менделеева

Научный руководитель: доктор технических наук, профессор  
**Меньшутина Наталья Васильевна**  
Российский химико-технологический  
университет имени Д.И. Менделеева  
профессор кафедры кибернетики  
химико-технологических процессов

Официальные оппоненты: доктор технических наук,  
**Равичев Леонид Владимирович**  
Российский химико-технологический  
университет имени Д.И. Менделеева,  
профессор кафедры управления  
технологическими инновациями

доктор технических наук, профессор,  
**Матвеев Михаил Григорьевич**  
Воронежский государственный  
университет,  
заведующий кафедрой информационных  
технологий управления

Ведущая организация – Воронежский государственный университет инженерных  
технологий

Защита состоится «19» декабря 2013 года в 11:00 на заседании диссертационного  
совета Д 212.204.03 при РХТУ им. Д.И. Менделеева (125047, г. Москва, Миусская пл.,  
д. 9) в конференц-зале университета (ауд.443).

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

Автореферат диссертации разослан «\_\_» ноября 2013 г.

Ученый секретарь  
диссертационного совета Д 212.204.03



А.В. Женса

## **ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ**

### **Актуальность работы**

На сегодняшний день актуальной задачей науки и промышленности является получение новых материалов с заданными свойствами для аэрокосмической отрасли, военно-промышленного комплекса, фармацевтики, строительства и других сфер. Получение новых материалов всегда связано с большим количеством экспериментальных исследований и, как следствие, с большими трудо- и энергозатратами. В поиске составов новых материалов, обладающих определенной структурой и определенными физико-химическими свойствами, важной задачей является разработка математических и компьютерных моделей и реализация их с использованием высокопроизводительных параллельных вычислений, что позволит резко сократить объем экспериментальных исследований. Современное поколение компьютеров позволяет проводить математическое моделирование различных процессов на разных уровнях: нано-, микро- и мезоуровне. Математическое и компьютерное моделирование дает возможность определить область поиска для составов разрабатываемых материалов, что значительно ускоряет и удешевляет сам процесс разработки.

Работа выполнялась в рамках федеральной целевой научно-технической программы «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007-2012 годы: Государственный контракт № 14.514.11.4054 «Разработка методики проведения высокопроизводительных масштабируемых вычислений и программно-алгоритмическая реализация задачи многоуровневого моделирования процессов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов» 2013 г.

**Цель работы** заключается в моделировании процессов растворения и деформации двух типов твердых тел (высокопластичных и хрупких) методом клеточных автоматов с использованием высокопроизводительных параллельных вычислений. Для достижения цели были поставлены следующие научно-технические задачи:

- Экспериментальные исследования процессов растворения и деформации твердых тел на примерах нанокомпозиционных полимерных материалов (высокопластичные тела) и фармацевтических твердых лекарственных форм (хрупкие тела).

- Моделирование структур твердых тел на микроуровне разными способами: равномерным распределением компонентов и генерацией структур модифицированным методом агрегации, ограниченной диффузией (diffusion limited aggregation) с множеством центров кристаллизации (MultiDLA) и «кластер-кластерной» агрегации.
- Моделирование с использованием клеточных автоматов процессов растворения и водопоглощения с учетом многокомпонентного состава твердого тела и сложной геометрии (многослойное покрытие, неправильная форма тела).
- Моделирование с использованием клеточных автоматов процессов деформации при растяжении/сжатии и сдвиге/изгибе для нанокпозиционных пластичных материалов и твердых лекарственных форм, являющихся хрупкими телами.
- Использование высокопроизводительных параллельных вычислений в расчетных задачах моделирования для ускорения расчетов и возможности моделирования реальных систем на микроуровне.
- Создание программного комплекса на основе разработанных моделей.

### **Научная новизна**

- Создана трехмерная модель структур нанокпозиционных полимерных материалов с учетом «жестких» и «мягких» включений с использованием модифицированного метода агрегации, ограниченной диффузией (diffusion limited aggregation) с множеством центров кристаллизации (MultiDLA) и «кластер-кластерной» агрегации. Создана модель генерации фармацевтических твердых лекарственных форм, позволяющая создавать объекты со сложной геометрией и структурой (капсулы, таблетки с многослойным покрытием и т.д.)
- Созданы модели растворения и водопоглощения, позволяющие проводить численное моделирование процесса на микроуровне с использованием высокопроизводительных параллельных вычислений. Созданные модели объединяют в себе несколько типов клеточных автоматов и позволяют предсказывать результат растворения твердого тела с учетом воздействия внешних факторов (среда растворения, обороты мешалки, температура).

- Созданы модели деформации, позволяющие проводить численное моделирование процесса на разных уровнях с использованием высокопроизводительных параллельных вычислений.

Разработанные модели могут использоваться для исследования процессов растворения и деформации твердых тел различных составов и геометрической формы и подбора оптимального соотношения компонентов в твердом теле.

