

NEWS

OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF THE REPUBLIC OF KAZAKHSTAN

SERIES CHEMISTRY AND TECHNOLOGY

ISSN 2224-5286

Volume 2, Number 416 (2016), 143 – 148

**MODELING OF SOLID BODIES SOLUTION PROCESS USING
CELLULAR AUTOMATA****S. I. Ivanov¹, B. Khussain², I. A. Tiptsova¹, P. U. Tsigankov¹, N. V. Menshutina¹**¹D. I. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russia,²D. V. Sokolsky Institute of Fuel, Catalysis and Electrochemistry, Almaty, Kazakhstan.

E-mail: b.khusain@ifce.kz

Abstract. Today the critical task of science and industry is to obtain new materials with desired properties for the aerospace industry, military industrial complex, pharmaceuticals, construction and other fields. Receiving of new materials is always connected with a large number of experimental investigations and, as a consequence, large labor costs and power consumption. In this work the mathematical model of cellular automata with varied size of cells is presented. The comparison with the previous mathematical model developed by composite authors has been made.

Looking for compositions of new materials with a definite structure and specific physicochemical properties, an important task is the development of mathematical and computer models and their implementation with the use of high-performance parallel computing that will reduce the scope of experimental investigations. The current generation of computers allows to execute the mathematical modeling of various processes at different levels: nano-, micro- and meso-level. Mathematical and computer modeling makes it possible to determine the search area for compositions of developed materials, which considerably reduces the cost and speeds up the development process.

In this work a new mathematical model based on cellular automata with varied size of cells will be presented.

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА РАСТВОРЕНИЯ ТВЕРДЫХ ТЕЛ
С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ КЛЕТОЧНЫХ АВТОМАТОВ****С. И. Иванов¹, Б. Хусаин², И. А. Типцова¹, П. Ю. Цыганков¹, Н. В. Меньшутина¹**¹Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева, Москва, Россия²АО «Институт топлива, катализа и электрохимии им. Д. В. Сокольского», Алматы, Казахстан,

Аннотация. 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 работе представлена математическая модели клеточного автомата с изменяющимся размером клеток. Приведено сравнение с предыдущей математической моделью, разработанной авторским коллективом.

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.

В работе будет представлена новая математическая модель на основе клеточных автоматов с изменяющимися размерами клеток.

Математическая модель процесса растворения. На сегодняшний день существует несколько моделей описания процесса растворения твердых тел. Наибольшее распространение получили модели на основе клеточных автоматов. Во всех ранее известных клеточно-автоматных моделях растворения клетки имеют фиксированный размер, что накладывает некоторые ограничения на модель. Предлагаемая модель растворения твердых тел на основе клеточных автоматов с изменяющимися размерами клеток позволяет избежать недостатков предыдущих моделей

В математической модели приняты следующие допущения:

- 1) система представляет собой совокупность клеток;
- 2) поле имеет открытые границы, вещество удаляется из граничных клеток на каждой итерации;
- 3) каждая клетка имеет три характеристики: тип вещества, количество вещества и агрегатное состояние (твердое, жидкость);
- 4) расчет процессов ведется итеративно (на каждой итерации процессы растворения и диффузии вещества происходят в один промежуток времени);

Модель процесса растворения описывается следующим уравнением:

$$\frac{dc}{dt} = D * F * (C_i - C_j)$$

где D – коэффициент диффузии, F – площадь поверхности контакта взаимодействующих клеток, C_i, C_j – концентрации в i -ой и j -ой ячейках.

Далее приводятся возможные состояния клеток в клеточном автомате. Слева указано начальное состояние, справа – изменение состояние клетки, относительно которой.

Во всех парах клеток жидкость – твердое вещество происходит смещение их границы в сторону клетки с твердым веществом, при этом происходит перенос вещества из твердого состояния в жидкость, т.е. в клетке с состоянием «твердое» количество вещества уменьшается, а в клетках в состоянии «жидкость» количество растворяемого вещества увеличивается. На рисунке 1 клетка с твердым веществом с четырех сторон окружена клетками с жидкостью, следовательно, со всех ее сторон происходит смещение границ клеток жидкость-твердое вещество и она уменьшается в размерах.

