

Н.Г. Гуськова<sup>1,2</sup>, аспірант,  
В.А. Святний<sup>1</sup>, д-р техн. наук, проф.

<sup>1</sup> Донецький національний технічний університет, г. Покровськ, Україна

<sup>2</sup> Высшая техническая школа университета прикладных наук Бингена, Германия  
huskovanadiia@gmail.com

## Моделирование процесса расщепления энантиомеров с использованием кристаллизатора

*Работа посвящена вопросам моделирования процесса взаимодействия веществ внутри кристаллизатора. В качестве основы для разработки модели было использовано вещество аспарагин, соединения которого обладают свойством хиральности и разнятся в зависимости от пространственной ориентации участка молекулы. Особенностью использования кристаллизатора является возможность получения обоих типов аспарагина в ходе одной реакции. Математическая модель кристаллизации аспарагина построена на основе системы обыкновенных дифференциальных уравнений. Проанализированы вопросы выбора начальных условий для оценки работы кристаллизатора. На основе построенной математической модели исследованы зависимости между показателями скорости потока и темпом кристаллообразования*

**Ключевые слова:** процесс расщепления, энантиомеры, скорость кристаллообразования, сопротивление среды, начальные условия, моделирование.

DOI: 10.31474/1996-1588-2017-2-25-60-68

### Введение

Процесс кристаллизации вещества представляет собой расщепление исходного материала в соответствии с требованиями, выдвигаемыми к конечному продукту использования [1-2]. Зачастую такие процессы имеют большую значимость в химической промышленности, аграрной отрасли, косметологии и др. Однако наибольшую вовлеченность в процессы преобразования одного вещества в другое демонстрируют в сфере медицины [3-4]. Использование новейших технологий, стремительно развивающиеся методы переработки и усовершенствованные параметры оценки позволяют использовать вещества, степень воздействия которых гораздо выше предшественников. Следует заметить, что процесс получения этих веществ гораздо более трудоемкий, требующий высокой компетенции в вопросах оценки химических и физических свойств соединения.

Энантиомеры - вещества, обладающие свойством хиральности, что подразумевает несовмещение в пространстве структур двух стереоизомеров, наделенных одинаковым строением и различной пространственной ориентацией [5]. Основная сложность при использовании в медицинских целях стереоизомера с необходимой структурой состоит в том, что в природе такие соединения встречаются в виде одного энантиомера, распад которого на элементы невозможен без химической реакции и воздействия определенных температур [1-2].

В качестве примера для разработки модели было использовано вещество *аспарагин*, соединения которого обладают свойством хиральности и разнятся в зависимости от пространственной ориентации участка молекулы [1-5].

Физические свойства двух типов аспарагина различны в отношении вкуса и запаха. Однако наиболее существенное различие – вовлеченность в процессы, протекающие в организме человека. Молекулы L – аспарагина, полученные в ходе расщепления вещества, используются в фармацевтике для создания лекарственных препаратов. В противовес этому, участие в процессе D – аспарагина оказывает губительное воздействие на организм человека. Данная особенность и послужила предпосылкой к рассмотрению процессов кристаллизации как способу получения разделенных молекул аспарагина.

**Цель работы** состоит в построении математической модели процесса получения разделенных молекул аспарагина и исследовании характера взаимодействия веществ внутри кристаллизатора.

**Задача исследования.** На основе полученных математических соотношений необходимо построить компьютерную модель, которая позволит оценивать следующие показатели процесса кристаллизации: приращение числа молекул, сопротивление потока, оказываемое внутри кристаллизационной колбы, начальные условия для старта реакции, объем соединения, вступающего в реакцию на начальном этапе.

**Взаимодействие веществ внутри кристаллизатора**

Кристаллизатор, используемый для проведения экспериментов [1-4], представляет собой среду, внутри которой элементы подвергаются воздействию температуры и давления. Особенностью использования кристаллизатора является возможность получения обоих типов аспарагина в ходе одной реакции. Строение молекулы L/D-аспарагина представлено на рис. 1.

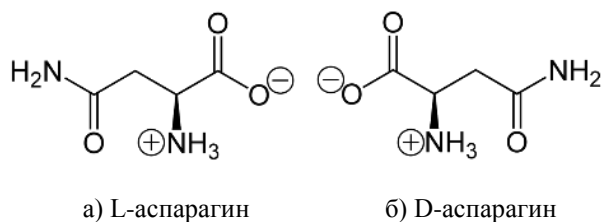


Рисунок 1 - Различия в строении молекулы L/D-аспарагина.

В ходе реакции взвесь, содержащая на начальном этапе большее количество L – аспарагина, распадается на кристаллы, которые осуществляют движение вверх по трубке кристаллизатора. Однако из-за сопротивления среды и разной массы элементов, кристаллы занимают различные позиции в пространстве. Разное положение в пространстве обусловлено и тем, что молекулы чистого L – аспарагина гораздо легче, что позволяет им по завершению реакции кристаллизации подниматься вверх по трубке, в то время, как второй вид молекул оседает вниз. Схематически модель взаимодействия представлена на рис. 2.

