

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ КОНЦЕПТУАЛЬНОГО ДИЗАЙНА ПРОЦЕССОВ ПОЛУЧЕНИЯ ЧАСТИЦ ХИТОЗАНОВЫХ АЭРОГЕЛЕЙ

М.С. Мочалова — Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева, Москва, Россия. ORCID 0000-0003-1200-8125. Эл почта: mochalovamarie@yandex.ru

К.М. Демкин — Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева, Москва, Россия. ORCID 0000-0002-3299-6397. Эл почта: DemkinChem@yandex.ru (для переписки).

Н.В. Меньшутина — Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева, Москва, Россия. ORCID 0000-0001-7806-1426. Эл почта: chemcom@muctr.ru

© 2025 г. Поступила в редакцию 15.05.25 г. Прошла рецензирование 11.07.25 г.
Принята к публикации 11.07.25 г.

Разработан программный комплекс на языке программирования Python, предназначенный для концептуального дизайна технологической схемы процесса получения частиц хитозановых аэрогелей. Программный комплекс охватывает расчет всей производственной цепочки, включая стадии подготовки растворов, гелеобразования, замены растворителя в порах геля и сверхкритической сушки. В структуру комплекса входят математическая модель гидродинамики потоков в приемной емкости, модель диффузионного массопереноса в пористой структуре частиц геля хитозана, расчет материального баланса, блок расчета параметров оборудования, а также подсистема технико-экономической оценки. С помощью программного комплекса пользователь может определять оптимальные параметры процесса получения частиц хитозановых аэрогелей и формировать предварительную технологическую схему производственного процесса, адаптированную к заданным ограничениям. Программный комплекс предназначен для масштабирования технологии получения частиц хитозановых аэрогелей и расчета себестоимости продукции при различных уровнях производительности.

К л ю ч е в ы е с л о в а: сверхкритическая сушка, аэрогель, гелеобразование, ступенчатая замена растворителя, концептуальный дизайн, математическое моделирование.

ВВЕДЕНИЕ

Аэрогели на основе хитозана являются перспективными материалами для использования в качестве современных биоматериалов в области медицины, фармацевтики и пищевой промышленности. Эти материалы обладают рядом уникальных свойств, таких как высокая пористость (до 99,9%) и площадь поверхности (до 2000 м²/г), низкая плотность (до 3 кг/м³), биосовместимость, высокая сорбционная емкость и способность к селективному поглощению различных веществ [1–3]. Благодаря этому хитозановые аэрогели используются в очистке воды, адсорбции тяжелых металлов, доставке лекарственных веществ, тканевой инженерии и создании инновационных упаковочных материалов [4–9]. Наиболее перспективное применение хитозановых аэрогелей — использование данных материалов в качестве местных гемостатических средств, поскольку поверхность хитозана обладает избыточным положительным зарядом,

что позволяет ему адсорбировать тромбоциты и эритроциты, которые играют ключевую роль в процессе свертывания крови [1].

Процесс получения хитозановых аэрогелей включает несколько ключевых этапов: подготовку исходных растворов, гелеобразование, замену растворителя и сверхкритическую сушку [10]. Каждый из этих этапов оказывает значительное влияние на характеристики конечного продукта. На первом этапе хитозан растворяют в водном растворе уксусной кислоты. Для гелеобразования полученный раствор диспергируют с помощью специальных устройств (форсунки, шприцы, шприцевые насосы и т.п.) на капли, которые попадают в приемную емкость, наполненную раствором щелочи [11]. При попадании капель раствора хитозана в щелочную среду, постепенно формируются частицы геля. После завершения процесса гелеобразования частицы геля изымают из приемной емкости. На текущий момент приемных емкостей, обеспечивающих устойчивое формирование и равномерный унос частиц геля, не существует. Для масштабирования данного процесса необходимо разрабатывать приемную емкость таким образом, чтобы минимизировать количество застойных зон и обеспечивать равномерный унос частиц геля хитозана из приемной емкости в емкость для их сбора [12].

Следующим этапом является замена растворителя, содержащегося в порах геля, на такой, который образует гомогенную смесь с сверхкритическим (СК) CO_2 [13–14]. Ступенчатая замена растворителя необходима для того, чтобы избежать деформации структуры во время вытеснения воды из пор геля хитозана. Этап ступенчатой замены растворителя в порах частиц геля хитозана является ресурсо- и времязатратным процессом. Исходя из литературных данных [15–16], при использовании в качестве растворителя изопропанола время выдерживания частиц геля в нем для достижения равновесия, как правило, составляет не менее 2 ч.

СК-сушка считается наиболее важным этапом производства частиц аэрогелей. Этот процесс позволяет сохранить трехмерную структуру пор материалов, что обеспечивает ключевые свойства аэрогелей, такие как высокая пористость, низкая плотность и высокая удельная площадь поверхности [17]. Особенность этого процесса состоит в том, что в качестве сушильного агента используется СК-флюид, который обладает высокой плотностью, низкой вязкостью и высокой растворимостью в органических растворителях. Как правило, в качестве флюида используют СК- CO_2 из-за сравнительно низких критических параметров [18].

Моделированию, масштабированию и оптимизации процесса СК-сушки посвящено множество работ [19–22]. Процесс осуществляется в аппаратах высокого давления, часто индивидуально проектируемых под заданный объем производства. В настоящее время серийного выпуска установок для сверхкритической сушки в РФ не существует, поэтому оборудование изготавливается на заказ. Именно поэтому расчет параметров аппаратов для СК-сушки является необходимым этапом для предварительного проектирования производства.