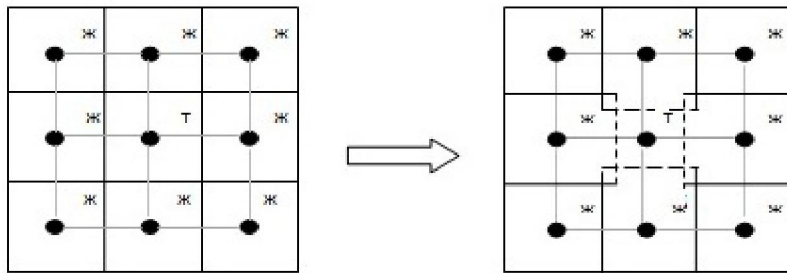


Рисунок 1 – Клетка с твердым веществом со всех сторон окружена клетками с жидкостью

На рисунке 2 клетка с твердым веществом окружена тремя клетками с жидкостью и клеткой с твердым веществом, следовательно, только с трех сторон граница клеток жидкость-твердое вещество будет смещаться в ее сторону.

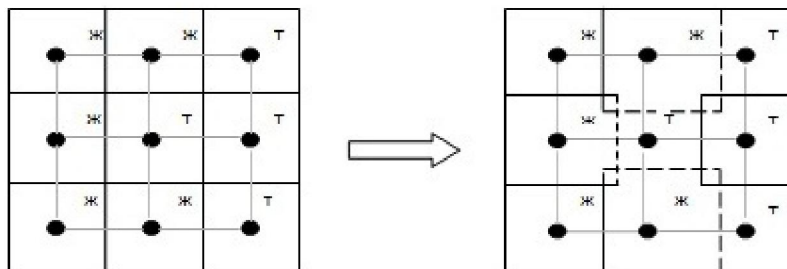


Рисунок 2 – Клетка с твердым веществом с трех сторон окружена клетками с жидкостью

На рисунке 3 клетка с твердым веществом граничит с двумя клетками с жидкостью, поэтому смещение границы клеток жидкость-твердое вещество только с двух сторон.

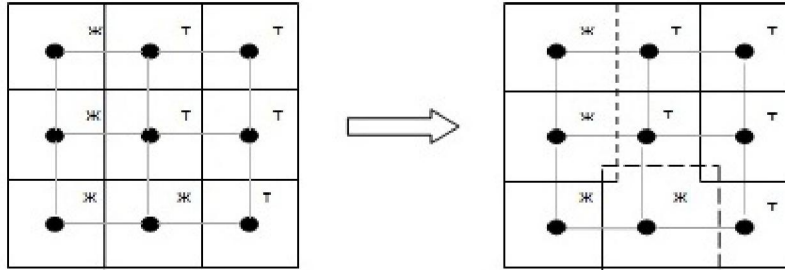


Рисунок 3 – Клетка с твердым веществом с двух сторон окружена клетками с жидкостью

На рисунке 4 клетка с твердым веществом с левой стороны имеет границу с клеткой с жидкостью, поэтому происходит смещение границы только между этими клетками.

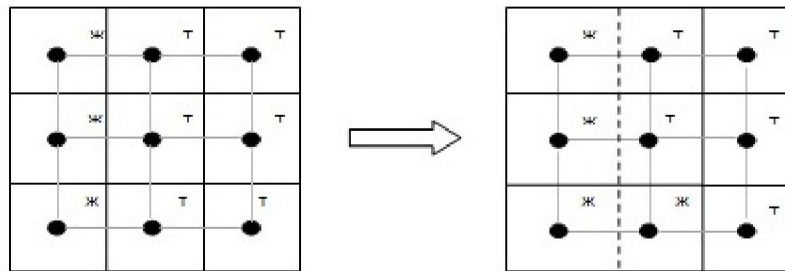


Рисунок 4 – Клетка с твердым веществом с одной стороны окружена клеткой с жидкостью

Расчет процесса растворения производится следующим образом. В качестве входных параметров задается линейный размер поля – N клеток и максимальное содержание каждого вещества в объеме клетки.

