

МОДЕЛИРОВАНИЕ ГИДРОДИНАМИКИ В ПОРИСТЫХ ГЕМОСТАТИЧЕСКИХ ПОВЯЗКАХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА РЕШЕТОЧНЫХ УРАВНЕНИЙ БОЛЬЦМАНА

И.В. Лебедев, Е.Ю. Саленко, А.А. Уварова, Н.В. Меньшутина

Кафедра химического и фармацевтического инжиниринга, Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, ул. Героев Панфиловцев, 20, Москва, Российская Федерация, 125047
E-mail: igor170491@yandex.ru, anastasia.uvarova2@yandex.ru, chemcom@muctr.ru

Разработана дискретная модель для описания гидродинамики жидкости в пористом теле. Модель учитывает гетерогенность и многофазность системы, состоящей из твердого каркаса тела, пор, заполненных воздухом, и жидкости. Модель разработана на основе метода решеточных уравнений Больцмана совместно с методом псевдопотенциалов для корректного моделирования жидкой и газовой фаз в одной системе. Для повышения точности расчета на границе раздела фаз было использовано уравнение состояния Карнахана-Старлинга. Были проведены вычислительные эксперименты по моделированию впитывания тестового раствора в пористой структуре гемостатических повязок на основе хитозанового аэрогеля на мезоуровне. Были подобраны входные параметры модели, соответствующие изучаемой системе, и проведено сравнение сорбционной емкости тестового раствора для экспериментальных образцов и соответствующих им сгенерированных ранее цифровых структур. Расчетная сорбционная емкость соответствовала экспериментальной. Предложенная модель позволяет описывать гидродинамику многофазной системы, в частности, движение жидкости в пористой среде и прогнозировать ее сорбционную емкость. В качестве пористой среды модель использует цифровые пористые структуры, полученные с использованием клеточно-автоматного подхода. В модели могут использоваться различные уравнения состояния такие, как уравнение Ван-дер-Ваальса, Карнахана-Старлинга и Пенга-Робинсона для повышения точности моделирования. Кроме того, модель позволяет работать с многокомпонентными системами и способна описывать движение многокомпонентной жидкости, в частности, крови и растворенного в ней активного фармацевтического ингредиента. Модель может быть использована совместно с другими дискретными моделями, в частности, с клеточными автоматами, позволяя моделировать несколько процессов в одной системе, например, растворение и движение активного фармацевтического ингредиента в пористой среде.

Ключевые слова: моделирование, клеточные автоматы, пористые материалы, аэрогели, метод решеточных уравнений Больцмана, гидродинамика

HYDRODYNAMICS MODELLING IN POROUS HEMOSTATIC BANDAGES USING THE LATTICE BOLTZMANN METHOD

I.V. Lebedev, E.Iu. Salenko, A.A. Uvarova, N.V. Menshutina

The Department of Chemical and Pharmaceutical Engineering, Mendeleev University of Chemical Technology or Russia, Geroev Panfilovtsev str., 20, Moscow, 125047, Russian Federation
E-mail: igor170491@yandex.ru, anastasia.uvarova2@yandex.ru, chemcom@muctr.com

The discrete model has been developed to describe the hydrodynamics of a fluid in a porous body. The model considers the heterogeneity and multiphase nature of the system, consisting of a solid body, air-filled pores, and liquid. The developed model based on the lattice Boltzmann equation method together with the pseudopotential method for correct modeling of the liquid and gas phases in one system. To improve the accuracy of calculations at the interface, the Carnahan-Starling equation of state was used. Computational experiments were carried out to simulate the absorption of a test solution in the porous structure of hemostatic bandages based on chitosan

aerogel at the mesoscale. The model input parameters corresponding to the system under study were selected, and the sorption capacity of the test solution for the experimental samples and the corresponding previously generated digital structures were compared. The calculated sorption capacity corresponded to the experimental one. The proposed model makes it possible to describe the hydrodynamics of a multiphase system, in particular, the movement of liquid in a porous medium and predict its sorption capacity. As a porous medium, the model uses digital porous structures obtained using the cellular automata approach. The model can use various equations of state such as the Van-der-Waals, Carnahan-Starling and Peng-Robinson equations to improve the accuracy of the simulation. In addition, the model allows you to work with multicomponent systems and is capable of describing the movement of a multicomponent liquid, in particular, blood and the active pharmaceutical ingredient dissolved in it. The model can be used in conjunction with other discrete models, in particular cellular automata, allowing the simulation of multiple processes in a single system, for example, the dissolution and movement of an active pharmaceutical ingredient in a porous medium.

Keywords: modelling, cellular automata, porous materials, aerogels, lattice Boltzmann method, hydrodynamics

Для цитирования:

Лебедев И.В., Саленко Е.Ю., Уварова А.А., Меньшутина Н.В. Моделирование гидродинамики в пористых гемостатических повязках с использованием метода решеточных уравнений Больцмана. *Рос. хим. ж. (Ж. Рос. хим. об-ва)*. 2025. Т. LXIX. № 2. С. 100–107. DOI: 10.6060/rcj.2025692.12.