Для предварительного проектирования пилотного, полупромышленного и промышленного производства аэрогелей необходимо разработать комплексный подход, включающий математические модели каждой стадии производства частиц хитозанового аэрогеля. Такой подход позволит оптимизировать параметры ключевых стадий процесса, минимизируя себестоимость готового продукта.

Для предварительного проектирования технологической схемы получения хитозановых аэрогелей был разработан программный модуль, интегрирующий математические модели всех стадий технологического процесса, эмпирические данные и экономические расчеты.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

В рамках разработки программного комплекса для концептуального дизайна процесса получения частиц хитозановых аэрогелей было проведено математическое моделирование его ключевых стадий в соответствии с технологическими схемами, представленными на рис. 1 (см. цв. вкладку) для различных производительностей (см. таблицу на цв.вкладке), а именно:

- модель гидродинамики потоков в приемной емкости, используемой для проведения этапа гелеобразования;
- математическая модель кинетики ступенчатой замены растворителя в порах частиц хитозанового геля;
- программный модуль для расчета общих параметров процессов получения частиц хитозановых аэрогелей;

На каждом этапе существуют свои ограничения. До процесса гелеобразования необходимо приготовить растворы хитозана в уксусной кислоте и NaOH в воде. При этом хитозан растворим в кислоте при ее концентрации не ниже 0,1 М. Концентрация хитозана должна находиться в пределах от 1 до 3 мас. %, поскольку при содержании менее 1 мас. % частицы геля со стабильной структурой не образуются, а при превышении 3 мас. % раствор становится неоднородным и слишком вязким для диспергирования. Для инициирования процесса физического гелеобразования концентрация NaOH должна составлять не менее 0,1 М. На этапе замены растворителя одноступенчатая замена воды на органический растворитель приводит к усадке и разрушению пористой структуры. Кроме того, при использовании изопропанола необходимо достичь определенной концентрации спирта на последней ступени замены растворителя в порах частиц геля — как правило, не ниже 95 мас. %. Избыток воды в порах может вызвать разрушение структуры геля во время СК-СО₂ сушки, поскольку СК-СО₂ не образует гомогенную смесь с водой. Эти ограничения необходимо учитывать при моделировании данных процессов.

На первом этапе при моделировании стадии формирования частиц геля хитозана необходимо учитывать особенности проведения процесса: раствор хитозана диспергируется на капли с помощью форсунки, а затем, попадает в емкость с раствором щелочи, в котором каждая капля становится частицей геля. Конструкция установки (рис. 2, цв. вкладка) должна минимизировать застойные зоны, обеспечивать стабильное формирование частиц, их унос в емкость для сбора.

Для получения частиц геля хитозана в приемную емкость I с помощью питающей трубки 3 с диаметром отверстий D_0 с расходом Q_1 подается раствор щелочи, который свободно заполняет весь объем емкости I . Раствор хитозана распыляется на поверхность раствора щелочи с расходом Q_2 с помощью пневматической форсунки 2 . Капли раствора хитозана попадают на поверхность раствора щелочи, формируются частицы геля и происходит их унос из системы через выходной патрубок.

Таблица

Примеры результатов расчетов с использованием разработанного программного комплекса

Производительность, л/сут.,	Себестоимость, р./л	Диаграмма зависимости себестоимости*	Технологическая схема процесса получения частиц аэрогеля: 1 — хитозан, 2 — уксусная кислота, 3 — вода, 4 — гидроксид натрия, 5 — изопропиловый спирт, 6 — диоксид углерода
2	5753,0		
25	1585,2		

* $m_{ИПС}/m_{частиц}$ — отношение массы изопропилового спирта к массе частиц аэрогеля.

Вкладка к статье М.С. Мочаловой, К.М. Демкина, Н.В. Меньшутинной
«Программный комплекс для конденгуального дизайна процессов получения частиц хитозановых аэрогелей»

Вкладка к статье М.С. Мочаловой, К.М. Демкина, Н.В. Меньшутиной
 «Программный комплекс для концептуального дизайна процессов получения
 частиц хитозановых аэрогелей»



Рис. 1. Этапы математического моделирования процессов получения частиц аэрогелей на основе хитозана