В процессе растворения из клеток с твердым веществом вещество переходит в клетки с жидкостью, следовательно, объем вещества в клетках изменяется. На этом основании можно считать, что изменяется и расстояние между клетками. Во всех парах клеток «жидкость-твердое» их границы смещаются в сторону клетки с твердым.

На рисунке 5 представлено взаимодействие между двумя соседними клетками. В случае а) видно изменение расстояния между клетками и смещение границы в сторону клетки с твердым веществом. В случае б) происходит «смещение центра» – когда из клетки 2 вещество переходит в клетку 1, при этом уменьшается объем клетки 2 (объем клетки 1 увеличивается) и рассчитанное расстояние dl_2 становится при этом отрицательным, чтобы этого избежать происходит смещение центра клетки 2 и уже dl_2' является положительным. Если же «смещение центра» невозможно из-за отсутствия вещества в клетке, то такая клетка удаляется.

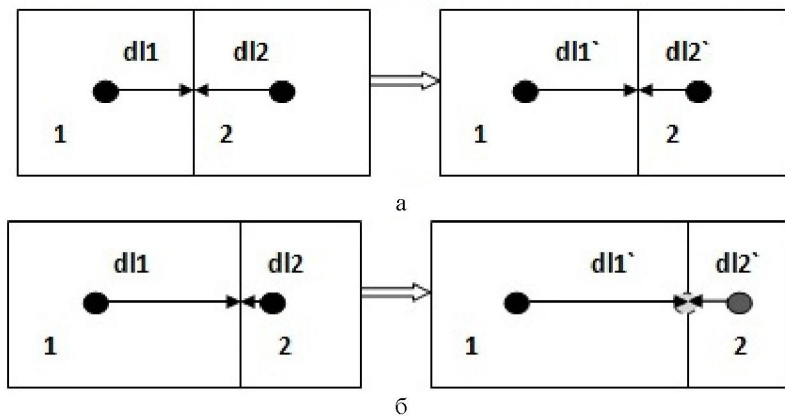


Рисунок 5 – Взаимодействие соседних клеток: 1 – жидкость, 2 – твердое вещество; а – изменение расстояния в процессе растворения; б – «смещение центра»

На рисунке 6 представлены графики плотности распределения вещества на выбранных итерациях. Как видно из графиков, на итерации №1 в системе существуют только два типа клеток – с концентрацией вещества, равной 0, и с максимально заданной концентрацией вещества, равной 255. На итерации №100 количество клеток с концентрацией, равной 0, уменьшилось примерно в 4 раза. Из графика видно, что с увеличением итераций, в системе происходит постепенное выравнивание значений концентрации в клетках.

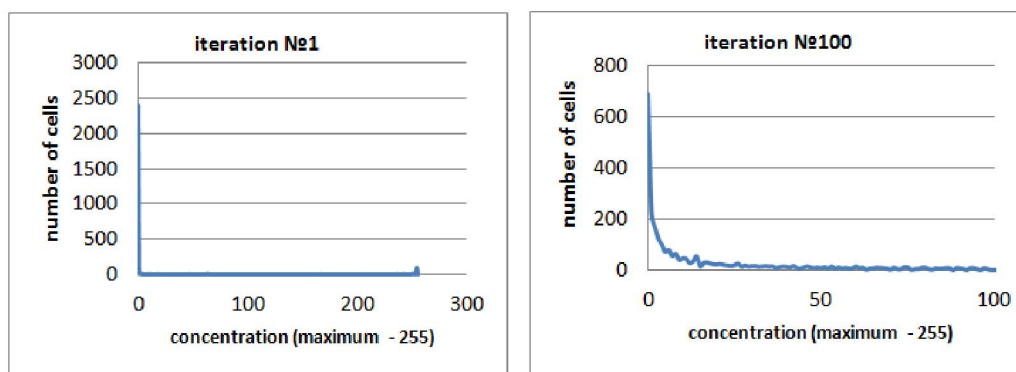


Рисунок 6 – Графики плотности распределения вещества

Результаты расчета. 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 $\frac{dM}{d\tau} = -kF(C^* - C)$, 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.