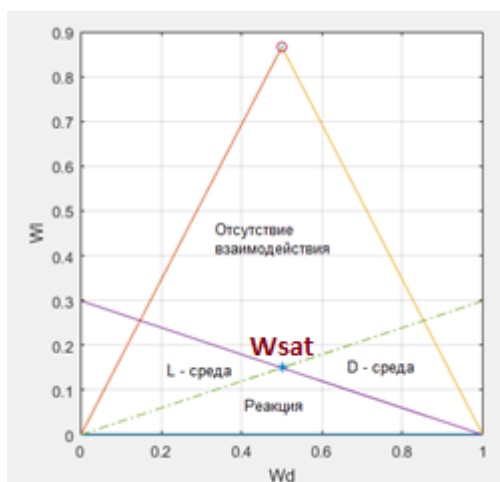


Рисунок 2 - Схема взаимодействия веществ внутри кристаллизатора

Наиболее крупные агломераты соединений, не распавшиеся в ходе реакции на два элемента «устилают» дно кристаллизатора, что является

предпосылкой к осуществлению дробления таких взвесей с помощью устройства, находящегося за пределами кристаллизационной колбы. После попадания наиболее крупных соединений в устройство, производится запуск системы дробления, которая за счет оказываемого давления и мощности, преобразует соединения в более мелкие. По завершению этого процесса измельченные соединения аспарагина отправляются в кристаллизатор для повторного осуществления реакции. [3-4]. Количество отверстий для получения конечного продукта может варьироваться в зависимости от объема вещества, поданного на начальной стадии реакции.

Начальная точка имеет координаты  $(W_0^L, W_0^D)$ . Эта позиция внутри треугольника определяет число молекул каждого вида в исходном соединении аспарагина. Для проведения симуляции в реакцию вступает соединение, содержащее большее число молекул L- аспарагина и меньшее количество молекул D. Именно такую структуру имеет вещество, сформированное путем естественного синтеза. На следующем этапе соединение начинает постепенно распадаться, что может быть проиллюстрировано, как возникновение молекул типа D. Необходимо заметить, что образование таких молекул возможно только до определенного предела. Реакция после достижения максимального значения будет направлена на переход в равновесное состояние, путем перемещения в точку  $W_{sat}$ .

**Построение математической модели кристаллизации аспарагина**

Математически процесс описывается с помощью системы обыкновенных дифференциальных уравнений [1-2, 6-7], которые описывают необходимые для оценки реакции характеристики каждого из видов аспарагина.

Среди факторов, определяющих ход реакции, можно выделить следующие:

- 1) приращение числа молекул (скорость распада основного вещества на два типа молекул);
- 2) сопротивление потока, оказываемое внутри кристаллизационной колбы;
- 3) выбор начальных условий для старта реакции;
- 4) объем соединения, вступающего в реакцию на начальном этапе.

Уравнение для определения числа молекул L - аспарагина

$$\frac{d\mu_0^L}{dt} = J^L.$$

Уравнение для определения размера молекул L - аспарагина

$$\frac{d\mu_1^L}{dt} = L_{nuc} * J^L + \mu_0^L * G^L.$$

Уравнение для определения площади поверхности молекул L - аспарагина

$$\frac{d\mu_2^L}{dt} = L_{nuc}^2 * J^L + 2 * \mu_1^L * G^L.$$

Уравнение для определения объема молекул L - аспарагина

$$\frac{d\mu_3^L}{dt} = L_{nuc}^3 * J^L + 3 * \mu_1^L * G^L.$$

Уравнение для определения числа молекул D - аспарагина

$$\frac{d\mu_0^D}{dt} = J^D.$$

Уравнение для определения размера молекул D - аспарагина

$$\frac{d\mu_1^D}{dt} = L_{nuc} * J^D + \mu_0^D * G^D.$$

Уравнение для определения площади поверхности молекул D - аспарагина

$$\frac{d\mu_2^D}{dt} = L_{nuc}^2 * J^D + 2 * \mu_1^D * G^D.$$

Уравнение для определения объема молекул D - аспарагина

$$\frac{d\mu_3^D}{dt} = L_{nuc}^3 * J^D + 3 * \mu_1^D * G^D.$$

Для оценки количества кристаллов каждого типа аспарагина в работе используются уравнения, описывающие процесс их образования.

$$\frac{dm^L}{dt} = \frac{-V * \rho_{cryst} * \pi}{6} * \psi * (L_{nuc}^3 * J^L + 3 * \mu_2^L * G^L),$$

$$\frac{dm^D}{dt} = \frac{-V * \rho_{cryst} * \pi}{6} * \psi * (L_{nuc}^3 * J^D + 3 * \mu_2^D * G^D).$$