For citation:

Lebedev I.V., Salenko E.Iu., Uvarova A.A., Menshutina N.V. Hydrodynamics modelling in porous hemostatic bandages using the lattice Boltzmann method. *Ros. Khim. Zh.* 2025. V. 69. N 2. P. 100–107. DOI: 10.6060/rcj.2025692.12.

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время разработка новых гемостатических средств местного действия представляет собой важную задачу. Сложность их разработки обусловлена необходимостью изучения процессов гидродинамики в разрабатываемом гемостатическом средстве, которое представляет собой многокомпонентную и многофазную систему, состоящую из твердой структуры гемостатического средства, например, пористой повязки или губки, воздуха, крови и раневого экссудата. Все эти факторы напрямую оказывают влияние на гемостатическую эффективность. Таким образом, разработка гемостатических средств представляет собой комплексную задачу, которая требует проведения большого количества экспериментальных исследований, что, в свою очередь, ведет к увеличению времени и стоимости разработки. Применение современных методов математического и компьютерного моделирования позволит частично заменить натурные эксперименты вычислительными, что дает возможность решить данную проблему. Кроме того, вычислительные эксперименты позволят получить детальную картину процесса в системе и изучить влияние на гемостатическую эффективность геометрии гемостатического средства.

Данная работа посвящена моделированию гидродинамики жидкости в гемостатических средствах местного действия – аэрогельных повязках на основе хитозана и прогнозированию их сорбционной емкости.

В настоящий момент для описания гидродинамики широко используется система уравнений Навье-Стокса. Однако для исследуемой системы, которая содержит несколько фаз и имеет сложную геометрию, решение уравнений Навье-Стокса связано с большими вычислительными сложностями [1]. Альтернативным способом моделирования гидродинамики является метод решеточных уравнений Больцмана (lattice Boltzmann method, LBM) [2, 3].

В данной работе для моделирования гидродинамики жидкости в пористой структуре был использован метод решеточных уравнений Больцмана с модификацией для многофазных систем.

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

За последние десятилетия метод решеточных уравнений Больцмана получил широкое распространение как метод моделирования гидродинамики на мезоуровне. Его преимуществами являются относительная простота вычислений, а также возможность расчета многофазных и многокомпонентных систем без усложнения модели [4].

Суть метода решеточных уравнений Больцмана заключается в том, что система разбивается на одинаковые дискретные ячейки, которые характеризуют заданный элементарный объем и обладают следующими параметрами: состояние (твердая или жидкая), количество жидкости в ячейке, возможные направления движения жидкости. Расчет разбит на дискретные шаги по времени (итерации). Каждую итерацию определенное количество жидкости перемещается из ячейки в соседние (фаза распространения потоков) (рис. 1), после чего происходит расчет соударения внутри ячейки (фаза столкновения) [5, 6].

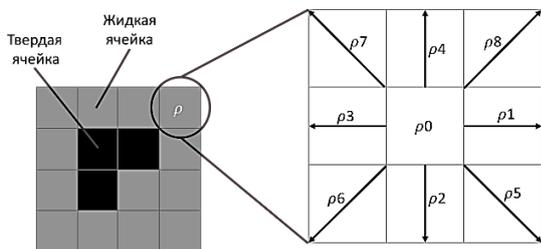


Рис. 1. Распределение жидкости в ячейке по направлениям
Fig. 1. Distribution of liquid in a cell in directions

На рис. 1 представлено поле из 16 ячеек. Количество жидкости в ячейке характеризуется дискретной плотностью, которая приводится в условных модельных единицах. ρ обозначена общая дискретная плотность жидкости в ячейке, которая распределена по 9 возможным направлениям i . Это означает, что на следующем шаге по времени заданная дискретная плотность жидкости ρ_i переместится из данной ячейки в соответствующую соседнюю, например, жидкость ρ_2 переместится в нижнюю ячейку. После перемещения жидкости осуществляется расчет соударений внутри ячейки, в результате чего меняются дискретные плотности жидкости по направлениям. Математически эти фазы могут быть представлены с помощью уравнения Больцмана в дискретной форме:

$$f_i(\vec{r} + \vec{e}_i t^*, t + t^*) = f_i(\vec{r}, t) - \Omega_i, \quad (1)$$

где t^* – дискретный шаг по времени, i – индекс направления движения, e_i – единичный вектор, f_i – дискретная плотность жидкости на направлении i , Ω_i – оператор столкновений на направлении i .

В качестве оператора столкновения чаще всего используется приближение Бхатнагара – Гросса – Крука (Bhatnagar-Gross-Krook, BGK):

$$\Omega_i = -\frac{f_i(\vec{r}, t) - f_i^{eq}(\vec{r}, t)}{\tau}, \quad (2)$$

где $f_i^{eq}(\vec{r}, t)$ – равновесная функция распределения, которая определяет дискретную плотность на направлении i в равновесном состоянии, τ – дискретный параметр релаксации [7–9].

