

А.Ю. Закгейм

ОБЩАЯ ХИМИЧЕСКАЯ ТЕХНОЛОГИЯ

ВВЕДЕНИЕ В МОДЕЛИРОВАНИЕ

ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

*Рекомендовано Ученым советом
Московской государственной академии тонкой химической технологии
в качестве учебного пособия по курсам «Общая химическая технология»
и «Моделирование химико-технологических процессов» для студентов
высших учебных заведений, обучающихся по направлениям
«Химическая технология и биотехнология» и «Материаловедение»*

Издание 3-е, переработанное и дополненное



Москва
Логос
2012

УДК 66-93(075.8)

ББК 35.11

318

Серия основана в 2003 году

Р е ц е н з е н т

И.А. Гильденблат, кандидат технических наук, профессор

Закгейм А.Ю.

318 Общая химическая технология: введение в моделирование химико-технологических процессов: учеб. пособие / А.Ю. Закгейм. — 3-е изд., перераб. и доп. — М.: Логос, 2012. — 304 с. — (Новая университетская библиотека).

ISBN 978-5-98704-497-1

Рассмотрены вопросы создания математических моделей химико-технологических процессов, в ходе которых осуществляются химические превращения. Кратко изложены аспекты математического моделирования: выбор или разработка алгоритмов.

Для студентов высших учебных заведений, обучающихся по направлениям «Химическая технология и биотехнология» и «Материаловедение».

УДК 66-93(075.8)

ББК 35.11

ISBN 978-5-98704-497-1

© Закгейм А.Ю., 2010

© Логос, 2010, 2012

ОГЛАВЛЕНИЕ

ОТ АВТОРА.....	7
ОСНОВНЫЕ ОБОЗНАЧЕНИЯ.....	9
ГЛАВА 1. ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ МЕТОДА МОДЕЛИРОВАНИЯ.....	11
1.1. Моделирование и модели	11
1.2. Общие вопросы математического описания процессов	20
1.3. Некоторые особенности моделей и задач математического моделирования	32
ГЛАВА 2. ЭЛЕМЕНТЫ ТЕОРИИ ЭКСПЕРИМЕНТА.....	42
2.1. Случайные события и случайные величины	43
2.2. Статистические оценки и проверка гипотез	53
2.3. Метод наименьших квадратов.....	66
2.4. Планирование эксперимента.....	78
ГЛАВА 3. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ.....	105
3.1. Стехиометрия и равновесие химических реакций.....	105
3.2. Формальная химическая кинетика.....	122
ГЛАВА 4. АНАЛИЗ И ОПИСАНИЕ ПРОЦЕССОВ В ПОТОКЕ.....	134
4.1. Потоки в аппаратах непрерывного действия	134
4.2. Модели идеальных потоков.....	139
4.3. Статистика времени пребывания в потоке	159
4.4. Модели неидеальных потоков	177
ГЛАВА 5. ЯВЛЕНИЯ ПЕРЕНОСА В ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССАХ, ИХ АНАЛИЗ И ОПИСАНИЕ	189
5.1. Механизмы переноса.....	189
5.2. Тепловые явления.....	206
5.3. Внешнедиффузионное торможение	211
5.4. Внутридиффузионное торможение.....	219
5.5. Процессы с межфазным массообменом.....	233
ГЛАВА 6. МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ С УЧЕТОМ ВОЗМОЖНОЙ НЕСТАЦИОНАРНОСТИ.....	244
6.1. Математические модели нестационарных процессов.....	244
6.2. Параметрическая чувствительность и устойчивость процессов.....	247

ГЛАВА 7. ОПТИМИЗАЦИЯ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ	261
7.1. Формулирование задачи оптимизации.....	261
7.2. Оптимизация методом дифференциального исчисления	270
7.3. Поиск оптимума численными методами	277
7.4. Экспериментальный поиск оптимума	287
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	293
ЛИТЕРАТУРА	295
ПРИЛОЖЕНИЕ. ТАБЛИЦЫ КРИТИЧЕСКИХ ЗНАЧЕНИЙ СТАТИСТИЧЕСКИХ КРИТЕРИЕВ	298

ОТ АВТОРА

Предлагаемая книга представляет собой третье издание учебного пособия автора «Введение в моделирование химико-технологических процессов». Предыдущие издания опубликованы соответственно в 1973 и 1982 гг. издательством «Химия» и широко использовались в учебном процессе ряда высших учебных заведений. В третьем издании текст переработан с учетом как развития данной области науки, так и изменения программ обучения.

Книга содержит семь глав. В главе 1 рассматриваются основные понятия метода моделирования: физическое и математическое моделирование, построение математических моделей процессов, особенности моделей и задач моделирования (теоретически обоснованные и эмпирические модели, формы уравнений — конечные и дифференциальные и т.д.). В главе 2 описываются элементы теории эксперимента — применение вероятностных понятий к анализу случайных ошибок, нахождение статистических оценок, проверка статистических гипотез, работа с методом наименьших квадратов, основы планирования эксперимента. Глава 3 посвящена формальному анализу стехиометрии, равновесия и кинетики сложных химических реакций. В главе 4 анализируется протекание химических реакций в потоках. Даются основы описания процессов, протекающих в потоках, в приближении идеального вытеснения и идеального смешения, рассмотрено использование распределения времени пребывания для анализа структуры потока, описаны простейшие модели неидеальных потоков — ячеечная и однопараметрическая диффузионная. В главе 5 рассматриваются особенности явлений переноса в химико-технологических процессах и отражения этих особенностей в математических моделях. Сопоставляются молекулярный и конвективный переносы, их взаимодействие и учет его в математических описаниях. Рассматриваются особенности макрокинетики процессов: тепловых режимов, внешне- и внутридиффузионного торможения реакций, межфазного массопереноса, и их отражение в описаниях. В главе 6 дается краткое описание нестационарных процессов (кратко, поскольку подробно вопросы рассматриваются в курсах автоматизации) и излагается проблема устойчивости стационарных режимов работы химических процессов. В главе 7 освещаются вопросы оптимизации химических процессов: формулирование задачи оптимизации; основные подходы к нахождению оптимума с использованием аналитических, поисковых и экспериментальных методов.

При работе с книгой важно учесть следующее. В ней использован простой математический аппарат, но именно тот, который нужен по существу. Во многих случаях смысл излагаемого нельзя до конца понять, не разобравшись в сущности приводимых математических выкладок — одних результатов мало.

Хочу также обратить внимание читателя на роль, которую играют в книге примеры, вопросы и задачи. Их назначение состоит не только в том, чтобы проиллюстрировать рассматриваемые вопросы и повторить пройденное, но и в первую очередь стимулировать самостоятельную работу над материалом. В частности, автор старался придать вопросам нестандартный характер.

Выражаю глубокую признательность В.И. Ксензенко, К.Ю. Одинцову и А.И. Мартюшкину за неоценимую помощь в работе. Особая благодарность — моему учителю, незабвенному Виталию Максимовичу Рамму.