На основании уравнений для оценки общей массы каждого из типов вещества рассчитывается массовая доля  $W^L$  и  $W^D$ . Следует отметить, что в расчете массовой доли, особое значение имеет масса растворителя, находящегося в кристаллизаторе. Масса данного вещества учитывается как постоянная величина, и решение об изменении ее значения может быть принято вследствие замены вида растворителя внутри аппарата

$$W^L = \frac{m^L}{m^L + m^D + m^S},$$

$$W^D = \frac{m^D}{m^L + m^D + m^S}.$$

Для определения точки равновесия внутри кристаллизатора используется показатель устойчивости  $W_{sat}$

$$W_{sat}^L = \frac{(1 - K_{sat}) * \left(\frac{1}{W^D} - \frac{W^L}{W^D} - 1\right)}{K_{sat} + \left(\frac{1}{W^D} - \frac{W^L}{W^D} - 1\right)},$$

$$W_{sat}^D = \frac{(1 - K_{sat}) * \left(\frac{1}{W^L} - \frac{W^D}{W^L} - 1\right)}{K_{sat} + \left(\frac{1}{W^L} - \frac{W^D}{W^L} - 1\right)},$$

$$W_{sat} = \frac{W_{sat}^L}{2 * W_{sat}^D + 1}.$$

Параметр  $W_{sat}$  определяет точку равновесия между жидкой составляющей кристаллизатора и областями, наполненными продуктами распада энантиомера.

### Выбор начальных условий для оценки работы кристаллизатора

Кристаллизатор, посредством которого осуществляется расщепление двух типов энантиомеров, представляет собой среду, внутри которой происходит взаимодействие жидкой и газообразной составляющих. В ходе реакции взвесь, содержащая на начальном этапе большее количество L – аспарагина, распадается на кристаллы, которые осуществляют движение вверх по трубке кристаллизатора. Однако из-за сопротивления среды и разной массы элементов кристаллы занимают различные позиции в пространстве. Схематически модель внутреннего устройства кристаллизатора можно представить в виде треугольника (рис. 2).

Внутреннее пространство треугольника можно условно разделить на такие составляющие части, как:

- область отсутствия взаимодействия;
- реакция в среде L;
- реакция в среде D;
- область бинарной реакции.

Каждая из этих областей характеризуется определенными особенностями, основные из которых будут рассмотрены ниже.

Области, отмеченные как L/D среда, характеризуются протеканием реакции с использованием только одного типа энантиомеров. Это значит, что при протекании реакции в данной области образуются только молекулы соответствующего вида. При этом ход реакции будет остановлен в момент достижения количества энантиомеров определенного уровня. Область, характеризующая

яся отсутствием взаимодействия между энантиомерами, представляет собой участок внутри кристаллизатора, на котором невозможен процесс взаимодействия. Область, находящаяся под пересечением двух линий, представляет наибольший интерес для исследования, поскольку на этом участке будет происходить реакция с участием двух типов энантиомеров. В идеале, число образованных в ходе этой реакции кристаллов, будет стремиться к равновесному. То есть, число образованных L и D кристаллов будет одинаковым. Из рис. 2 можно определить координаты, описывающие положение треугольника в пространстве. Для оценки течения реакции в зонах L и D были добавлены линии, проходящие через координаты углов треугольника и точку взаимодействия – Wsat. Координаты точки взаимодействия выбраны следующим образом:

$$x = 0.5, y = \frac{(1 - W^L - W^D) * \sqrt{3}}{2} = 0.1496.$$

Полученные уравнения, описывающие ограничительные линии, выглядят следующим образом:

$$y_1 = \frac{0.1496 - 0.1496 * x}{0.5}$$

$$y_2 = \frac{0.1496 * x}{0.5}$$

Смысл добавления линий состоит в необходимости оценки начальных условий для реакции. При старте реакции из любой точки этой области, ее конечная стадия будет находиться на добавленной линии. Такой результат будет свидетельствовать о том, что молекулы данного типа энантиомеров не покидают границ заданной области, а в ходе реакции образуется только один вид энантиомера.

Выбор точки для старта реакции может быть описан с помощью следующего алгоритма:

1. Выбор координат начальной точки.
2. Расчет значений конечной точки.
3. Подсчет параметров для передачи встроенной функции ode45.

В качестве примеров для демонстрации были выбраны точки из каждой расчетной области. В табл. 1 приведена информация о начальных условиях, заданных параметрах для вычисления и факте наблюдения реакции взаимодействия.

Таблица 1. Результаты экспериментов

Область исследования	Координаты Wsat	Результат	Иллюстрация
Отсутствие взаимодействия	(0.5;0.6)	Реакция отсутствует	Рис. 3
L - среда	(0.06;0.08)	Формирование L-энантиомеров	Рис. 4
D - среда	(0.8;0.2)	формирование D-энантиомеров	Рис. 5
Область реакции	(0.5;0.07)	формирование обоих видов вещества	Рис. 6