Равновесная функция распределения имеет следующий вид:

$$f_i^{eq}(\vec{r}, t) = d_i M \left[1 + 3\vec{e}_i \cdot \vec{u} + \frac{9|\vec{e}_i \cdot \vec{u}|^2}{2} - \frac{3|\vec{u}|^2}{2} \right], \quad (3)$$

где d_i – вес направления решетки, ρ – дискретная плотность жидкости в ячейке, \vec{u} – макроскопическая скорость в ячейке. Веса направлений решетки d_i рассчитываются для каждой конкретной решетки. ρ и \vec{u} рассчитываются следующим образом:

$$\rho = \sum_{i=0}^N f_i(\vec{r}, t), \quad (4)$$

$$\rho \vec{u} = \sum_{i=0}^N \vec{e}_i f_i(\vec{r}, t), \quad (5)$$

где N – количество возможных направлений движения.

В силу своей дискретности метод решеточных уравнений Больцмана подходит для моделирования гидродинамики в системах со сложной геометрией таких, как пористые структуры, и при моделировании многокомпонентных систем [10]. Кроме того, расчеты каждого шага по времени являются относительно простыми и их сложность не зависит от геометрии системы, а только от ее размера.

Однако ключевой особенностью изучаемой системы – пористой гемостатической повязки, является наличие газовой фазы в пористом теле, которая постепенно вытесняется жидкой. Классический метод решеточных уравнений Больцмана не может моделировать систему жидкость-газ. Кроме того, гемостатическая повязка сорбирует жидкость, то есть в системе присутствует взаимодействие между жидкостью и твердой структурой повязки. Для таких систем используется модификация с использованием метода псевдопотенциалов [11–14]. Суть данной модификации состоит в том, что вводятся силы, воздействующие на итоговую макроскопическую скорость в ячейке:

$$\rho \vec{u} = \sum_{i=0}^N \vec{e}_i f_i(\vec{r}, t) + \tau \vec{F}, \quad (6)$$

где \vec{F} – сумма сил, действующих в ячейке.

В [11] вводятся две силы, которые отвечают за взаимодействие между жидкой и газовой фазой (\vec{F}_c) и твердой фазой соответственно (\vec{F}_{ads}):

$$\vec{F} = \vec{F}_c + \vec{F}_{ads} \quad (7)$$

\vec{F}_c называется силой когезии, которая отвечает за взаимодействие между жидкой и газовой фазой и рассчитывается следующим образом:

$$F_c(\vec{r}, t) = -G_c \psi(\vec{r}) \sum_{i=0}^N d_i \psi(\vec{r} + \vec{e}_i, t) \vec{e}_i, \quad (8)$$

где G_c – эмпирический параметр, отвечающий за силу взаимодействия. Функция $\psi(\vec{r})$ называется «эффективной массой» (“effective mass”) [15] и может иметь различный вид в зависимости от необходимой точности модели. Как видно из уравнения (8), \vec{F}_c характеризует силу, с которой на текущую ячейку \vec{r} воздействуют соседние ячейки ($\vec{r} + \vec{e}_i$), при этом величина $\psi(\vec{r})$ возрастает с увеличением дискретной плотности компонента в соседних ячейках (рис. 2).

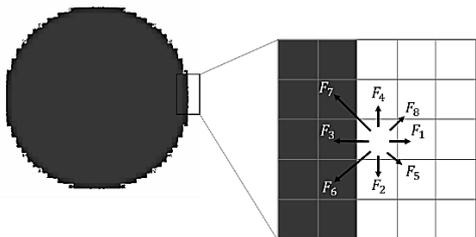


Рис. 2. Силы, действующие на ячейку на границе раздела фаз
Fig. 2. Forces acting on a cell at the interface

На рис. 2 темным цветом показаны ячейки с высокой дискретной плотностью, а светлым – с низкой. Видно, что величина сил, воздействующих на ячейку со стороны ячеек с высокой дискретной плотностью ($\vec{F}_3, \vec{F}_6, \vec{F}_7$), больше, чем со стороны клеток с низкой, поэтому в соответствии с уравнением (8) результирующая \vec{F}_c направлена в сторону ячеек с высокой дискретной плотностью, в результате чего жидкость перемещается в ячейки, дискретная плотность которых выше. Таким образом, в системе появляются ячейки с более высокой и более низкой дискретными плотностями. Ячейки с низкой дискретной плотностью ρ_r находятся в газовой фазе, а с более высокой ρ_j – в жидкой. При правильном подборе параметров и функции $\psi(\vec{r})$ можно достичь соотношения ρ_j и ρ_r , соответствующего реальным системам.