### **Практическая значимость**

Были выявлены ключевые факторы, наиболее сильно влияющие на процессы растворения и деформации. Создан программный комплекс, включающий в себя следующие модули: 1) модуль генерации структур твердых тел; 2) модуль расчета процесса растворения и водопоглощения; 3) модуль расчета процесса деформации; 4) модуль визуализации расчетных данных. Совместно с кафедрой ХТП РХТУ им. Д.И. Менделеева разработана программа и методика экспериментальных исследований и даны рекомендации для выбора оптимального состава полимерных нанокомпозитов, содержащих «жесткие» и «мягкие» включения.

**Достоверность результатов** обеспечивается: большой выборкой экспериментальных исследований процессов растворения и деформации твердых тел современными аналитическими методами; выбором подходов к моделированию; тестированием предлагаемых в работе моделей и алгоритмов на ряде модельных задач; проверкой адекватности разработанных моделей объектов с использованием проведенных экспериментов.

### **Апробация работы**

Апробация работы была проведена на следующих конференциях: 21<sup>th</sup> European Symposium on Computer Aided Process Engineering, Халкидики (Греция), 2011 г., 8<sup>th</sup> European Congress of Chemical Engineering, Берлин, 2011 г.; Десятый международный салон инноваций и инвестиций, Москва, 2010 г.; VI Международный конгресс молодых ученых по химии и химической технологии МКХТ-2010, Москва, 2010 г. Кроме этого, апробация работы была проведена в рамках выполнения Государственного Контракта № 14.514.11.4054 «Разработка методики проведения высокопроизводительных масштабируемых вычислений и программно-алгоритмическая реализация задачи

многоуровневого моделирования процессов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов» 2013 г.

### **Личный вклад автора**

На всех этапах работы автор принимал непосредственное участие в разработке и планировании исследования, построении алгоритмов, написании программ, тестировании и проверке адекватности, интерпретации полученных данных, формулировании выводов, написании материалов для публикаций, написании отчетов по проектам, выступлениях с докладами на конференциях и семинарах.

### **На защиту выносятся:**

- Клеточноавтоматные модели процессов растворения и водопоглощения, позволяющие проводить математическое моделирование как для объектов, имеющих высокую способность к растворению, так и для слаборастворимых твердых тел.

Клеточноавтоматные модели процессов деформации при растяжении/сжатии и сдвиге/изгибе, позволяющие проводить моделирование высокопластичных и хрупких твердых тел со сложной геометрией и многокомпонентным составом.

- Алгоритм генерации структур твердых тел, содержащих «жесткие» и «мягкие» включения, алгоритм генерации структур фармацевтических твердых лекарственных форм, позволяющих создавать объекты со сложной геометрией и структурой.

- Программный комплекс, реализующий указанные модели и алгоритмы для проведения вычислительных экспериментов и визуализации результатов расчетов.

### **Публикации**

Автором было опубликовано 11 печатных работ, из них: 3 – в журналах, рекомендованных ВАК и 5 свидетельств о регистрации программы для ЭВМ.

### **Объем и структура работы**

Диссертация состоит из шести глав, введения, списка литературы из 138 наименований и одного приложения. Общий объем составляет объемом 168 страницы, включая 16 таблиц и 104 рисунка.

### **СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ**

**Во введении** отражена и обоснована актуальность поставленной задачи.

**В первой главе** приведен обзор научно-технической литературы по процессам растворения и деформации твердых тел, рассмотрены основные модели описания

процессов растворения и деформации твердых тел, в том числе с помощью клеточных автоматов. Кроме этого в литературном обзоре рассматривается математическое моделирование на разных уровнях: нано-, микро- и мезоуровне. Рассматриваются современные технологии параллельных вычислений и приводится их применимость при решении различных задач. На основании обзора литературы были поставлены основные цели и задачи диссертационной работы.

**Во второй главе** рассматриваются экспериментальные исследования процессов растворения и деформации твердых тел. Для экспериментальных исследований процессов растворения и деформации твердых хрупких тел были построены планы экспериментальных исследований. Экспериментальные данные в дальнейшем использовались для нахождения коэффициентов модели и проверки адекватности. В качестве твердых хрупких тел были выбраны таблетки, сделанные по техническим условиям, приведенным в литературных источниках. Для создания образцов твердых хрупких тел использовался ручной гидравлический пресс ПГР-10, на котором было наработано 260 образцов твердых тел с различным составом и при различных давлениях прессования. Процесс растворения проводился на тестере для определения растворимости Sotax A7 Smart, после этого с помощью спектрофотометра определялась концентрация растворенного активного вещества и строилась кинетика высвобождения активного вещества. Для определения деформационно-прочностных свойств как хрупких, так и пластичных твердых тел использовалось оборудование ОАО «Институт пластмасс», такое как прибор для определения разрушающего напряжения при сжатии, прибор для определения разрушающего напряжения при изгибе, а также прибор для определения истираемости. Результаты были обработаны с помощью факторного анализа, выявлены наиболее значимые факторы, влияющие на скорость растворения и на прочностно-деформационные свойства образцов. На основе анализа экспериментальных данных был предложен оптимальный состав таблетки, имеющей максимальную скорость высвобождения активного вещества и максимальные прочностно-деформационные характеристики.