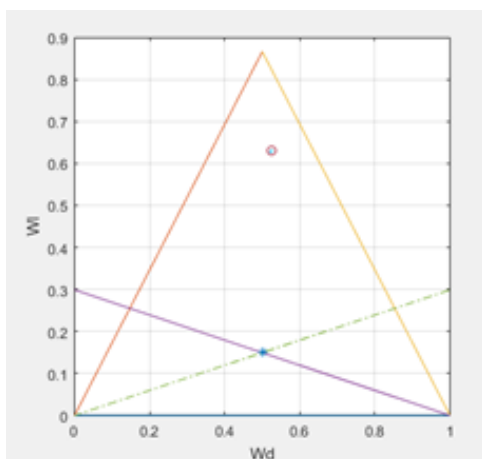


Рисунок 3 – Отсутствие реакции

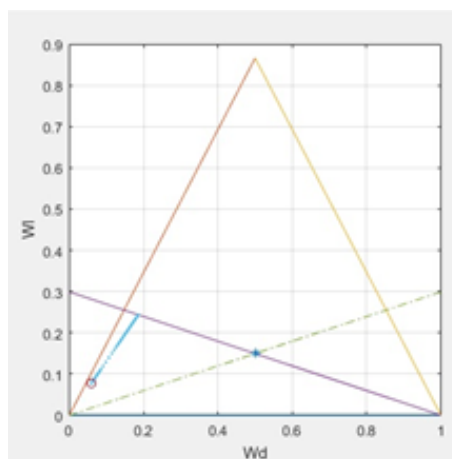


Рисунок 4 – Формирование L-энантиомеров

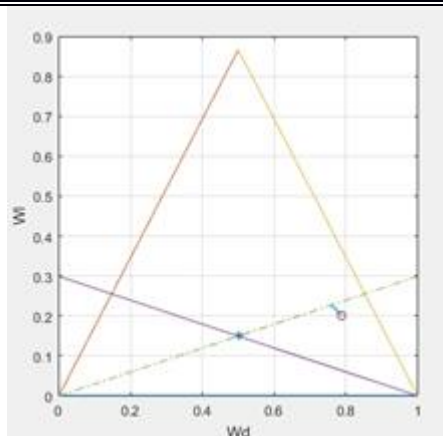


Рисунок 5 – Формирование D-энантиомеров

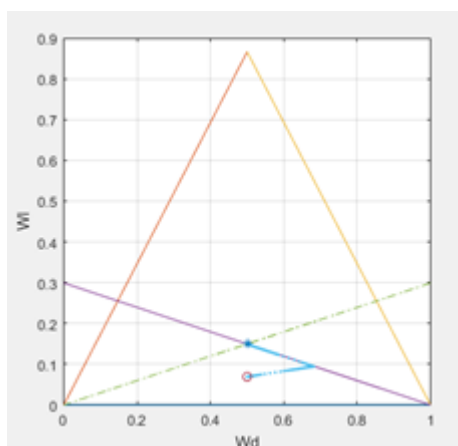


Рисунок 6 - Эталонная схема кристаллообразования

**Оценка зависимости между показателями скорости потока и темпом кристаллообразования**

В ходе исследования процессов кристаллизации было выделено несколько основных факторов, воздействующих на протекание реакции расщепления аспарагина на D и L элементы.

Все исследуемые факторы можно разделить на две группы: внешние и внутренние.

Под внешними факторами протекания реакции здесь и далее будут оцениваться характеристики реакции, не зависящие от внутренней среды кристаллизатора. К таким факторам можно отнести температуру, при которой происходит реакция, поскольку она регулируется извне.

Внутренними факторами реакции принято считать не только химические характеристики элементов, но и свойства среды, внутри которой происходит реакция, а также вещества, принимающие участие в процессе. В ходе описываемого эксперимента произведена оценка влияния таких показателей, как скорость внутреннего потока среды, обозначенной здесь и далее, как

$G^{L/D}$ , темп зарождения частиц внутри среды  $J^{L/D}$ .

Основные предположения модели заключаются в том, что скорость внутреннего потока имеет меньшее значение, чем темпы зарождения новых частиц аспарагина. Исходя из графика, приведенного на рис. 7, можно сделать вывод о том, что реакция происходит в той зоне кристаллизатора, где равномерно образуются молекулы каждого вида аспарагина. Уравнения, описываемые процесс формирования исследуемых величин, приведены ниже.

Уравнение для определения скорости внутреннего потока среды L

$$G^L = \begin{cases} k g_1 * \exp\left(\frac{-k g_2}{T}\right) * (S^L - 1)^{k g_3}, & \text{если } S^L > 1, \\ G^L = 0, & \text{если } S^L \leq 1. \end{cases}$$

Уравнение для определения скорости внутреннего потока среды D

$$G^D = \begin{cases} k g_1 * \exp\left(\frac{-k g_2}{T}\right) * (S^D - 1)^{k g_3}, & \text{если } S^D > 1, \\ G^D = 0, & \text{если } S^D \leq 1. \end{cases}$$

Поскольку процесс зарождения кристаллов каждого из видов состоит из двух этапов – целесообразно использовать уравнения, описывающие процесс в отдельности. На начальном этапе формируется первичное образование вещества, зависящее от определенных ранее начальных условий (в частности, от выбора точки старта реакции).