В оригинальном методе псевдопотенциалов [11] функция $\psi(\vec{r})$ являлась эмпирической, поэтому существовала сложность в поиске соответствия между модельной и реальной системами жидкость-газ. Поэтому в последующих работах были проведены исследования, согласно которым можно связать функцию $\psi(\vec{r})$ с уравнениями состояния такими, как уравнение Ван-дер-Ваальса, Карнахана-Старлинга или Пенга-Робинсона [16, 17]. В этом случае функция $\psi(\vec{r})$ имеет следующий вид [18, 19]:

$$\psi = \sqrt{\frac{2(p-\rho/3)}{G_c/3}}, \quad (9)$$

где ρ – дискретная плотность жидкости в ячейке,

p – давление в ячейке, которое зависит от выбранного уравнения состояния.

В рамках работы для моделирования системы жидкость-газ было использовано уравнение состояния Карнахана-Старлинга. В этом случае p в уравнении (9) рассчитывается следующим образом:

$$p = \rho RT \frac{1 + \frac{b\rho}{4} + \left(\frac{b\rho}{4}\right)^2 - \left(\frac{b\rho}{4}\right)^3}{\left(1 - \frac{b\rho}{4}\right)^3} - a\rho^2, \quad (10)$$

где $a = 0.4963R^2T_c^2/p_c$, $b = 0.18727RT_c/p_c$, T_c – критическая температура, p_c – критическое давление, R – газовая постоянная. Указанные величины в рамках модели не являются реальными физическими величинами, а дискретными аналогами. Поэтому при моделировании выбираются величины a , b и R , после чего рассчитываются критическая температура T_c , давление p_c и плотность ρ_c . В соответствии с этим рассчитываются дискретные плотности жидкости и газа, ρ_j и ρ_r . В газовой фазе находятся ячейки, плотность которых $\rho_r < \rho_c$, а в жидкой – $\rho_j > \rho_c$.

\vec{F}_{ads} в (7) называется силой адгезии и рассчитывается следующим образом [20, 21]:

$$\vec{F}_{ads}(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) \sum_{i=0}^N d_i \psi(\rho_{ct}(\vec{r} + \vec{e}_i)) s(\vec{r} + \vec{e}_i, t) \vec{e}_i, \quad (11)$$

где s – функция индикации твердой ячейки, которая равна 1, если ячейка в координате $\vec{r} + \vec{e}_i$ находится в твердом состоянии, и 0, если в жидком; ρ_{ct} представляет собой «квазиплотность» твердой ячейки.

Она не связана с реальной плотностью материала, а характеризует силу, с которой жидкая или газовая фаза взаимодействуют с твердым каркасом, и напрямую связана с контактным углом: при $\rho_{ct} = \rho_j$ контактный угол $\theta = 0^\circ$ (гидрофильная поверхность), а при $\rho_{ct} = \rho_r$ контактный угол $\theta = 180^\circ$ (гидрофобная поверхность). Таким образом, задавая ρ_{ct} в диапазоне $[\rho_r, \rho_j]$, можно регулировать контактный угол и, следовательно, степень взаимодействия между твердой и жидкой фазами.

Модель на основе метода решеточных уравнений Больцмана с модификацией для многофазных систем и уравнением состояния Карнахана-Старлинга была использована для моделирования течения тестового раствора в пористой среде гемостатической повязки.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Учет сил когезии и адгезии позволяет моделировать реальные многофазные системы. Были

проведены вычислительные эксперименты по моделированию капли на подложке при различном контактном угле (рис. 3).

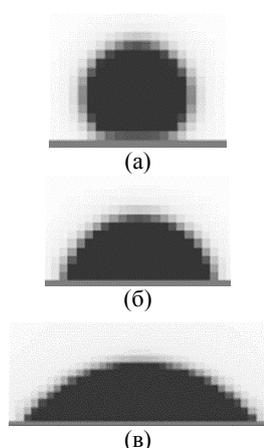


Рис. 3. Капля на подложке при контактных углах 180° (а), 90° (б) и 0° (в)

Fig.3. Drop on a substrate at contact angles of 180° (a), 90° (b) and 0° (c)

Был проведен вычислительный эксперимент по движению жидкости в капилляре (рис. 4). Капиллярный подъем важно учитывать при моделировании течения жидкости в открытой сети пор аэрогеля.

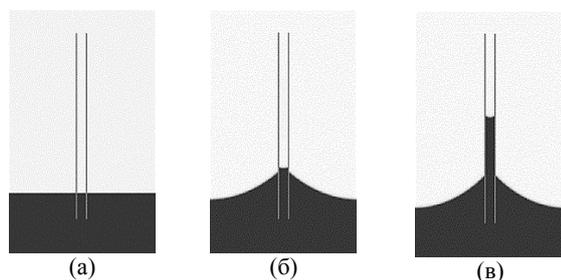


Рис. 4. Движение жидкости в капилляре в начале работы модели (а), через 2000 итераций (б) и 12000 итераций (в)

Fig. 4. Fluid movement in the capillary at the beginning of the model (a), after 2000 iterations (b) and 12000 iterations (v)

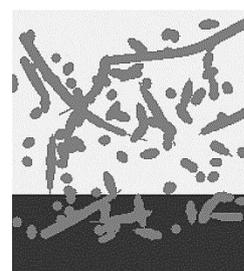
На рис. 4 диаметр капилляра составляет 1,2 мм, жидкость поднялась на 12,6 мм, что соответствует расчетным данным.