В качестве твердых пластичных тел были выбраны полимерные нанокомпозиты. Твердое пластичное тело может содержать три типа компонентов: «жесткие» включения (наполнитель), «мягкие» включения (модификатор) и матрицу. В свою

очередь, «жесткие» включения состоят из 2-х различных типов частиц: шаровидных частиц размером 40 нм (аэросил) и шаровидных частиц наполнителя размером 0.7 мкм, а концентрация компонентов лежит в следующих интервалах:

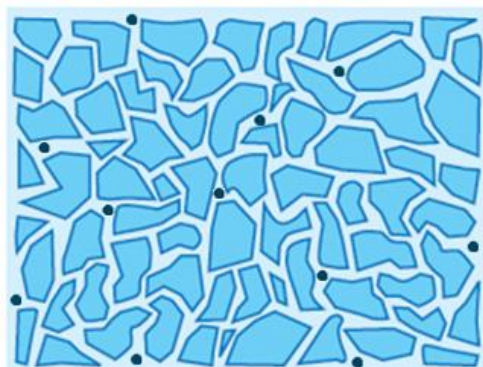


Рис.1. Распределение компонентов:

1) «жесткие» включения:

■ - наполнитель, ■ - аэросил;

2) ■ - полимерная матрица;

3) ● - «мягкие» включения

«жесткие» включения – 75-80% (от общей массы), «мягкие» включения – 0-10%, матрица – 10-25%. Вид распределения компонентов и структура полимерного нанокompозита показаны на рисунке 1.

Работы по созданию твердых пластичных тел проводились на кафедре химической технологии пластических масс РХТУ им. Д.И. Менделеева.

**В третьей главе** представлены разработанные модели генерации структур твердых тел, математические модели

процессов растворения и деформации двух типов твердых тел. На рисунке 2 представлена схема многоуровневого моделирования.

Для моделирования процесса деформации предложена структура многоуровневого моделирования твердого тела, в которой для трех уровней моделирования использованы разные подходы, методы и теоретические положения, которые возможно реализовать с применением высокопроизводительных вычислений на суперкомпьютерах.

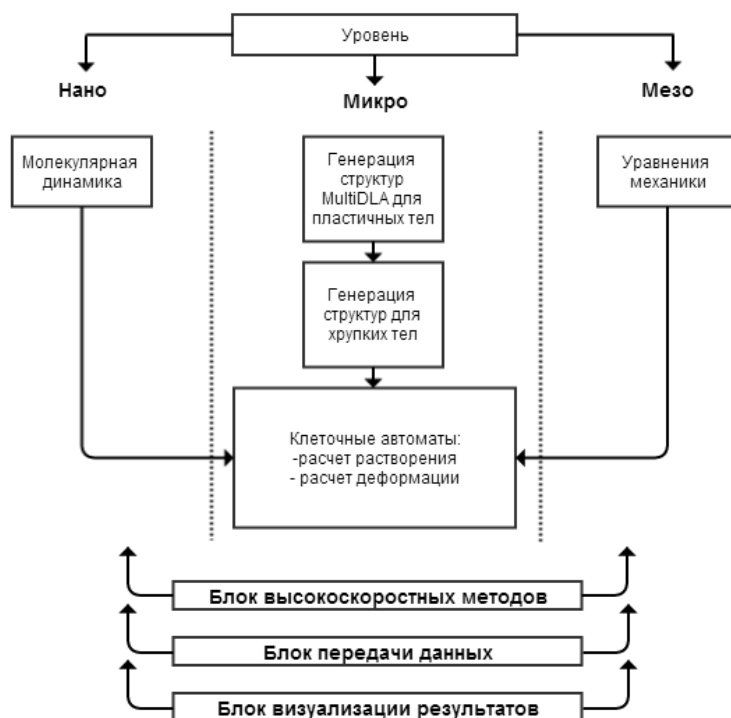


Рис. 2. Схема многоуровневого моделирования



### Генерация структуры твердого хрупкого тела

Для моделирования структур хрупких тел разработан алгоритм случайного заполнения объема компонентами в соответствии с их процентным соотношением.

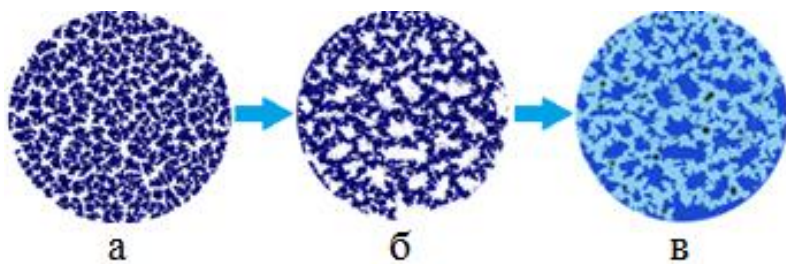


*Рис. 3. Пример генерации структуры хрупкого твердого тела со сложной структурой: 1) оболочка таблетки, 2) наполнитель, 3) оболочка гранул 4) гранулы активного вещества*

Кроме этого, могут быть заданы пользовательские правила, по которым может происходить генерация структуры твердого хрупкого тела. Данные правила используются, если есть необходимость моделировать твердое хрупкое тело со сложной геометрией, например, таблетку, имеющую неправильную форму, состоящую из гранул, наполнителя и покрытую оболочкой. Пример сгенерированной структуры и сравнение с фотографией существующей таблетки представлены на рисунке 3.