Уравнение для оценки темпов кристаллообразования на начальном этапе

$$J_{min}^L = k p_1 * T * \exp\left(\frac{-k p_2}{T}\right) * \exp\left(\frac{-w^D + w^L}{k p_3}\right) * \sqrt{\ln\left(\frac{\rho_{cryst}}{\rho_s * w_{sat}^L}\right) * (S^L * \rho_{cryst} * w_{sat}^L)^{\frac{7}{3}}} * \left(\exp\left(\frac{-k p_4 * \left(\ln\left(\frac{\rho_{cryst}}{\rho_s * w_{sat}^L}\right)\right)^3}{\ln(S^L)^2}\right)\right)$$

Последующий процесс кристаллообразования оценивается следующим образом:

$$J_{sec}^L = ks_1 * exp\left(\frac{-ks_2}{T}\right) * (S^L - 1)^{ks_3} * (\mu_3^L)^{ks_4},$$

если  $S^L > 1, \mu_3^L > 0,$   
иначе  $J_{sec}^L = 0.$

Общая скорость кристаллообразования описывается соотношением

$$J^L = J_{m \in L} + J_{sec}^L.$$

В ходе экспериментов предполагается произвести замену значений переменных для моделирования реакций, результаты которых будут отличны от эталонной.

**Описание экспериментов**

На основе построенной модели был произведен ряд экспериментов, которые можно объединить в несколько групп [8-10]. К первой группе экспериментов можно отнести действия, направленные на увеличение (уменьшение) скорости образования частиц, снижение (увеличение) скорости внутреннего потока, увеличение (уменьшение) внутреннего сопротивления.

1. Увеличение скорости образования частиц / Снижение скорости внутреннего потока

Предполагается, что результаты этих двух экспериментов будут аналогичными, поскольку снижение скорости внутреннего потока приведет к ускорению реакции между веществами. Аналогичная ситуация будет наблюдаться и в том случае, когда скорость среды останется прежней, а образование частиц ускорится (рис. 7-8).

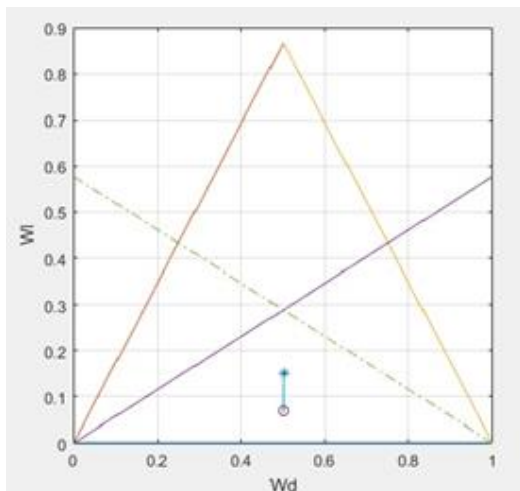


Рисунок 7 - Увеличение скорости кристаллообразования (параметры  $WI=0.46, Wd=0.46, JI=7.08+14, GI=2.65-06$ )

Анализ результатов свидетельствует о том, что проведенные эксперименты, как и пред-

полагалось, имеют одинаковые показатели расщепления. Наблюдаемая картина эксперимента объясняется преобладанием скорости кристаллообразования над скоростью внутреннего сопротивления среды. Как следствие – кристаллы образуются быстро, реакция из начальной точки практически сразу переходит в состояние равновесия.

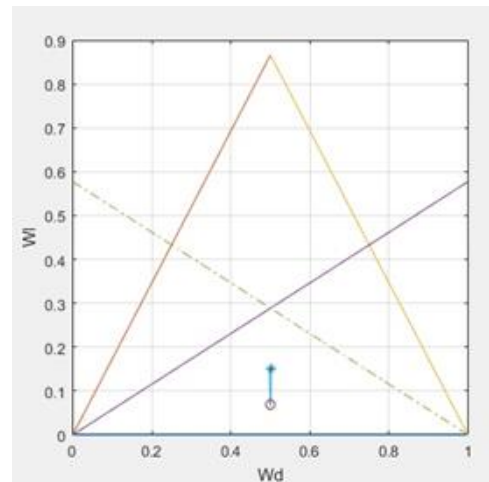


Рисунок 8 - Снижение скорости внутреннего сопротивления среды (параметры  $WI=0.46, Wd=0.46, JI=7.08+04, GI=2.65-16$ )

2. Уменьшение скорости образования частиц / Увеличение внутреннего сопротивления

Суть данного эксперимента – оценка течения реакции в условиях недостаточности скорости для образования частиц. В первом эксперименте произведено уменьшение скорости кристаллообразования, во втором – увеличение внутреннего сопротивления.

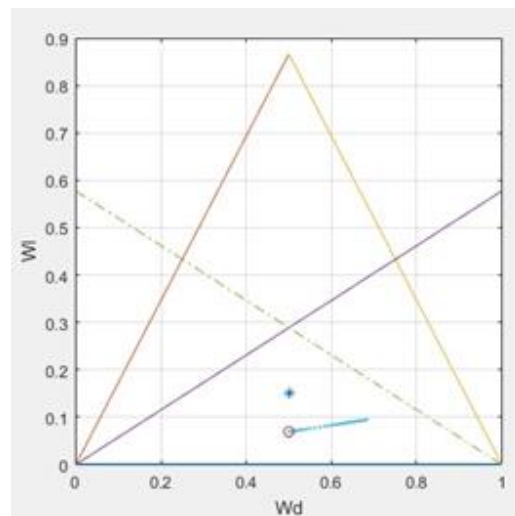


Рисунок 9 - Снижение скорости кристаллообразования (параметры  $WI=0.46, Wd=0.46, JI=0.708, GI=2.65-06$ )

Результаты проведенных экспериментов также являются аналогичными, поскольку демонстрируют недостаточность скорости внутри реакции для ее завершения (рис. 9-10). Несмотря на то, что начальные условия были выбраны верно, ход реакции прерван на пересечении границы с областью наблюдения.