Были проведены вычислительные эксперименты по моделированию гидродинамики тестового раствора в пористых структурах кровоостанавливающих средств местного действия – аэрогельных гемостатических повязках на основе хитозана. Цифровые структуры повязок и губок были получены с помощью клеточно-автоматной модели на основе кривых Безье [22]. Были получены 3 цифровые структуры гемостатических повязок, соответствующих экспериментальным образцам, полученным ранее [23–26] (табл. 1).

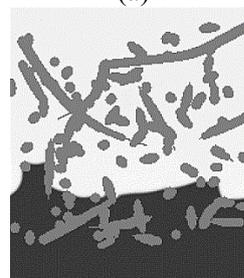
Таблица 1

Параметры цифровых структур
Table 1. Parameters of digital structures

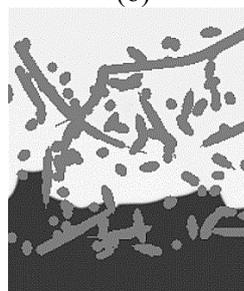
Номер образца	Размер волокна, нм	Размер структуры, нм	Пористость
1	17	120	98,9
2	17	120	98,6
3	13	120	99,0



(а)



(б)



(в)

Рис. 5. Движение жидкости в двухмерном срезе гемостатической повязки в начале работы модели (а), через 1000 итераций (б) и 2000 итераций (в)

Fig. 5. Fluid movement in a two-dimensional slice of a hemostatic dressing at the beginning of the model (a), after 1000 iterations (b) and 2000 iterations (v)

Эти цифровые структуры были использованы в качестве входных параметров для модели гидродинамики. В качестве входных параметров модели на основе метода решеточных уравнений Больцмана были взяты следующие значения: размер ячейки 1 нм, $G_c = -1$, $G_{ads} = -1$, $\rho_{CT} = 450$, $a = 1$, $b = 4$, $R = 1$ [13]. На рис. 5 приведены двухмерные срезы течения тестового раствора в пористой цифровой структуре образца, а в табл. 2 сравнение расчетной и экспериментальной сорбционной емкости.

Таблица 2

Характеристики гемостатических повязок
Table 2. Characteristics of hemostatic bandages

Номер образца	Экспериментальная сорбционная емкость, г/г	Расчетная сорбционная емкость, г/г
1	7,83	7,27
2	7,26	6,75
3	8,31	7,89

Как видно из табл. 2, отклонение расчетной массовой сорбционной емкости тестового раствора от экспериментального не превышает 9%, что говорит о корректной работе модели.

ВЫВОДЫ

Была разработана дискретная модель течения и сорбции жидкости в многофазной системе – гетерогенной структуре гемостатической повязки, состоящей из твердого каркаса, пор, заполненных воздухом, и жидкости, на основе метода решеточных уравнений Больцмана с модификацией для многофазных систем.

Были подобраны входные параметры модели, которые обеспечивают течение и впитывание жидкости в пористой среде гемостатической повязки, соответствующие реальным образцам.

Были проведены вычислительные экспери-

менты по моделированию течения тестового раствора в цифровых пористых структурах, соответствующих экспериментальным образцам. В качестве оценки точности работы модели использовалась сорбционная емкость тестового раствора в пористой структуре повязки. Отклонения расчетных значений от экспериментальных не превышают 9%, что говорит о корректной работе модели.

Разработанная модель позволяет детально описывать движение жидкости в гетерогенной многофазной системе с учетом межфазного взаимодействия. Возможна работа модели для многокомпонентных систем, а также совместное использование с другими дискретными моделями такими, как клеточные автоматы. Предложенная модель будет использована в дальнейшем для описания гидродинамики многокомпонентной системы, состоящей из крови, активного фармацевтического ингредиента и наночастиц серебра.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, соглашение от 27.07.2022 № 22-71-00055 (РНФ).

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов, требующего раскрытия в данной статье.

The authors declare the absence of a conflict of interest warranting disclosure in this article.