На рисунке 7 приведено сравнение расчетных данных по двум компьютерным моделям и экспериментальные исследования.

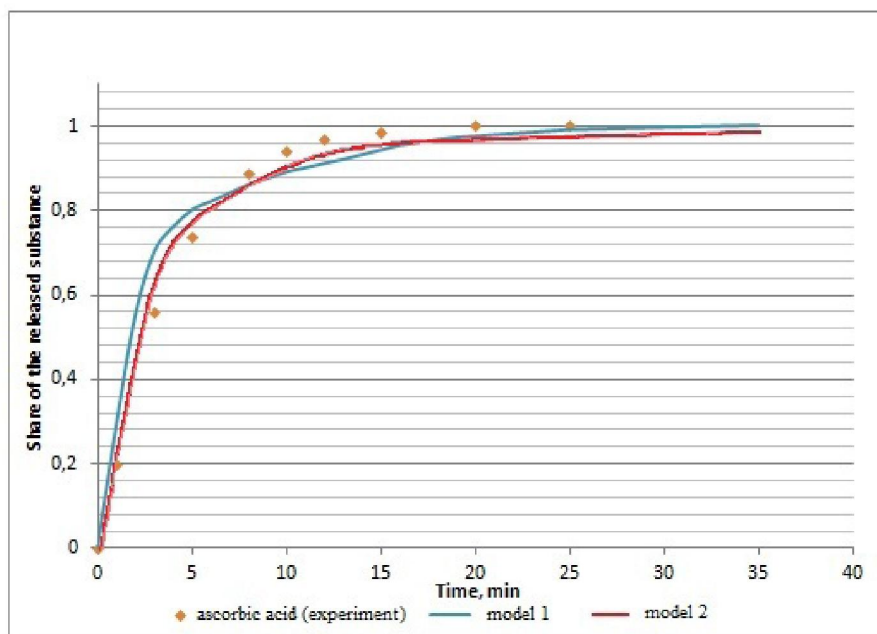


Рисунок 7 – Расчет растворения аскорбиновой кислоты

Сравнение показало, что предлагаемая модель имеет большую точность расчета на 10–15%.

Данная клеточно-автоматная модель с изменяющимся размером клеток имеет ряд преимуществ:

- дает возможность качественного изображения геометрической формы;
- постепенное сокращение клеток с твердым веществом уменьшает количество элементов клеточного автомата, что ускоряет процесс расчета;
- позволяет учесть процесс набухания;
- дает возможность рассчитывать любые тела, подвергающиеся деформации, а также гибкие тела.

Разработанный алгоритм является достаточно ресурсоемким с точки зрения времени, но удаление ячеек с твердым веществом в ходе растворения позволяет ускорить процесс расчета. Тем не менее, повышение производительности расчета является приоритетной задачей. Поэтому, видимой перспективой является применение параллельных вычислений с помощью технологии CUDA.

Выводы. В дальнейшем планируется развитие этой математической модели и проверка ее при моделировании сложных систем, включающих несколько факторов:

- растворение вещества;
- набухание компонентов;
- диффузию растворителя через поверхность.

Развитие моделей на базе клеточных автоматов и методологии их использования в будущем позволят переходить к более точным и производительным вычислениям, за счет использования параллельных вычислений. Данные математические и компьютерные модели могут применяться в таких областях как фармацевтика, сельское хозяйство, разработка новых материалов и конструкций из них.