### Генерация структуры твердого пластичного тела

В работе была разработана компьютерная модель на основе алгоритма мульти DLA и алгоритма «кластер-кластерной» агрегации, которая детально описывает процессы структурообразования твердых полимерных нанокомпозитов. Сгенерированные структуры подходят для моделирования как на микро-, так и на мезоуровнях (рисунок 4).



*Рис. 4. Процесс генерации структуры пластичных тел: а) генерация структуры MultiDLA; б) «кластер-кластерная» агрегация; в) заполнение пустот в структуре*

Полученная структура DLA представляет собой достаточно разреженную сетку из соединенных между собой молекул полимерной матрицы и «мягкого» включения. Пустоты этой структуры заполняются «жесткими» наполнителями.

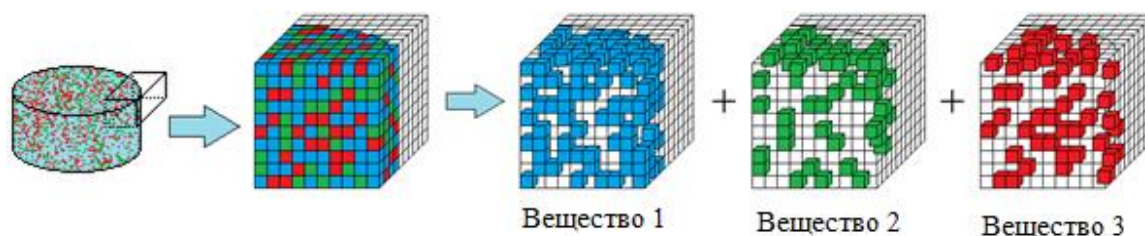
Алгоритм позволяет создавать структуры, точно повторяющие реальные образцы, что

необходимо для следующего этапа моделирования: оценки физико-химических и механических свойств с использованием модели на основе клеточных автоматов.

### Модель растворения твердых тел

Клеточный автомат для моделирования растворимости и водопоглощения представляет собой набор кубических полей с линейным размером  $N$  клеток. В математической модели приняты следующие допущения: 1) система представляется как совокупность полей, состоящих из кубических клеток; 2) расчет идет итеративно, процессы, протекающие на каждой итерации, принимаются как идущие в один момент времени; 3) на каждом поле рассматривается только одно вещество и среда растворения (растворитель); 4) поля имеют открытые границы, на каждой итерации вещество из граничных клеток удаляется; 5) клетка описывается тремя характеристиками: типом вещества, количеством вещества, находящимся в данной клетке, и агрегатным состоянием («жидкость» или «твердое вещество»); 6) растворяемые вещества или не влияют на растворение друг друга, или скорость растворения одного вещества линейно зависит от концентрации другого; 7) каждая клетка имеет шесть соседних клеток.

Графическая иллюстрация клеточного автомата приведена на рисунке 5.



*Рис.5. Графическая иллюстрация клеточного автомата*

Каждая итерация состоит из трех этапов:

- расчет процесса растворения (переход из твердого состояния в жидкое);
- расчет процесса диффузии (обмен веществ в жидком состоянии);
- расчет процесса переноса вещества за счет внешних факторов.

Расчет процесса растворения происходит следующим образом. Линейный размер одной клетки и полей клеточного автомата задается в качестве входящих данных. Определяется максимально возможное количество вещества, которое может содержаться в клетке поля, исходя из объема клетки.

После определения максимального количества вещества в клетке определяется количество вещества, соответствующее насыщенному раствору данного вещества в объеме, равном объему одной клетки. При дальнейших расчетах принимается следующее допущение: если количество вещества в клетке находится в диапазоне от концентрации, соответствующего количеству вещества в насыщенном растворе в объеме клетки до максимально возможного количества вещества, то агрегатное состояние вещества в клетке принимается как «твердое». Если концентрация вещества находится в диапазоне от нуля до количества, соответствующего количеству вещества в насыщенном растворе, то агрегатное состояние вещества в клетке принимается как «жидкость».

После задания начальных условий происходит итеративный расчет процесса растворения объекта. Растворение рассчитывается во всех клетках, имеющих агрегатное состояние «твердое вещество» во все соседние клетки обратно пропорционально концентрации растворенного в них вещества. Расчет количества вещества, перешедшего в растворенное состояние, происходит следующим образом. Изменение массы клетки, из которой вещество растворяется, рассчитывается по уравнению  $\frac{dM}{dt} = -kF(C^* - C)$ , где  $M$  – масса твердого вещества,  $k$  – коэффициент растворения,  $F$  – поверхность растворения,  $C^*$  – концентрация насыщенного раствора,  $C$  – текущая концентрация вещества в растворе. Выражение для расчета коэффициента растворения  $k$  в аппаратах с мешалками получено на основе предположения, что решающую роль во внешнем массообмене играет разрушение пограничного слоя мелкомасштабными турбулентными пульсациями:  $k = e^{1/4} Sc^{-3/4}$ ,  $e = \frac{N}{G}$ ,  $Sc = \frac{\omega}{D}$ , где  $e$  – удельная диссипация механической энергии;  $Sc$  – критерий Шмидта;  $N$  – мощность, затрачиваемая на перемешивание;  $G$  – масса перемешиваемой системы.