ЛИТЕРАТУРА

1. Рубцова Л.Н. Исследование ламинарного течения в призматических каналах прямоугольного и эллиптического сечения. *Изв. вузов. Химия и хим. технология*. 2022. Т. 65. № 4. С. 93-100. DOI: 10.6060/ivkkt.20226504.6533.
2. Ezzatneshan E., Goharimehr R.A. Pseudopotential Lattice Boltzmann Method for Simulation of Two-Phase Flow Transport in Porous Medium at High-Density and High-Viscosity Ratios. *Geofluids*. 2021. V. 2021. P. 1-18. DOI: 10.1155/2021/5668743.
3. Куперштох А.Л. Метод решеточных уравнений Больцмана для моделирования двухфазных систем типа жидкость-пар. *Современная наука: исследования, идеи, результаты, технологии*. 2010. Т. 2. № 4. С. 56-63.
4. Chibbaro S., Falcucci G., Chiatti G., Chen H., Shan X., Succi S. Lattice Boltzmann models for nonideal fluids with arrested phase-separation. *Phys Rev E*. 2008. V. 77. N 3. P. 1-12. DOI: 10.1103/PhysRevE.77.036705.
5. Mohamad A.A. Lattice Boltzmann Method. London: Springer. 2011. 178 p. DOI: 10.1007/978-0-85729-455-5.
6. Krüger T., Kusumaatmaja H., Kuzmin A., Shardt O., Silva G., Vignal E.M. The Lattice Boltzmann Method. Switzerland: Springer Cham. 2017. 694 p. DOI: 10.1007/978-3-319-44649-3.
7. Sukop M.C., Thorne D.T. Lattice Boltzmann Modeling. Berlin: Springer Berlin Heidelberg. 2006. 174 p. DOI: 10.1007/978-3-540-27982-2.
8. Petersen K.J., Brinkerhoff J.R. On the lattice Boltzmann method and its application to turbulent, multiphase flows of

REFERENCES

1. Rubtsova L.N. Study of laminar flow in prismatic channels of rectangular and elliptical section. *ChemChemTech [Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Khim. Tekhnol.]*. 2022. V. 65. N 4. P. 93-100 (in Russian). DOI: 10.6060/ivkkt.20226504.6533.
2. Ezzatneshan E., Goharimehr R.A. Pseudopotential Lattice Boltzmann Method for Simulation of Two-Phase Flow Transport in Porous Medium at High-Density and High-Viscosity Ratios. *Geofluids*. 2021. V. 2021. P. 1-18. DOI: 10.1155/2021/5668743.
3. Kupershtokh A.L. Method of lattice Boltzmann equations for modeling two-phase liquid-vapor systems. *Sovremennaya nauka: issledovaniya, idei, rezul'taty, tekhnologii*. 2010. V. 2. N 4. P. 56-63. (in Russian).
4. Chibbaro S., Falcucci G., Chiatti G., Chen H., Shan X., Succi S. Lattice Boltzmann models for nonideal fluids with arrested phase-separation. *Phys Rev E*. 2008. V. 77. N 3. P. 1-12. DOI: 10.1103/PhysRevE.77.036705.
5. Mohamad A.A. Lattice Boltzmann Method. London: Springer. 2011. 178 p. DOI: 10.1007/978-0-85729-455-5.
6. Krüger T., Kusumaatmaja H., Kuzmin A., Shardt O., Silva G., Vignal E.M. The Lattice Boltzmann Method. Switzerland: Springer Cham. 2017. 694 p. DOI: 10.1007/978-3-319-44649-3.
7. Sukop M.C., Thorne D.T. Lattice Boltzmann Modeling. Berlin: Springer Berlin Heidelberg. 2006. 174 p. DOI: 10.1007/978-3-540-27982-2.
8. Petersen K.J., Brinkerhoff J.R. On the lattice Boltzmann method and its application to turbulent, multiphase flows of