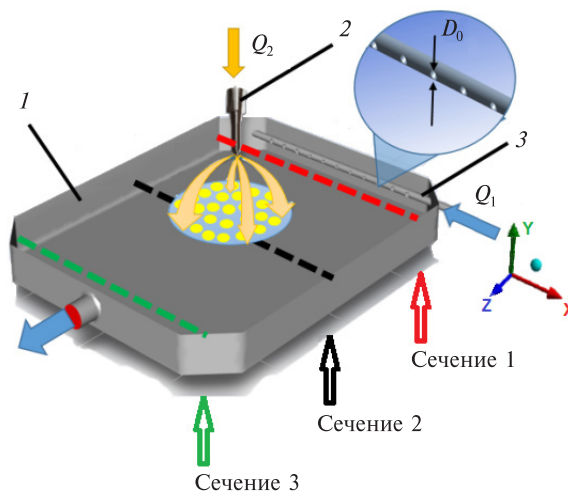
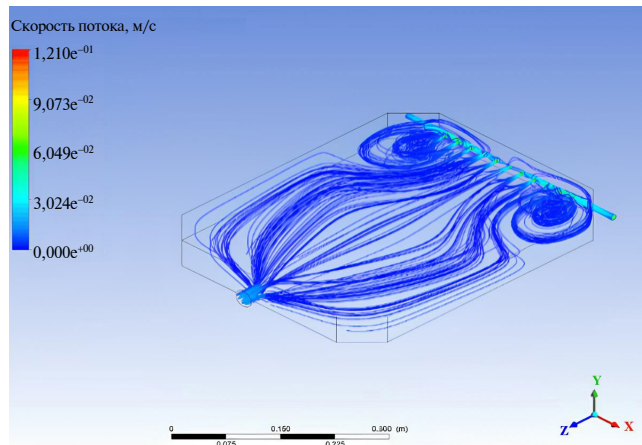
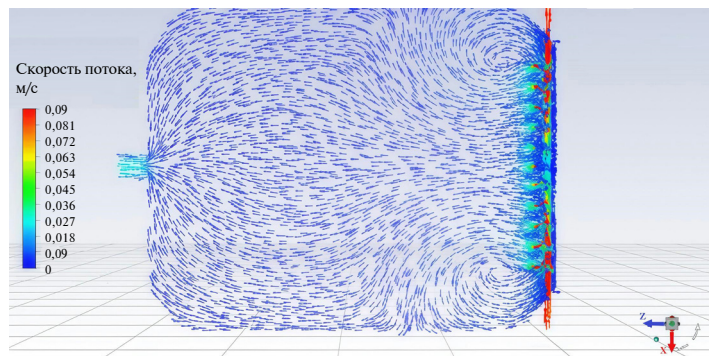


Рис. 2. Схематическое изображение установки для получения частиц геля на основе хитозана: 1 — приемная емкость; 2 — распылительная форсунка; 3 — питающая трубка; Q_1 — расход раствора щелочи, мл/мин; Q_2 — расход раствора хитозана, мл/мин

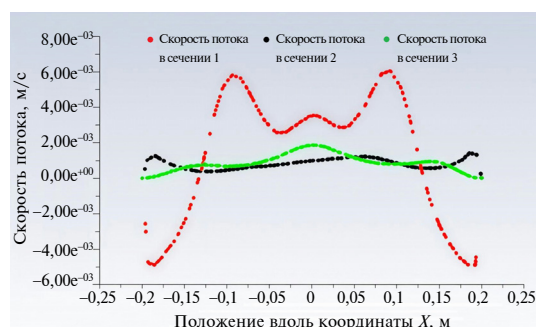
Вкладка к статье М.С. Мочаловой, К.М. Демкина, Н.В. Меньшутиной
 «Программный комплекс для концептуального дизайна процессов получения
 частиц хитозановых аэрогелей»



a



б



в

Рис. 3. Результаты математического моделирования получения частиц геля хитозана:
a — линии тока раствора щелочи в виртуальной геометрии приемной емкости с питающей трубкой;
б — распределение скорости потока раствора щелочи при расходе 80 мл/мин и диаметре отверстий
 7 мм; *в* — результаты расчета скорости потока раствора щелочи в приемной емкости в трех отрезках,
 представленных на рис. 2, при расходе 80 мл/мин и диаметре отверстий 7 мм

Вкладка к статье М.С. Мочаловой, К.М. Демкина, Н.В. Меньшутинной
 «Программный комплекс для концептуального дизайна процессов получения
 частиц хитозановых аэрогелей»

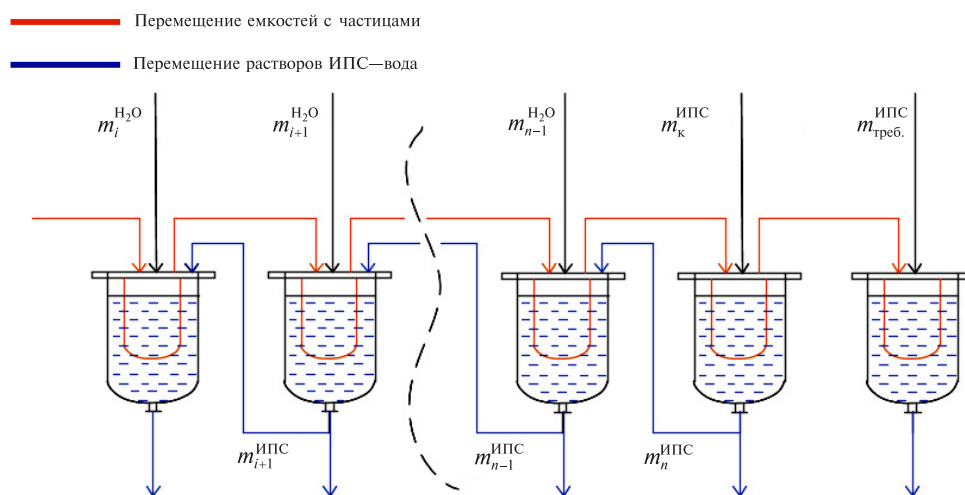


Рис. 4. Технологическая схема стадии замены растворителя и потоков растворов изопропилового спирта (ИПС) и воды между емкостями