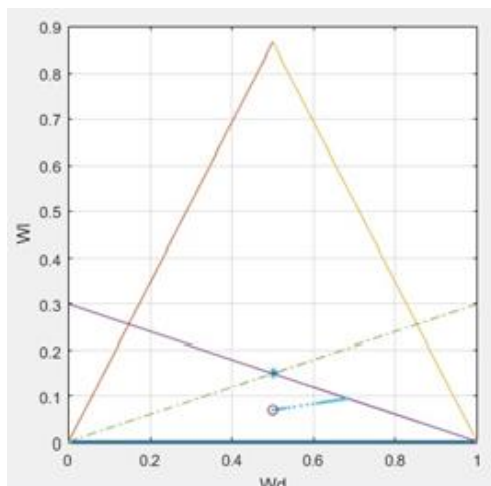


Рисунок 10 - Увеличение внутреннего сопротивления среды (параметры  $Wl=0.46$ ,  $Wd=0.46$ ,  $Jl=7.08+04$ ,  $Gl=2.65+04$ )

3. Одновременное снижение и увеличение показателей реакции

Снижение показателей, характеризующих процесс кристаллообразования, - причина остановки реакции в виду недостаточной мощности.

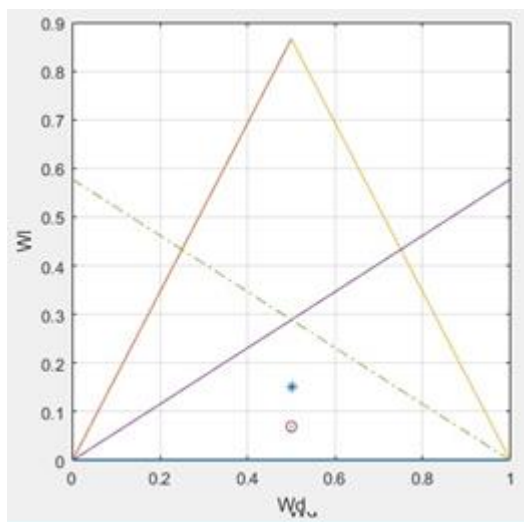


Рисунок 11 - Снижение показателей (параметры  $Wl=0.46$ ,  $Wd=0.46$ ,  $Jl=7.08-06$ ,  $Gl=2.65-16$ )

Как видно на рис. 11, реакция кристаллообразования не наблюдается. Отсутствует процесс преобразования аспрагина в вещества типа D и L. Ситуация, обратная вышеописанной, наблю-

дается в том случае, если оба показателя будут увеличены. Результат такого эксперимента приведен на рис. 12.

Одновременный рост скорости кристаллообразования и скорости внутреннего сопротивления не оказывает влияния на ход реакции. Наиболее значительным результатом такого эксперимента можно считать сокращение времени реакции за счет изменения параметров.

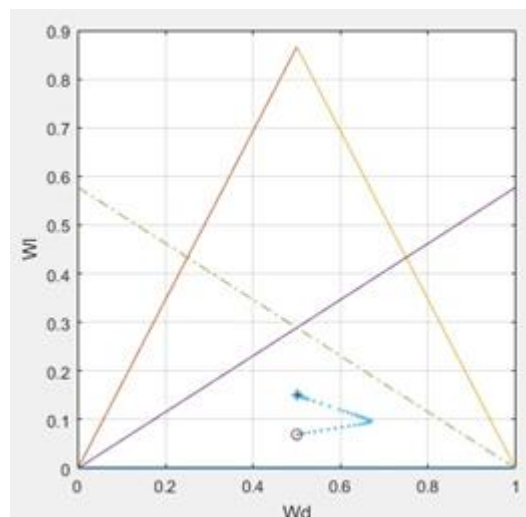


Рисунок 12 - Увеличение параметров (параметры  $Wl=0.46$ ,  $Wd=0.46$ ,  $Jl=7.08+14$ ,  $Gl=2.65+04$ )

### Заключение

Таким образом, в работе рассмотрены вопросам моделирования процесса взаимодействия веществ внутри кристаллизатора. В качестве основы для разработки модели было использовано вещество аспрагин, соединения которого обладают свойством хиральности и имеют различную пространственную ориентацию молекул. Использование кристаллизатора позволяет получить оба типа молекул аспрагина: L-аспрагин, который используется в фармацевтике для создания лекарственных препаратов, и D-аспрагин, оказывающий негативное влияние на организм человека. Данная особенность и послужила предпосылкой к рассмотрению процессов кристаллизации как способу получения разделенных молекул аспрагина.