- various fluids including cryogenics: A review. *Physics of Fluids*. 2021. V. 33. N 4. P. 1-25. DOI: 10.1063/5.0046938.
9. **Li L., Wan Y., Lu J., et al.** Lattice Boltzmann Method for Fluid-Thermal Systems: Status, Hotspots, Trends and Outlook. *IEEE Access*. 2020. V. 8. P. 27649-27675. DOI: 10.1109/ACCESS.2020.2971546.
 10. **Succi S.** The Lattice Boltzmann Equation. Oxford: Oxford University Press. 2018. 788 p. DOI: 10.1093/oso/9780199592357.001.0001.
 11. **Shan X., Chen H.** Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components. *Phys Rev E*. 1993. V. 47. N 3. P. 1815-1819. DOI: 10.1103/PhysRevE.47.1815.
 12. **Chen L., Kang Q., Mu Y., He Y.L., Tao W.Q.** A critical review of the pseudopotential multiphase lattice Boltzmann model: Methods and applications. *Int J Heat Mass Transf.* 2014. V. 76. P. 210-236. DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2014.04.032.
 13. **Yuana K.A., Budiana E.P., Deendarlianto, Indarto.** Modeling and simulation of droplet wettability using multiphase Lattice Boltzmann method (LBM). *AIP Conf. Proc.* 2019. V. 2192. P. 070002-1-070002-8. DOI: 10.1063/1.5139169.
 14. **Huang H., Li Z., Liu S., Lu X.** Shan- and- Chen- type multiphase lattice Boltzmann study of viscous coupling effects for two- phase flow in porous media. *Int J Numer Methods Fluids*. 2009. V. 61. N 3. P. 341-354. DOI: 10.1002/flid.1972.
 15. **Wu S., Chen Y., Chen L.Q.** Three-dimensional pseudopotential lattice Boltzmann model for multiphase flows at high density ratio. *Phys Rev E*. 2020. V. 102. N 5. P. 1-13. DOI: 10.1103/PhysRevE.102.053308.
 16. **Baakeem S.S., Bawazeer S.A., Mohamad A.A.** Comparison and evaluation of Shan-Chen model and most commonly used equations of state in multiphase lattice Boltzmann method. *International Journal of Multiphase Flow*. 2020. V. 128. P. 1-15. DOI: 10.1016/j.ijmultiphaseflow.2020.103290.
 17. **Голубев Э.В., Суслова Е.Н., Лебедев А.Е.** Компьютерное моделирование гидродинамики и массопереноса процесса сверхкритической сушки аэрогелей в аппаратах лабораторного и промышленного масштаба. *Рос. хим. ж. (Ж. Рос. хим. об-ва)*. 2023. Т. 67. № 2. С. 37-44. DOI: 10.6060/rcj.2023672.4.
 18. **Yuan P., Schaefer L.** Equations of state in a lattice Boltzmann model. *Physics of Fluids*. 2006. V. 18. N 4. P. 1-12. DOI: 10.1063/1.2187070.
 19. **Куперштох А.Л.** Моделирование течения капли по стенке канала прямоугольного сечения с переменной смачиваемостью. Динамика Многофазных Сред: материалы XV Всероссийского семинара с участием иностранных студентов (3-5 октября 2017). Новосибирск: Институт вычислительных технологий СО РАН. С. 94-96.
 20. **Kupershtokh A.L.** Three-dimensional modeling of dynamics of liquid dielectric droplets on a wettable surface in the electric field. *J Phys Conf Ser*. 2020. V. 1677. N 1. P. 1-5. DOI: 10.1088/1742-6596/1677/1/012067.
 21. **Pooley C.M., Kusumaatmaja H., Yeomans J.M.** Modeling capillary filling dynamics using lattice Boltzmann simulations. *Eur Phys J Spec Top*. 2009. V. 171. N 1. P. 63-71. DOI: 10.1140/epjst/e2009-01012-0.
 22. **Бобков С.П.** Использование дискретных подходов для моделирования основных процессов химической технологии. *Рос. хим. ж. (Ж. Рос. хим. об-ва)*. 2019. Т. 63. № 3-4. С. 22-30. DOI: 10.6060/rcj.2019633.3.
 23. **Лебедев И.В., Уварова А.А., Меньшутина Н.В.** Информационно-аналитический комплекс для создания цифровых двойников структур пористых материалов с
- various fluids including cryogenics: A review. *Physics of Fluids*. 2021. V. 33. N 4. P. 1-25. DOI: 10.1063/5.0046938.
 9. **Li L., Wan Y., Lu J., et al.** Lattice Boltzmann Method for Fluid-Thermal Systems: Status, Hotspots, Trends and Outlook. *IEEE Access*. 2020. V. 8. P. 27649-27675. DOI: 10.1109/ACCESS.2020.2971546.
 10. **Succi S.** The Lattice Boltzmann Equation. Oxford: Oxford University Press. 2018. 788 p. DOI: 10.1093/oso/9780199592357.001.0001.
 11. **Shan X., Chen H.** Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components. *Phys Rev E*. 1993. V. 47. N 3. P. 1815-1819. DOI: 10.1103/PhysRevE.47.1815.
 12. **Chen L., Kang Q., Mu Y., He Y.L., Tao W.Q.** A critical review of the pseudopotential multiphase lattice Boltzmann model: Methods and applications. *Int J Heat Mass Transf.* 2014. V. 76. P. 210-236. DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2014.04.032.
 13. **Yuana K.A., Budiana E.P., Deendarlianto, Indarto.** Modeling and simulation of droplet wettability using multiphase Lattice Boltzmann method (LBM). *AIP Conf. Proc.* 2019. V. 2192. P. 070002-1-070002-8. DOI: 10.1063/1.5139169.
 14. **Huang H., Li Z., Liu S., Lu X.** Shan- and- Chen- type multiphase lattice Boltzmann study of viscous coupling effects for two- phase flow in porous media. *Int J Numer Methods Fluids*. 2009. V. 61. N 3. P. 341-354. DOI: 10.1002/flid.1972.
 15. **Wu S., Chen Y., Chen L.Q.** Three-dimensional pseudopotential lattice Boltzmann model for multiphase flows at high density ratio. *Phys Rev E*. 2020. V. 102. N 5. P. 1-13. DOI: 10.1103/PhysRevE.102.053308.
 16. **Baakeem S.S., Bawazeer S.A., Mohamad A.A.** Comparison and evaluation of Shan-Chen model and most commonly used equations of state in multiphase lattice Boltzmann method. *International Journal of Multiphase Flow*. 2020. V. 128. P. 1-15. DOI: 10.1016/j.ijmultiphaseflow.2020.103290.
 17. **Golubev E.V., Suslova E.N., Lebedev A.E.** Computer simulation of hydrodynamics and mass transfer of supercritical drying of aerogels in laboratory and industrial scale apparatuses. *Ros. Khim. Zh.* 2023. V. 67. N 2. P. 37-44. (in Russian). DOI: 10.6060/rcj.2023672.4.
 18. **Yuan P., Schaefer L.** Equations of state in a lattice Boltzmann model. *Physics of Fluids*. 2006. V. 18. N 4. P. 1-12. DOI: 10.1063/1.2187070.
 19. **Kupershtokh A.L.** Modeling the flow of a drop along the wall of a rectangular channel with variable wettability. Динамика Многофазных Сред: материалы XV Всероссийского семинара с участием иностранных студентов (3-5 октября 2017). Новосибирск: Институт вычислительных технологий СО РАН. С. 94-96 (in Russian).
 20. **Kupershtokh A.L.** Three-dimensional modeling of dynamics of liquid dielectric droplets on a wettable surface in the electric field. *J Phys Conf Ser*. 2020. V. 1677. N 1. P. 1-5. DOI: 10.1088/1742-6596/1677/1/012067.
 21. **Pooley C.M., Kusumaatmaja H., Yeomans J.M.** Modeling capillary filling dynamics using lattice Boltzmann simulations. *Eur Phys J Spec Top*. 2009. V. 171. N 1. P. 63-71. DOI: 10.1140/epjst/e2009-01012-0.
 22. **Bobkov S.P.** Use of discrete approaches for simulation the basic processes of chemical technology. *Ros. Khim. Zh.* 2019. V. 63. N 3-4. P. 22-30 (in Russian). DOI: 10.6060/rcj.2019633.3.
 23. **Lebedev I.V., Uvarova A.A., Menshutina N.V.** Information and analytical complex for creating digital twins of