После расчета процесса растворения во всех возможных клетках, исходя из новых значений количества вещества в клетках по правилам, описанным выше, определяется их новое агрегатное состояние.

Расчет процесса диффузии происходит по уравнению Фика. Коэффициент диффузии веществ в растворе находился методом молекулярной динамики в

программе NAMD, которая позволяет учитывать взаимодействие между молекулами растворителя и растворяемого вещества в зависимости от условий растворения.

В процессе расчета диффузии участвуют только те клетки, которые имеют агрегатное состояние «жидкость». Для каждой клетки, содержащей растворенное вещество, и ее новых соседей рассчитываются новые значения количества содержащегося в них вещества на основе предыдущих значений.

Последней частью итерации клеточного автомата является расчет процесса переноса вещества за счет воздействия внешних факторов. Расчет происходит следующим образом. Случайным образом выбирается  $p$  процентов пар клеток, имеющих одно из следующих состояний: 1) «раствор вещества» – «раствор вещества», 2) «раствор вещества» – «растворитель», 3) «твердое нерастворимое вещество» – «растворитель», 4) «твердое нерастворимое вещество» – «раствор вещества». Коэффициент  $p$  является эмпирическим и подбирается на основе сравнения результатов моделирования с экспериментальными данными. На заключительной стадии происходит удаление вещества из граничных клеток клеточного автомата, что имитирует большой объем реальной системы. Расчет завершается при переходе всех клеток, содержащих растворимые вещества, из состояния «твердое тело» в состояние «раствор вещества».

При моделировании нанокомпозитов следует рассматривать процесс водопоглощения, который описывается аналогичной моделью.

#### Модель деформации твердых тел

Модельный образец разбивается с помощью равномерной кубической решетки на ячейки фиксированного объема. Таким образом, модельный образец можно представить в виде трехмерного клеточного поля. С целью исключения «краевых эффектов» применяются тороидальные граничные условия.

Исходными параметрами, необходимыми для расчета эффективных модулей продольного растяжения (сжатия)  $E_{эф}$  и сдвига  $G_{эф}$ , являются линейный размер кубической ячейки (клетки)  $l_0$ , приложенное к клетке напряжение при растяжении  $\sigma$ , напряжение сдвига матрицы  $\tau$ , модули продольного растяжения (сжатия)  $E_m$  и сдвига  $G_m$  для клетки без наполнителя (матрицы), усредненные модули упругости  $E_{cp}$  и сдвига  $G_{cp}$  для клетки поля с наполнителем. Модель дает возможность рассчитать силы,

действующие в каждой клетке, локальные удлинения (или сжатия) клеток и эффективный модуль Юнга.

**В четвертой главе** описаны разработанные алгоритмы для генерации структур твердых тел, расчета процессов растворения, водопоглощения и деформации твердых тел.

В разработанных алгоритмах были выделены блоки двух типов. Блоки первого типа являются «затратными» с точки зрения количества вычислений. Блоки второго типа являются более простыми в вычислительном плане по сравнению с блоками первого типа, однако при большой размерности задачи расчёт этих блоков может занимать длительное время. Кроме того, при работе с распределённой компьютерной системой (кластером) последовательное выполнение блоков второго типа