Математическая модель кристаллизации аспрагина была построена на основе системы обыкновенных дифференциальных уравнений. Проанализированы вопросы выбора начальных условий для оценки работы кристаллизатора. На основе построенных математических соотношений была создана компьютерная модель, которая позволила оценивать такие показатели процесса кристаллизации, как приращение числа молекул, сопротивление потока, оказываемое внутри кристаллизационной колбы, начальные условия для старта реакции, объем соединения, вступающего

в реакцию на начальном этапе.

Проанализировано влияние выбранных значений параметров на темпы кристаллообразования и скорость внутреннего сопротивления. Экспериментальное изменение этих показателей свидетельствует о правильности выдвинутых гипотез и подтверждает теоретическое обоснование реакции.

Показано, что одновременный рост скорости кристаллообразования и скорости внутреннего сопротивления не оказывает влияния на ход реакции. Преобладание скорости кристаллообразования над скоростью внутреннего сопротивления среды приводит к быстрому образованию кристаллов, и реакция из начальной точки практически сразу переходит в состояние равновесия.

Выбор корректных начальных значений для моделирования работы кристаллизатора позволил сформировать получение необходимых

типов вещества в ожидаемом количестве.

Особое внимание было уделено построению ограничивающих прямых, что позволило корректно визуализировать результаты.

**Научная новизна** состоит в построении математической модели процесса получения разделенных молекул аспарагина и исследовании характера взаимодействия веществ внутри кристаллизатора.

**Практическое значение состоит в разработке** компьютерной модели кристаллизации, которая позволяет оценивать следующие показатели процесса кристаллизации: приращение числа молекул, сопротивление потока, оказываемое внутри кристаллизационной колбы, начальные условия для старта реакции, объем соединения, вступающего в реакцию на начальном этапе.

### Список литературы

1. Mangold M. Modelling geometrical and fluid-dynamic aspects of a continuous fluidized bed crystallizer for separation of enantiomers / M. Mangold, D. Khlopov, E.k Temmelb, H. Lorenzb, A. Seidel-Morgenstern // Chemical Engineering Science. – 2017. – №160. – P. 281-290.
2. Mangold M. Nonlinear model reduction of a continuous fluidized bed crystallizer/ / M. Mangold, L. Feng, D. Khlopov, S. Palis, P. Benner, D.Binev, A. Seidel-Morgenstern // J. Comput. Appl. Math. – 2015. – №289. – P. 253-266.
3. Binev D. Study of crystal size distributions in a fluidized bed crystallizer/ D. Binev., A. Seidel-Morgenstern, H. Lorenz // Chemical Engineering Science. – 2015. – №133. – P. 116-124.
4. Binev D. Continuous separation of isomers in fluidized bed crystallizers / D. Binev., A. Seidel-Morgenstern, H. Lorenz // Cryst. Growth Des. –.2016. – №16. – P. 1409-1419.
5. Lorenz H. Processes to separate enantiomers / H. Lorenz, A. Seidel-Morgenstern // Angew. Chem. Int. Ed. – 2014. – №5 (53), P. – 1218-1250.
6. Гуськова Н.Г. Оптимизация параметров распределенной модели массового взаимодействия/ Н.Г. Гуськова, В.А. Святный // Наукові праці ДонНТУ. Серія "Інформатика, кібернетика та обчислювальна техніка" (ІКОТ-2016). – 2016. – №2(23). – С. 110-114
7. Святный В.А. Разработка и реализация математической модели стабилизации взаимодействия белков актина и миозина/ В.А. Святный, Н.Г. Гуськова // Наукові праці ДонНТУ. Серія "Інформатика, кібернетика та обчислювальна техніка" (ІКОТ-2016). – 2016. – №1(22). – С. 146-151.
8. Дмитриева О.А. Параллельные численные методы моделирования динамических объектов: монография / О.А. Дмитриева. – Красноармейск: ГВУЗ «ДонНТУ», 2016. – 384 с
9. Dmitrieva O. Parallel Step Control. Development of parallel algorithms of the step variation for simulation of stiff dynamic systems / O. Dmitrieva, L. Feldman. – Lambert Academic Publishing. – 2013. – 72p.
10. Дмитриева О. А. Моделирование жестких систем на основе коллокационных схем растяжения – сжатия / О.А. Дмитриева, Н.Г. Гуськова // Наукові праці Донецького національного технічного університету. Серія: Інформатика, кібернетика та обчислювальна техніка. - 2017. - № 1 (24). - С. 76-84.