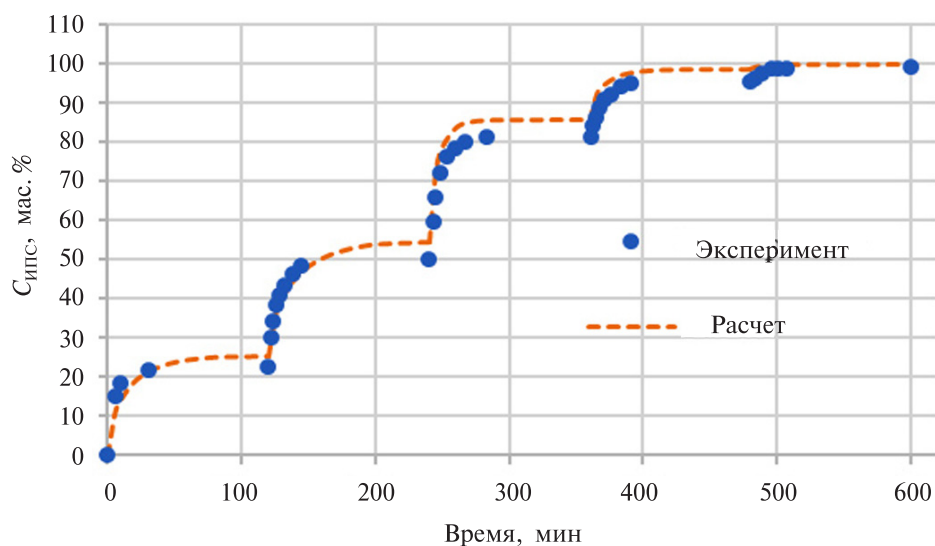


Рис. 5. Кинетика изменения концентрации изопропилового спирта (ИПС) при ступенчатой замене растворителя в порах частиц геля хитозана

Вкладка к статье М.С. Мочаловой, К.М. Демкина, Н.В. Меньшутиной
«Программный комплекс для концептуального дизайна процессов получения
частиц хитозановых аэрогелей»

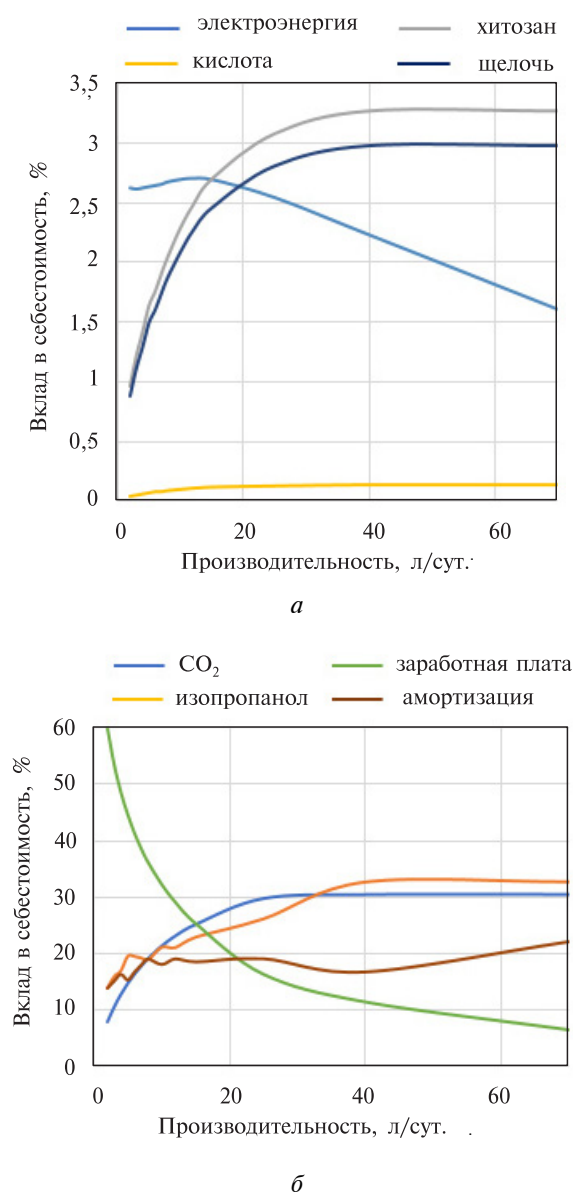


Рис. 7. Зависимость вклада основных (а) и вспомогательных (б) затрат в себестоимость продукции от производительности

Математическая модель приемной емкости используется для решения двух задач: 1) подбора виртуальной геометрии приемной емкости и изучения ее влияния на гидродинамику движения жидкости; 2) подбора характеристик питающей трубки и расхода среды через емкость I при формировании частиц геля хитозана. Модель представляет собой систему дифференциальных уравнений неразрывности и сохранения количества движения совместно с начальными и с граничными условиями:

- по скорости на входе;
- скольжения на поверхности контакта жидкости с воздухом по скорости;
- на поверхности контакта факела распыла с жидкостью;
- прилипания на стенках приемной емкости.

При проведении вычислительного эксперимента рассчитывается изменение профиля скорости течения раствора щелочи по сечениям приемной емкости (рис. 3*в*: сечения отмечены красной, черной и зеленой пунктирными линиями) в зависимости от геометрии приемной емкости и характеристик входного устройства (питающей трубки, входного патрубка).

Было проведено более 60 вычислительных экспериментов, ходе которых варьировались геометрия приемной емкости, диаметр, конфигурация питающей трубки и выходного патрубка, а также размеры и расположение отверстий на ее поверхности. В результате были определены геометрия приемной емкости, расход щелочного раствора и характеристики питающей трубки, обеспечивающие минимизацию зон возвратных течений и унос сформировавшихся частиц геля хитозана (рис. 3, *а*, *б*, *в*).