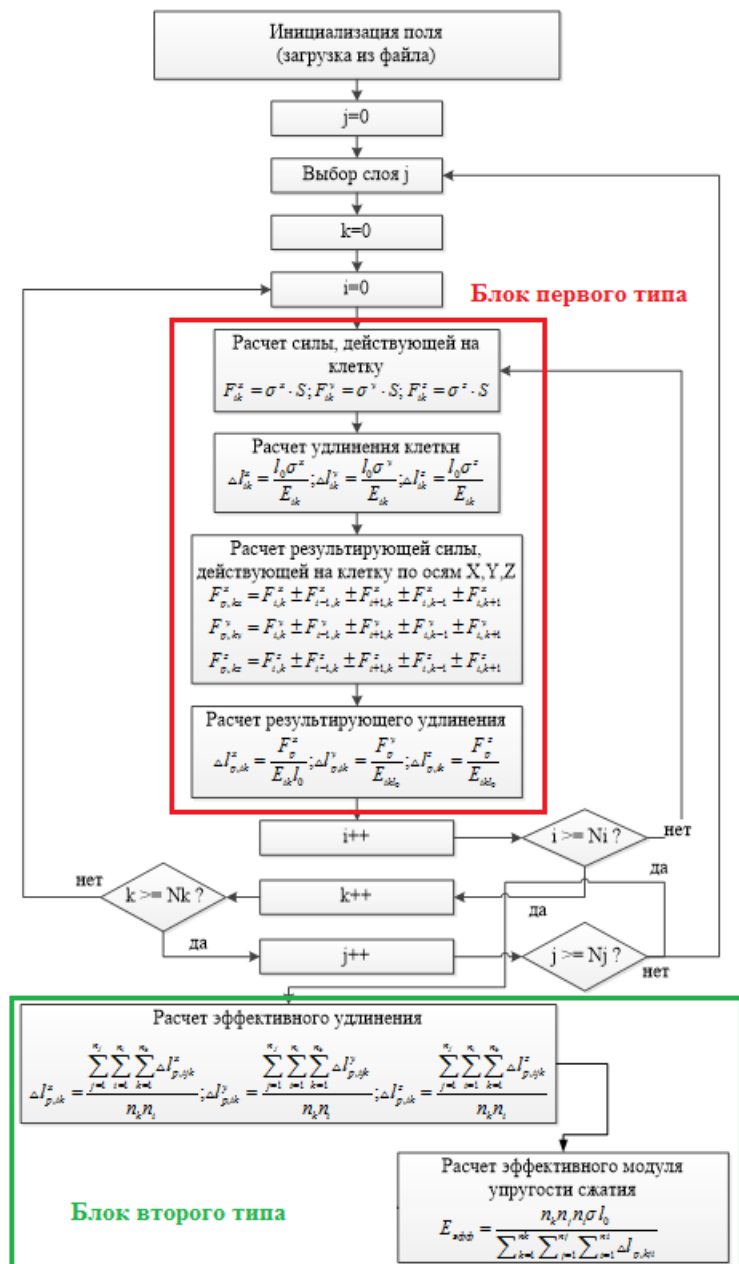


Рис. 6. Алгоритм расчета процесса деформации

потребуется предварительного копирования данных с задействованных вычислительных узлов на главный узел. Для реализации этих алгоритмов использовались подходы крупнозернистого параллелизма (расчет на кластерах), что позволяет значительно ускорить математическое моделирование. Использование параллельных вычислений позволило повысить производительность модуля для расчета растворения более чем в 3,5 раза, а модуля для расчета деформации – в 12 раз. Пример одного из разработанных

алгоритмов расчета процесса деформации по клеточноавтоматной модели, а также блоки первого и второго типов представлены на рисунке 6.

**В пятой главе** рассмотрен модуль программного комплекса для расчета процесса растворения твердых тел и результаты расчетов. В главе представлен графический интерфейс программного модуля, описание применения программного модуля, описание входящих данных и результаты работы программного модуля.

Результатом расчета модуля является построение кинетики растворения. Проверяется адекватность расчетов с экспериментальными данными по кинетике растворения. Приводятся результаты работы блока визуализации (рисунок 7), показывающие состояние твердого тела в разные моменты времени. Были проведены расчеты для конкретных композиций таблеток с разной геометрией и составом, а также был рассмотрен гипотетический случай растворения таблетки-драже аскорбиновой кислоты (рисунок 8). Таким образом, применение модели растворения клеточными автоматами дает возможность описания процессов растворения и диффузии.

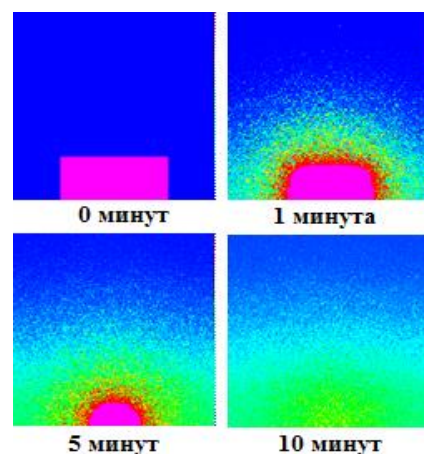


Рис. 7. Визуализация состояния системы в разные временные отрезки

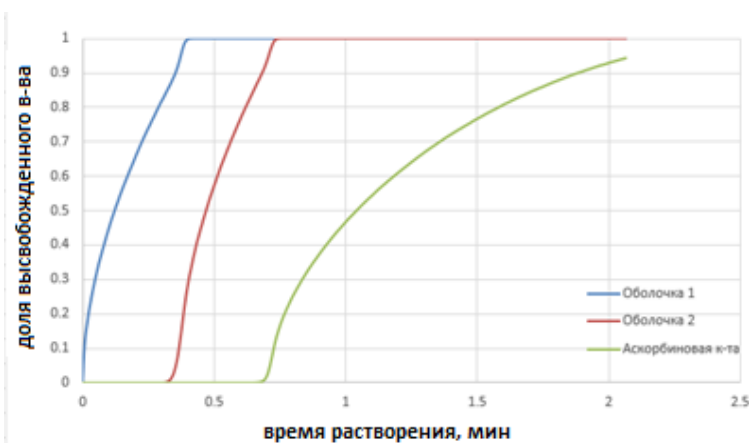


Рис. 8. Высвобождение активного вещества из таблетки-драже с двумя оболочками

полимерных нанокомпозитов и других твердых тел.