Работа выполнена при финансовой поддержке ГУ «Комитет науки Министерства образования и науки Республики Казахстан» в рамках договора № 294 от 12.02.2015.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Mathematical modeling of drug dissolution / J. Siepmann, F. Siepmann // International Journal of Pharmaceutics. – 2013.
[2] Cellular automata model for drug release from binary matrix and reservoir polymeric devices / Timo Johannes Laaksonen, Hannu Mikael Laaksonen, Jouni Tapio Hirvonen, Lasse Murtomaki // Bio-materials. – 2009. - №30.
[3] Microstructure-based mathematical modelling and spectroscopic imaging of tablet dissolution / James A. Kimber, Sergei G. Kazarian, Frantisek Stepanek // Computers and Chemical Engineering. – 2011. - №35.
[4] Siepmann J., Siepmann F., 2013. Mathematical modeling of drug dissolution. International Journal of Pharmaceutics.

REFERENCES

- [1] Mathematical modeling of drug dissolution / J. Siepmann, F. Siepmann // International Journal of Pharmaceutics. – 2013.
[2] Cellular automata model for drug release from binary matrix and reservoir polymeric devices / Timo Johannes Laaksonen, Hannu Mikael Laaksonen, Jouni Tapio Hirvonen, Lasse Murtomaki // Bio-materials. – 2009. - №30.
[3] Microstructure-based mathematical modelling and spectroscopic imaging of tablet dissolution / James A. Kimber, Sergei G. Kazarian, Frantisek Stepanek // Computers and Chemical Engineering. – 2011. - №35.
[4] Siepmann J., Siepmann F., 2013. Mathematical modeling of drug dissolution. International Journal of Pharmaceutics.

**ЖАСУШАЛЫҚ АВТОМАТТАРДЫ ПАЙДАЛАНУМЕН
ҚАТТЫ ДЕНЕЛЕРДІҢ ЕРУ ПРОЦЕСІН МОДЕЛЬДЕУ**

С. И. Иванов¹, Б. Хусаин², И. А. Типцова¹, П. Ю. Цыганков¹, Н. В. Меньшутина¹

¹Д. И. Менделеев атындағы Ресей химия-технологиялық университеті, Москва, Ресей,

²«Д. В. Сокольский атындағы Жанармай, катализ және электрохимия институты» АҚ, Алматы, Қазақстан

Аннотация. Қазіргі таңда ғылым мен өнеркәсіптің көкейтесті мәселесі аэроғарыштық сала, әскери-өнеркәсіптік кешен, фармацевтика, құрылыс және басқа салалар үшін белгіленген қасиеттерге ие жаңа материалдарды алу болып табылады. Жаңа материалдарды алу әрқашан тәжірибелік зерттеулердің көп мөлшерімен және соның нәтижесінде үлкен еңбек және энергия шығындарымен байланысты. Еңбекте жасушалардың өзгеретін көлемдерімен жасушалық автоматтың математикалық моделі көрсетілген.

Авторлық ұжыммен жасап шығарылған алдыңғы математикалық модельмен салыстыру жүргізілген.

Белгілі бір құрылымға және белгілі бір физико-химиялық қасиеттерге ие жаңа материалдардың құрамын іздеуде маңызды міндет математикалық және компьютерлік модельдерді жасап шығару және оларды өнімділігі жоғары параллельдік есептеулерді пайдаланумен жүзеге асыру болып табылады, ол тәжірибелік зерттеулердің мөлшерін күрт қысқартуға мүмкіндік береді. Компьютерлердің заманауи буыны әртүрлі деңгейлерде: нано-, микро- және мезодеңгейде әртүрлі процестерді математикалық модельдеуді жүргізуге мүмкіндік береді. Математикалық және компьютерлік модельдеу жасап шығарылатын материалдардың құрамдары үшін іздеу аймағын анықтауға мүмкіндік береді, ол жасап шығару процесін едәуір жылдамдатады және арзандатады.

Еңбекте жасушалардың өзгеретін көлемдерімен жасушалық автоматтардың негізіндегі жаңа математикалық модель ұсынылатын болады.

Поступила 14.03.2016г.