Оптимальной признана конфигурация приемной емкости, представляющая собой прямоугольный сосуд объемом 9,875 л (длина 50 см, ширина 40 см, глубина 5 см) со скошенными углами (угол скоса 45° , длина скоса 5 см) и с выходным отверстием диаметром 3 см. Питающая трубка установлена вдоль длинной стороны и снабжена 12-ю отверстиями диаметром 7 мм, равномерно распределенными по длине. Подвод щелочного раствора осуществляется через питающую трубку с расходом 80 мл/мин.

Полученные результаты математического моделирования были использованы при изготовлении физической модели пилотной установки для получения частиц геля хитозана, которая позволяет значительно сократить как время получения частиц, так и расход используемых материалов по сравнению с лабораторным способом получения частиц геля.

Объектом моделирования стадии замены растворителя в порах частиц геля хитозана являлся каскад емкостей, в которых организовано перемешивание растворов изопропанол — вода и частиц, находящихся в этих растворах (рис. 4 на цв. вкладке). Для удобства сепарирования частиц от растворов на пилотном масштабе перед началом процесса ступенчатой замены растворителя их помещают в контейнер из сетки с отверстиями микронного размера. После достижения равновесия на каждой из ступеней замены растворителя сетку с частицами изымают из емкости и переносят на следующую ступень замены растворителя. Поскольку этот процесс является ресурсозатратным, проводится рекуперация изопропанола между емкостями. После достижения равновесия в i -ой емкости раствор изопропанол — вода из нее сливают, при необходимости разбавляют до нужной концентрации и переносят в $(i-1)$ -ю емкость, которая предназначена для проведения ступени замены растворителя с меньшей концентрацией.

Математическая модель описывает диффузию компонентов в частицах геля хитозана в сферических координатах, предполагая симметрию и постоянство коэффициента диффузии на малых временных интервалах. Ее входными параметрами являются:

- концентрация растворителя внутри частиц геля и внутри емкости до начала замены растворителя в массовых процентах;
- соотношение объема частиц к объему растворителя;
- распределение частиц геля хитозана по размерам;
- требуемая точность определения концентраций в процентах.

Граничные условия при моделировании задавались на основе допущений о начальной и внешней концентрации растворителя в системе, исходя из параметров заданной ступени процесса. На каждом этапе замены растворителя рассчитывалось время достижения равновесия и материальные затраты, что позволяло точно определить параметры цикла для каждой ступени [23]. Для проверки адекватности математической модели был проведен эксперимент по исследованию кинетики ступенчатой замены растворителя. Содержание изопропанола в растворе определялось с использованием вибрационного плотнометра ВИП-2МР. С учетом погрешности прибора, пересчета плотности в концентрацию, а также возможных отклонений при отборе проб, суммарная неопределенность при определении массовой концентрации изопропанола не превышала $\pm 2\%$. Сравнение полученных расчетных и экспериментальных данных представлено на рис. 5 (цв. вкладка).

Среднее отклонение расчетных значений от экспериментальных не превышало 6% , что свидетельствует об адекватности разработанной математической модели. Таким образом, разработанная модель позволяет рассчитывать время достижения равновесия в системе изопропанол—вода—частицы геля хитозана в зависимости от параметров проведения ступенчатой замены растворителя: концентрации растворителя внутри частиц геля и внутри емкости до начала замены растворителя и отношения объемов частиц геля хитозана и растворителя.

Все стадии процесса получения частиц аэрогелей хитозана находят отражение на третьем этапе моделирования — в программном модуле для концептуального дизайна. Для повышения эффективности процесса получения частиц хитозановых аэрогелей и ресурсосбережения был написан программный модуль на языке программирования Python, позволяющий рассчитать параметры процесса на пилотных установках исходя из заданных технических и экономических характеристик. По предварительной оценке, самый существенный вклад в себестоимость продукции вносят сырьевые затраты на процесс ступенчатой замены растворителя, поэтому параметры именно этого процесса оптимизируются. Критерием оптимизации является удельная себестоимость материала. В структуру модуля входят алгоритмы, позволяющие определять оптимальное количество ступеней в каскаде аппаратов и оптимальное соотношение масс растворителя и частиц геля хитозана. За счет этого достигается минимизация себестоимости продукции при соблюдении технологических ограничений.

Входными данными являются концентрации реагентов: хитозана, уксусной кислоты, щелочи (гидроксида натрия) и исходного изопропилового спирта. Кроме того, в качестве входных параметров необходимо задать требуемую концентрацию изопропилового спирта в частицах геля для проведения процесса

СК-сушки, производительность, заработную плату сотрудников, цены на реагенты и электроэнергию.

Параметры процесса СК-сушки определяются на основе ранее проведенных исследований научной группы профессора Н.В. Меньшутиной, включая экспериментальные данные и расчеты, выполненные с использованием ранее разработанных математических моделей [19—21]. На основе заданных значений с помощью программного модуля автоматически рассчитываются материальные затраты на каждой стадии процесса и объемы технологических аппаратов (включая емкости для приготовления растворов, приемную емкость для гелеобразования, каскад емкостей для ступенчатой замены растворителя и аппарат для проведения сверхкритической сушки). Кроме того, формируется предварительная концептуальная технологическая схема производственной линии, адаптированная под заданные условия.