Модуль позволяет проводить расчеты для многокомпонентных твердых тел, имеющих сложное внутреннее строение и сложную геометрическую форму: таблеток, покрытых оболочкой; таблеток, спрессованных из гранулята; капсул с гранулами;

**В шестой главе** описан модуль программного комплекса для расчета процесса деформации и приведены результаты расчетов.

Данный модуль программного комплекса состоит из следующих блоков: 1) блок подготовки входных данных; 2) расчетный блок, который состоит из модуля расчета макромеханических параметров и модуля расчета на микроуровне; 3) блок визуализации результатов.

В модуле предусмотрена возможность приложения нескольких сил к твердому телу в разных точках. На рисунке 9 продемонстрировано удлинение тела при приложении разных сил к разным плоскостям тела. Кроме этого, в программе имеется возможность приложения силы к одной точке, что соответствует моделированию процесса измерения микротвердости тела. В данном случае микротвердость будет вычисляться из минимальной силы, которая вызовет локальное изменение длины твердого тела. При работе с данным модулем появляется возможность визуализации процессов растяжения и сжатия твердого тела.

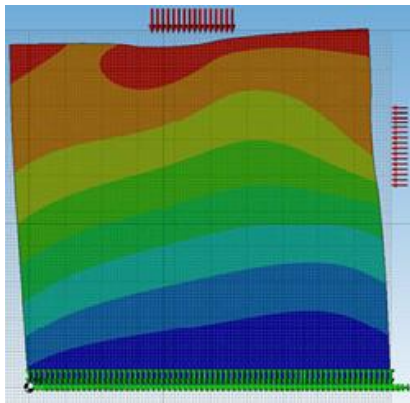
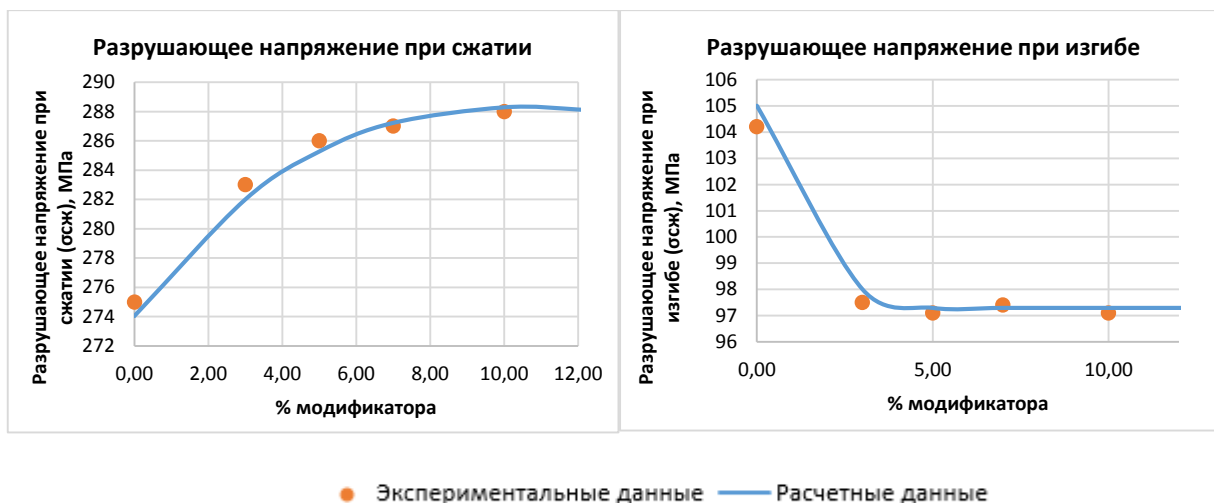


Рис. 9. Приложение нескольких сил к твердому телу

Были получены виртуальные структуры полимера, содержащие разное количество наполнителя. Процентное содержание «жесткого» наполнителя варьировалось от 50% до 80%, а «мягкого» от 0% до 12%. На основе полученных 3D структур определялись микро- и макропараметры полимера. Задачей являлось получение образца, обладающего максимальным разрушающим напряжением при сжатии. На рисунке 10 представлено сравнение экспериментальных и расчетных данных для деформационно-прочностных свойств нанокomпозиционных полимеров.

После проведенного анализа было установлено, что оптимальным является следующий состав полимерного нанокomпозиционного материала: а) 77% «жестких» включений, б) 6-10% «мягких» включений (полимерного модификатора), в) 17-13% полимерной матрицы.



*Рис. 10. Зависимость разрушающего напряжения при сжатии и изгибе от количества полимерного модификатора*

Модуль программного комплекса дает точную оценку деформационно-прочностным характеристикам образца, но для подбора окончательного состава полимерного нанокompозита необходимы экспериментальные исследования. Решение об окончательном составе может быть принято только исследователем в зависимости от конкретного назначения полимерного нанокompозита.

## РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Были проведены экспериментальные исследования процессов растворения и деформации твердых тел на примерах нанокompозиционных полимерных материалов и фармацевтических твердых лекарственных форм.
2. Был проведен факторный анализ результатов экспериментов и выявлены наиболее значимые факторы, влияющие на процессы растворения и деформации.
3. Был разработан алгоритм генерации структур твердых тел на микроуровне разными способами: равномерным распределением компонентов и генерацией структур модифицированным методом агрегации, ограниченной диффузией (diffusion limited aggregation) с множеством центров кристаллизации (MultiDLA) и «кластер-кластерной» агрегации. Алгоритмы генерации структур позволяют учитывать пользовательские правила для генерации структур со сложной геометрией (таблетки покрытые оболочкой, таблетки из гранулята и т.д.).
4. Были разработаны математические модели процессов растворения и деформации твердых тел с использованием клеточных автоматов, позволяющие учитывать состав



твердого тела, его геометрическую форму. Кроме этого математические модели позволяют учитывать внешние факторы процессов: для процессов растворения и водопоглощения – состав, среду, температуру и скорость перемешивания; для процесса деформации – действие нескольких внешних сил, места и площадь их приложения.

5. На основе математических моделей были разработаны алгоритмы, позволяющие использовать параллельные вычисления, что позволило значительно ускорить моделирование процессов растворения и деформации: для процесса растворения – более чем в 3,5 раза; для процесса деформации – более 12 раз. Был проведен анализ ускорения расчетов при использовании параллельных вычислений, на основе которого были даны рекомендации по характеристикам компьютеров для оптимальной скорости расчета: для расчета процесса растворения и водопоглощения не более 20 процессоров, для расчета процесса деформации не более 60 процессоров.

6. Был разработан программный комплекс, имеющий удобный и понятный графический интерфейс пользователя, реализующий вышеописанные алгоритмы и состоящий из двух модулей: модуля для моделирования процессов растворения и водопоглощения и модуля для моделирования процесса деформации твердых тел и проведено тестирование программного комплекса по разработанными Программам и Методикам.

7. Программный комплекс апробирован в ходе выполнения работ по Государственному Контракту № 14.514.11.4054 2013 г.

### **Список публикаций по теме диссертации**

1. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2011611343 Программа визуализации трехмерных структур высокопористых тел. // Иванов С.И., Гуриков П.А., Троянкин А.Ю., Меньшутин Н.В. – 2011г.

2. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2011611344. Программа определения распределения пор трехмерных структур по объему. // Иванов С.И., Колнооченко А.В., Троянкин А.Ю., Меньшутин Н.В. – 2011г.

3. Иванов С.И., Колнооченко А.В. Вероятностная клеточно-автоматная модель процессов адсорбции и высвобождения // Инновационные материалы и технологии в химической и фармацевтической отраслях промышленности: Сборник докладов

международной конференции с элементами научной школы для молодёжи, 2010. - стр. 135-137.

4. Иванов С.И., Колнооченко А.В. Моделирование процессов адсорбции и высвобождения методом вероятностных клеточных автоматов // Успехи в химии и химической технологии: сб. науч. тр. Том XXIV, № 1 (106). – М.: РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2010. – стр. 39-42.

**5. Меньшутина Н.А., Иванов С.И., Шпилова Д.Д. Моделирование растворения твердых тел с помощью клеточных автоматов. // Программные продукты и системы. Выпуск 1 (2012) стр. 151-154.**

6. N. Menshutina, S. Ivanov, A. Kolnoochenko, A. Troyankin, P. Gurikov Study of the particle dynamics in spouted bed apparatus during coating of aerogel particles. // 8<sup>th</sup> European Congress of Chemical Engineering, 2011. - Berlin, Pages 25-29 September, 2011.

7. S. Ivanov, A. Troyankin, P. Gurikov, A. Kolnoochenko, N. Menshutina 3D Cellular automata for modeling of spray freeze drying process. // Proceedings of 21 European Symposium on Computer Aided Process Engineering Volume 29, 2011. – Chalkidiki, Pages 136-140.

8. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2013611549 Программный комплекс для моделирования структурообразования Нанострукт (Nanostruct). // Иванов С.И., Колнооченко А.В., Меньшутина Н.В. – 2013г.

**9. Меньшутина Н.В., Гордиенко М.Г., Иванов С.И., Матасов А.В. Основные подходы к многоуровневому моделированию свойств и процессов в полимерных нанокompозитах. // Естественные и технические науки № 3, 2013 г. стр. 337 - 339.**

**10. Иванов С.И., Матасов А.В., Голубчиков М.А., Меньшутина Н.В.- Параллельные вычисления при моделировании процесса растворения на микроуровне. // Программные продукты и системы № 3, 2013 г. стр. 264-268**

11. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2013614529 Программный комплекс для многоуровневого моделирования процессов деформации и разрушения полимерных нанокompозитов, содержащих «жесткие» и «мягкие» включения. // Меньшутина Н.В., Гордиенко М.Г., Иванов С.И., Молодкин В.М., Голубчиков М.А. – 2013г