- использованием клеточно-автоматного подхода. *Рос. хим. ж. (Ж. Рос. хим. об-ва)*. 2023. Т. 67. № 2. С. 52-58. DOI: 10.6060/rcj.2023672.6.
24. **Lebedev I.V., Lovskaya D.D., Mochalova M.S., Mitrofanov I.V., Menshutina N.V.** Cellular Automata Modeling of Three-Dimensional Chitosan-Based Aerogels Fibrous Structures with Bezier Curves. *Polymers*. 2021. V. 13. N 15. P. 1-20. DOI: 10.3390/polym13152511.
25. **Мочалова М. С. и др.** Исследование процесса получения частиц аэрогеля на основе хитозана с внедренным гидрохлоридом лидокаина для разработки местных гемостатических средств с анестезирующим эффектом. *Рос. хим. ж. (Ж. Рос. хим. об-ва)*. 2023. Т. 67. № 2. С. 59-66. DOI: 10.6060/rcj.2023672.7.
26. **Ван З. Н., Цыганков П. Ю., Меньшутина Н. В.** Гибридные аэрогели на основе лигнина, полученного из растительного сырья. *Изв. вузов. Химия и хим. технология*. 2023. Т. 66. №. 4. С. 75-83. DOI: 10.6060/ivkkt.20236604.6767.
- structures of porous materials using a cellular automata approach. *Ros. Khim. Zh.* 2023. V. 67. N 2. P. 52-58. (in Russian). DOI: 10.6060/rcj.2023672.6.
24. **Lebedev I.V., Lovskaya D.D., Mochalova M.S., Mitrofanov I.V., Menshutina N.V.** Cellular Automata Modeling of Three-Dimensional Chitosan-Based Aerogels Fibrous Structures with Bezier Curves. *Polymers*. 2021. V. 13. N 15. P. 1-20. DOI: 10.3390/polym13152511.
25. **Mochalova M. S. et al.** Study of the process of obtaining aerogel particles based on chitosan with embedded lidocaine hydrochloride for the development of local hemostatic agents with an anesthetic effect. *Ros. Khim. Zh.* 2023. V. 67. N 2. P. 59-66. (in Russian). DOI: 10.6060/rcj.2023672.7.
26. **Van Z.N., Tsygankov P.Yu., Menshutina N.V.** Hybrid aerogels based on lignin, derived from vegetable raw materials. *ChemChemTech [Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Khim. Khim. Tekhnol.]*. 2023. V. 66. N 4. P. 75-83. (in Russian). DOI: 10.6060/ivkkt.20236604.6767.

Поступила в редакцию 14.05.2024
Принята к опубликованию 07.05.2025

Received 14.05.2024
Accepted 07.05.2025