Таким образом, разработанный программный комплекс объединяет математические модели, экспериментальные данные и технико-экономические расчеты в единую систему, ориентированную на задачи концептуального дизайна и оптимизацию экономических затрат. Программный комплекс служит не только инструментом расчета, но и средством формирования инженерного решения на ранней стадии проектирования.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

С использованием разработанного программного продукта была проведена серия расчетов технологической пилотного производства получения частиц аэрогелей хитозана схемы с варьированием производительности (таблица), результаты которых представлены на рис. 6.

При увеличении производительности себестоимость частиц хитозановых аэрогелей уменьшается. При этом при достижении производительности 25 л/сут. себестоимость выходит на плато и меняется незначительно, что связано с оптимизацией параметров процесса.

Зависимости вкладов различных затрат (на сырье, обслуживание, энергию и амортизацию) в себестоимость получаемого материала от заданной производительности приведены на рис. 7 (см. цв. вкладку).

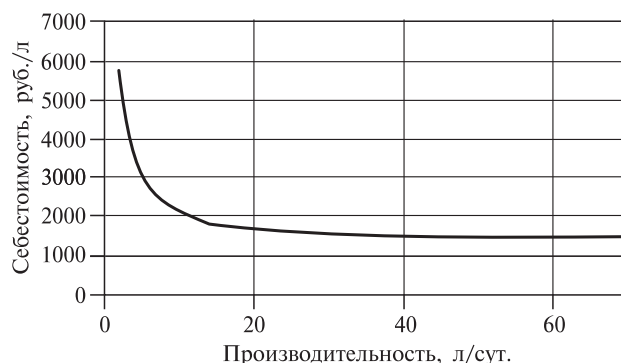


Рис. 6. Зависимость себестоимости литра полученных частиц аэрогеля на основе хитозана от производительности

Затраты на заработную плату фиксированы в виде оплаты труда трех работников за смену (по одному работнику на каждую стадию процесса), поэтому при увеличении производительности вклад заработной платы снижается обратно пропорционально увеличению количества произведенного материала.

Затраты на реагенты (хитозан, кислоту, щелочь и углекислый газ) увеличиваются пропорционально производительности из-за снижения себестоимости материала при увеличении производительности. Однако при выходе себестоимости на плато вклады затрат на вышеуказанные реагенты перестают изменяться и принимают постоянное значение.

Вклад затрат на изопропиловый спирт в себестоимость увеличивается с ростом производительности, однако менее выражено по сравнению с остальными компонентами, поскольку именно эти расходы, как самые весомые, являются оптимизируемыми параметрами при моделировании процесса. При производительности выше 25 л/сут., когда дальнейшее увеличение количества ступеней замены растворителя становится экономически нецелесообразным, рост затрат на спирт ускоряется и становится сопоставимым с другими видами сырьевых расходов.

Затраты на электроэнергию непосредственно связаны с этапом СК-сушки. Их вклад уменьшается с увеличением производительности, так как аппараты высокого давления с большим объемом являются более энергоэффективными. Вклад затрат на амортизацию является постоянной величиной, за исключением незначительных колебаний, которые связаны с оптимизацией количества ступеней для замены растворителя и объема емкостей. Однако при увеличении производительности увеличиваются стоимости аппарата для СК-сушки и емкостей для замены растворителя, поскольку их объемы растут. Поэтому вклад затрат на амортизацию в общую себестоимость материала увеличивается.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Разработана математическая модель, описывающая гидродинамику потоков в приемной емкости, в которой осуществляется образование частиц хитозанового геля. С ее помощью была выбрана геометрия приемной емкости и определены характеристики питающей трубки, расход среды через приемную емкость, которые обеспечивают стабильное формирование частиц геля, минимизацию зон возвратных течений и унос частиц геля из системы. На основе результатов математического моделирования была создана физическая установка, которая демонстрирует высокую эффективность. Полученные результаты (расходы, производительность) были использованы в расчетах материальных потоков на стадии гелеобразования и интегрированы в общую структуру программного комплекса.

Разработана математическая модель, описывающая кинетику замены растворителя в порах частиц хитозановых гелей. Подтверждена ее адекватность для описания массопереноса в процессе ступенчатой замены растворителя. Разработанная математическая модель позволяет рассчитывать время проведения процесса и материальные затраты на проведение каждой из ступеней замены растворителя в порах частиц хитозанового геля.

Разработан программный комплекс, который обеспечивает автоматизированный расчет параметров процесса получения частиц аэрогелей из хитозана и

позволяет выполнять концептуальный дизайн технологической схемы с учетом всех стадий (подготовки растворов, гелеобразования, замены растворителя и сверхкритической сушки) и экономических показателей. На основе проведенных расчетов установлено, что оптимизация параметров процесса получения частиц хитозанового аэрогеля позволяет существенно снизить расход изопропилового спирта и, как следствие, уменьшить себестоимость производства материала.

Анализ экономических затрат на производство частиц аэрогелей из хитозана показал, что с увеличением производительности себестоимость материала снижается до (около 25 л/сут.). Это свидетельствует о наличии локального оптимума, при котором достигается наилучший баланс между эффективностью оборудования и экономическими затратами на него. Анализ энергоэффективности процесса показал, что увеличение объема аппаратов для СК-сушки способствует снижению затрат на электроэнергию, так как аппараты высокого давления большого объема более энергоэффективны по сравнению с аппаратами малого объема (до 2 л). При этом амортизационные затраты возрастают с ростом объема производства, что требует балансировки между снижением затрат на сырье и увеличением стоимости оборудования.