### References

1. Mangold, M. and others, (2017), "Modelling geometrical and fluid-dynamic aspects of a continuous fluidized bed crystallizer for separation of enantiomers" /, D. Khlopov, E.k Temmelb, H. Lorenzb, A. Seidel-Morgenstern, Chemical Engineering Science, P. 281–290
2. Mangold, M. and others, (2015), "Nonlinear model reduction of a continuous fluidized bed crystallizer", J. Comput. Appl. Math., P. 253–266.
3. Binev, D. and others, (2015), "Study of crystal size distributions in a fluidized bed crystallizer", Chemical Engineering Science, P. 116–124.
4. Binev, D., Seidel-Morgenstern, A., Lorenz, A., (2016), "Continuous separation of isomers in fluidized bed crystallizers", Cryst. Growth Des., P. 1409–1419.
5. Lorenz, H., Seidel-Morgenstern, A., Lorenz, A., (2014), "Processes to separate enantiomers", Angew. Chem. Int. Ed., P. – 1218–1250.
6. Huskova, N., Svyatnyy, V., (2016), "Optimization of the parameters of a distributed model of mass



interaction" [Optimizacija parametrov raspredelenoj modeli massovogo vzaimodejstvija], Scientific works of DonNTU. A series of "Informatics, Cybernetics and Computer Science", P. 110-114

7. Svyatnyy, V., Huskova, N., (2016), "Development and implementation of a mathematical model for the stabilization of the interaction of proteins of actin and myosin", [Razrabotka i realizacija matematicheskoj modeli stabilizacii vzaimodejstvija belkov aktina i miozina], Scientific works of DonNTU. A series of "Informatics, Cybernetics and Computer Science", P.146-151.

8. Dmitrieva, O., (2016), "Parallel numerical methods for modeling dynamic objects", [Parallel'nye chislennye metody modelirovaniya dinamicheskikh ob"ektov], Pokrovsk: «DonNTU», 384 p.

9. Dmitrieva, O., Feldman, L., (2013), "Parallel Step Control. Development of parallel algorithms of the step variation for simulation of stiff dynamic systems", Lambert Academic Publishing, 72p.

10. Dmitrieva, O., Huskova, N. (2017), "Simulation of rigid systems based on collocation stretching-compression schemes", [Issledovanie jeffektivnosti programmnoj sistemy parallel'nogo modelirovaniya dinamicheskikh ob"ektov], Scientific works of Donetsk National Technical University. Series: Computer Science, Cybernetics and Computer Science, P. 76-84.

Надійшла до редакції 18.12.2017

**Н.Г. ГУСЬКОВА<sup>1,2</sup>, В.А. СВЯТНИЙ<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Донецький національний технічний університет, м Покровськ, Україна

<sup>2</sup>Вища технічна школа університету прикладних наук Бінгена, Німеччина

### **МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ РОЗЦЕПЛЕННЯ ЕНАНТІОМЕРІВ З ВИКОРИСТАННЯМ КРИСТАЛІЗАТОРА**

Робота присвячена питанням моделювання процесу взаємодії речовин всередині кристалізатора. В якості основи для розробки моделі було використано речовину Аспарагін, з'єднання якої мають властивість хіральності і різняться в залежності від просторової орієнтації ділянки молекули. Особливістю використання кристалізатора є можливість отримання обох типів аспарагіна в ході однієї реакції. Математична модель кристалізації аспарагіна побудована на основі системи звичайних диференціальних рівнянь. Проаналізовано питання вибору початкових умов для оцінки роботи кристалізатора. На основі побудованої математичної моделі досліджено залежності між показниками швидкості потоку і темпами утворення кристалів

*Ключові слова: процес розщеплення, енантіомери, швидкість утворення кристалів, опір середовища, початкові умови, моделювання.*

**N. HUSKOVA<sup>1,2</sup>, V. SVYATNYI<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Donetsk National Technical University, Pokrovsk, Ukraine

<sup>2</sup>Higher Technical School of Bingen University of Applied Sciences, Germany

### **SIMULATION OF THE PROCESS OF CLEAVAGE OF ENANTIOMERS WITH THE USE OF A CRYSTALLIZER**

The work is focused on the simulation of the process of enantiomers separation. As a basis for the development of the model, Asparagine was used – the compounds which have the property of chirality and differ depending on the spatial orientation of the site of the molecule. The use of the crystallizer makes it possible to obtain both types of asparagine molecules: L-asparagine, which is used in pharmaceuticals to create medicines, and D-asparagine, which has a negative effect for the human body. This feature also served as a prerequisite for the consideration of crystallization processes as a method for obtaining separated asparagine molecules.

The mathematical model of asparagine crystallization was constructed on the basis of a system of ordinary differential equations. The question is a choice of initial conditions for an estimation of work of a crystallizer are analysed. On the basis of the constructed mathematical relationships, a computer model was created that made it possible to evaluate such indices of the crystallization process as the increment in the number of molecules, the resistance of the flow inside the crystallization flask, the initial conditions for starting the reaction, and the volume of the compound reacting at the initial stage.

The influence of the selected values of the parameters on the rate of crystal formation and the rate of internal resistance is analysed. The experimental change of these indices testifies to the correctness of the hypotheses put forward and confirms the theoretical substantiation of the reaction.

It is shown that a simultaneous increase in the rate of crystal formation and the rate of internal resistance has no effect on the course of the reaction. The predominance of the rate of crystal formation over the rate of internal resistance of the medium leads to the rapid formation of crystals, and the reaction from the initial point almost immediately goes into equilibrium.

The choice of the correct initial values for simulation the work of the crystallizer made it possible to generate the required types of substance in the expected quantity. Particular attention was paid to the construction of bounding lines, which allowed to correctly visualize the results.

*Key words: splitting process, enantiomers, the rate of crystal formation, medium resistance, initial conditions, simulation.*