Разработанный программный комплекс может быть использован в рамках предварительного проектирования пилотного производства частиц хитозановых аэрогелей; он позволяет осуществлять концептуальный дизайн технологической схемы, оптимизировать материальные затраты процесса получения частиц аэрогелей на основе хитозана и минимизировать себестоимость материала в зависимости от требуемой производительности для конкретного пользователя.

Работа выполнена в рамках государственного задания FSSM-2025-007.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Будко Е.В., Черникова Д.А., Ямпольский Л.М., Яцюк В.Я. // Российский медико-биологический вестник имени академика И.П. Павлова. 2019. Т. 27. № 2. С. 274.
2. Демкин К.М., Комарова Д.С., Мочалова М.С., Ловская Д.Д. // Успехи в химии и химической технологии. 2021. Т. 35. № 10 (245). С. 80.
3. Шиндряев А.В., Кожевников Ю.Ю., Лебедев А.Е., Меньшутина Н.В. // Успехи в химии и химической технологии. 2017. Т. 31. № 6 (187). С. 130.
4. Yılmaz P., Öztürk Er.E., Bakırdere S. // J. Materials Research and Technology. 2019. Vol. 8. No 6. P. 5201.
5. Özdemir E., Sendemir-Urkmez A., Yesil-Celiktas O. // J. Supercritical Fluids. 2013. Vol. 75. P. 120.
6. Ловская Д.Д., Каталевич А.М., Лебедев А.Е. // Успехи в химии и химической технологии. 2013. Т. 27. № 1 (141). С. 79.
7. Obaidat R.M., Tashtoush B.M., Bayan M.F., T. Al Bustami R., Alnaief M. // AAPS PharmSciTech. 2015. Vol. 16. No 6. P. 1235.
8. Мкртчян Э.С., Курносов Д.А., Буракова И.В., Бураков А.Е., Ананьева О.А. // Проблемы техногенной безопасности и устойчивого развития. 2021. С. 40.
9. Duong Y.H.P., Le T.M., Le P.K., Tran V.T. // Iranian Polymer J. 2023. V. 32. No 9. P. 1199.
10. Fan P., Zeng Y., Zaldivar-Silva D., Agüero L., Wang S. // Molecules (Basel, Switzerland). 2023. Vol. 28. No 3. P. 1473.
11. Мочалова М.С., Ловская Д.Д., Меньшутина Н.В. // Успехи в химии и химической технологии. 2020. Т. 34. № 8 (231). С. 95.
12. Begall M.J., Schweidtmann A.M., Mhamdi A., Mitsos A. // Computers & Chemical Engineering. 2023. Vol. 171. P. 108140.
13. Subrahmanyam R., Gurikov P., Dieringer P., Sun M., Smirnova I. // Gels. 2015. Vol. 1. No 2. P. 291.

14. Гордионюк И.А., Сушлова Е.Н., Лебедев А.Е. // Успехи в химии и химической технологии. Сб. науч. тр. 2022. Т. XXXVI. С. 26.
15. Menshutina N., Majouga A., Uvarova A., Lovskaya D., Tsygankov P., Mochalova M., Abramova O., Ushakova V., Morozova A., Silantyev A. // Gels. 2022. Vol. 8. No 12. P. 796.
16. Меньшутина Н.В., Ловская Д.Д., Лебедев А.Е., Лебедев Е.А. // Сверхкритические Флюиды: Теория и Практика. 2017. Т. 12. № 2. С. 35.
17. Sahin I., Özbakır Y., Inonu Z., Ulker Z., Erkey C. // Gels. 2017. Vol. 4. No 1. P. 3.
18. Kang X., Mao L., Shi J., Liu Y., Zhai B., Xu J., Jiang Y., Lichtfouse E., Jin H., Guo L. // Environmental Chemistry Letters. 2024. Vol. 22. No 2. С. 815.
19. Лебедев А.Е. Дис. ... канд. тех. наук. РХТУ имени Д.И. Менделеева. Москва, 2015.
20. Ловская Д.Д. Дис. ... канд. техн. наук. РХТУ имени Д.И. Менделеева. Москва, 2017.
21. Худеев И.И. Дис. ... канд. техн. наук. РХТУ имени Д.И. Менделеева. Москва, 2022.
22. Цыганков П.Ю. Дис. ... канд. техн. наук. РХТУ имени Д.И. Менделеева. Москва, 2018.
23. Мочалова М.С. Дис. ... канд. техн. наук. РХТУ имени Д.И. Менделеева. Москва, 2024.

SOFTWARE PACKAGE FOR CONCEPTUAL DESIGN OF PROCESSES FOR OBTAINING CHITOSAN AEROGELS PARTICLES

M.S. Mochalova — Mendeleev Russian University of Chemical Technology, Moscow, Russia. ORCID 0000-0003-1200-8125. E-mail: mochalovamarie@yandex.ru

K.M. Demkin — Mendeleev Russian University of Chemical Technology, Moscow, Russia. ORCID 0000-0002-3299-6397. E-mail: DemkinChem@yandex.ru (*for correspondence*)

N.V. Menshutina — Mendeleev Russian University of Chemical Technology, Moscow, Russia. ORCID: 0000-0001-7806-1426. E-mail: chemcom@muctr.ru

A software package has been developed in the Python programming language for the conceptual design of a process flow diagram for producing chitosan aerogel particles. The software package covers the calculation of the entire production chain, including the stages of solution preparation, gelation, solvent replacement in the gel pores, and supercritical drying. The structure of the package includes a mathematical model of flow hydrodynamics in a receiving tank, a model of diffusion mass transfer in the porous structure of chitosan gel particles, a material balance calculation, an equipment parameter calculation unit, and a technical and economic assessment subsystem. Using the software package, the user can determine the optimal parameters for the process of producing chitosan aerogel particles and create a preliminary process flow diagram for the production process adapted to the specified constraints. The software package is designed to scale the technology for producing chitosan aerogel particles and calculate the cost of production at various productivity levels.

Keywords: supercritical drying, aerogel, gel formation, stepwise solvent replacement, conceptual design, mathematical modeling.

The work was carried out within the framework of the State Task FSSM-2025-007.

REFERENCES

1. Budko E.V., Chernikova D.A., Yampolsky L.M., Yatsyuk V.Ya. // Russian Medical and Biological Bulletin named after academician. I.P. Pavlov. 2019. Vol. 27. No 2. P. 274.
2. Demkin K.M., Komarova D.S., Mochalova M.S., Lovskaya D.D. // Uspekhi v himii i himicheskoy tekhnologii. 2021. Vol. 35. No 10 (245). P. 80 (*in Russ*).
3. Shindryaev A.V., Kozhevnikov Yu.Y., Lebedev A.E., Menshutina N.V. // Uspekhi v himii i himicheskoy tekhnologii. 2017. Vol. 31. No 6 (187). P. 130 (*in Russ*).

4. *Yılmaz P., Öztürk Er.E., Bakırdere S.* // J. Materials Research and Technology. 2019. Vol. 8. No 6. P. 5201.
 5. *Ozdemir E., Sendemir-Urkmez A., Yesil-Celiktas O.* // J. Supercritical Fluids. 2013. Vol. 75. P. 120.
 6. *Lovskaya D.D., Katalevich A.M., Lebedev A.E.* // Uspekhi v himii i himicheskoy tekhnologii. 2013. Vol. 27. No 1 (141). P. 79 (in Russ).
 7. *Obaidat R.M., Tashtoush B.M., Bayan M.F., T. Al Bustami R., Alnaief M.* // AAPS PharmSciTech. 2015. Vol. 16. No 6. P. 1235.
 8. *Mkrtychyan E.S., Kurnosov D.A., Burakova I.V., Burakov A.E., Ananyeva O.A.* // Problems of technogenic safety and sustainable development. 2021. P. 40.
 9. *Duong Y.H.P., Le T.M., Le P.K., Tran V.T.* // Iranian Polymer J. 2023. Vol. 32. No 9. P. 1199.
 10. *Fan P., Zeng Y., Zaldivar-Silva D., Agüero L., Wang S.* // Molecules (Basel, Switzerland). 2023. Vol. 28. No 3. P. 1473.
 11. *Mochalova M.S., Lovskaya D.D., Menshutina N.V.* // Uspekhi v himii i himicheskoy tekhnologii. 2020. Vol. 34. No 8 (231). P. 95 (in Russ).
 12. *Begall M.J., Schweidtmann A.M., Mhamdi A., Mitsos A.* // Computers & Chemical Engineering. 2023. Vol. 171. P. 108140.
 13. *Subrahmanyam R., Gurikov P., Dieringer P., Sun M., Smirnova I.* // Gels. 2015. Vol. 1. No 2. P. 291.
 14. *Gordionok I.A., Suslova E.N., Lebedev A.E.* // Uspekhi v himii i himicheskoy tekhnologii. collection of scientific papers. 2022. Vol. 36. P. 26 (in Russ.).
 15. *Menshutina N., Majouga A., Uvarova A., Lovskaya D., Tsygankov P., Mochalova M., Abramova O., Ushakova V., Morozova A., Silantsev A.* // Gels. 2022. Vol. 8. No 12. P. 796.
 16. *Menshutina N.V., Lovskaya D.D., Lebedev A.E., Lebedev E.A.* // Russ. J. Phys. Chem. B. 2017. Vol. 11. P. 1296
 17. *Sahin I., Özbakır Y., Inonu Z., Ulker Z., Erkey C.* // Gels. 2017. Vol. 4. No 1. P. 3.
 18. *Kang X., Mao L., Shi J., Liu Y., Zhai B., Xu J., Jiang Y., Lichtfouse E., Jin H., Guo L.* // Environmental Chemistry Letters. 2024. Vol. 22. No 2. P. 815.
 19. *Lebedev A.E.* PhD thesis. Mendeleev Russian University of Chemical Technology. Moscow, 2015 (in Russ.).
 20. *Lovskaya D.D.* PhD thesis: Mendeleev Russian University of Chemical Technology. Moscow, 2017 (in Russ.).
 21. *Khudeev I.I.* PhD thesis. Mendeleev Russian University of Chemical Technology. Moscow, 2022 (in Russ.).
 22. *Cygankov P.Yu.* PhD thesis. Mendeleev Russian University of Chemical Technology. Moscow, 2018 (in Russ.).
 23. *Mochalova M.S.* PhD thesis. Mendeleev Russian University of Chemical Technology. Moscow, 2024 (in Russ.).
-
-