

Министерство образования и науки Российской Федерации

Казанский государственный технологический университет

*Ас.М.Гумеров, Н.Н.Валеев, Аз.М.Гумеров В.М.Емельянов*

**Математическое моделирование  
химико-технологических процессов  
Учебное пособие**

Казань 2006

УДК 66.01.001

Математическое моделирование химико-технологических процессов: Учебное пособие / Ас.М.Гумеров, Н.Н.Валеев, Аз.М.Гумеров, В.М.Емельянов; Казан. гос. технол. ун-т. – Казань, 2006. – 216 с.

ИРАМ4,6771,/ 238

Изложены основные подходы к построению математических моделей и этапы математического моделирования. Подробно рассмотрены математические модели структуры потоков в химических аппаратах, тепло- и массообмена, а также кинетики химических реакций. В качестве примера приведено построение моделей химического реактора.

Изложен вероятностный подход к математическому моделированию, рассмотрены различные уравнения регрессии, а также методы планирования эксперимента.

Большинство теоретических вопросов сопровождается решением конкретных примеров с использованием современных средств.

Предназначено для студентов технологических специальностей, может быть полезно аспирантам и преподавателям.

Подготовлено на кафедре химической кибернетики КГТУ.

Печатается по решению редакционно-издательского совета Казанского государственного технологического университета.

Рецензенты: проректор КГГПУ, д-р техн. наук, проф. Ф.Г.Ахмадиев, академик АН РТ А.М.Мазгаров

© Казанский государственный  
технологический университет, 2006 г.

## СОДЕРЖАНИЕ

Предисловие .....	5
Введение .....	7
В.1 Иерархическая структура современного химического предприятия.....	7
В.2 Химико-технологическая система как большая система	8
В.3 Основные положения системного анализа .....	10
В.4 Понятие физико-химической системы.....	11
I Общие принципы моделирования .....	14
1 Общая характеристика задач химической технологии, решаемых с применением ЭВМ.....	14
1.1 Роль ЭВМ в автоматизированных системах научных исследований (АСНИ) .....	14
1.2 Система автоматизированного проектирования на базе ЭВМ – средство создания новой технологии проектирования .....	17
1.3 Применение ЭВМ для создания автоматизированных систем управления технологическими процессами (АСУТП).....	19
2 Математическое моделирование ХТП.....	22
2.1 Понятие модели. Классификация моделей .....	22
2.2 Виды моделирования .....	23
2.2.1 Физическое моделирование .....	24
2.2.2 Математическое моделирование .....	24
2.3 Классификация математических моделей .....	25
2.4 Принципы математического моделирования процессов химической технологии .....	27
2.5 Исследование химико-технологических процессов методом математического моделирования .....	32

2.5.1 Блочный принцип построения математической модели ХТП .....	34
2.6 Классификация уравнений модели.....	35
2.7 Этапы построения математической модели ХТП .....	36
II Детерминированный подход к моделированию .....	42
3 Математическое моделирование гидродинамической структуры однофазных потоков.....	42
3.1 Время пребывания элементов потока как случайная величина .....	43
3.2 Экспериментальное изучение распределения времени пребывания элементов потока .....	45
3.3 Интегральная и дифференциальная функции распределения времени пребывания элементов потока .....	46
3.4 Типовые модели структуры потоков.....	47
3.4.1 Модель идеального перемешивания .....	48
3.4.2 Модель идеального вытеснения .....	50
3.4.3 Однопараметрическая диффузионная модель .....	53
3.4.4 Ячеечная модель .....	55
3.4.5 Комбинированные модели .....	58
3.5 Алгоритм идентификации математического описания структуры потоков .....	66
3.6 Практический пример .....	69
3.7 Варианты заданий для самостоятельной работы .....	76
4 Математическое моделирование теплообменных процессов.....	78
4.1 Основы теплового расчета.....	81
4.1.1 Проектный расчет теплообменного аппарата .....	82
4.1.2 Проверочный расчет теплообменного аппарата .....	83
4.2 Математические модели теплообменников.....	83

4.3	Теплообменник типа «перемешивание-перемешивание»	86
4.4	Теплообменник типа «перемешивание-вытеснение»	87
4.5	Теплообменник типа «вытеснение-вытеснение»	88
4.6	Оптимальное проектирование теплообменного аппарата	89
4.6.1	Постановка задачи оптимального проектирования	89
4.6.2	Алгоритм расчета критерия оптимизации	91
4.7	Пример моделирования противоточного теплообменника	95
4.8	Варианты заданий для самостоятельной работы	100
5	Математическое моделирование	
	кинетики химических реакций	102
5.1	Основные понятия химической кинетики	102
5.1.1	Классификация реакций	102
5.1.2	Скорость химической реакции	103
5.1.3	Кинетические уравнения	104
5.1.4	Механизм химической реакции. Простые и сложные реакции	105
5.1.5	Степень превращения	110
5.1.6	Степень полноты реакции	111
5.1.7	Стехиометрические уравнения. Стехиометрическая матрица	112
5.2	Методы упрощения математической модели кинетики	113
5.2.1	Стехиометрически линейно зависимые и стехиометрически линейно независимые реакции	113
5.2.2	Линейные инварианты	117
5.2.3	Ключевые вещества	121
5.3	Этапы идентификации математической модели кинетики химических реакций	122
5.3.1	Экспериментальное исследование кинетики химических реакций	123

5.3.2	Формулирование гипотез о возможных механизмах реакции.....	133
5.3.3	Разработка математической модели кинетики химических реакций .....	134
5.3.4	Формулирование критерия адекватности.....	136
5.3.5	Отыскание кинетических констант (параметрическая идентификация модели).....	138
5.4	Примеры моделирования кинетики.....	139
5.5	Варианты заданий для самостоятельной работы .....	144
6	Математическое моделирование массообменных процессов.....	146
6.1	Постановка задачи.....	147
6.2	Блочный принцип построения моделей массопередачи .....	148
6.3	Общая характеристика математического описания .....	149
6.3.1	Уравнение баланса массы .....	149
6.3.2	Уравнение равновесия .....	149
6.3.3	Уравнение кинетики .....	150
6.4	Моделирование массообменного процесса на примере моделирования процесса адсорбции.....	152
6.4.1	Уравнение материального баланса.....	153
6.4.2	Уравнение кинетики сорбции.....	155
6.4.3	Уравнение равновесия сорбции.....	156
6.4.4	Уравнение теплового баланса.....	158
6.4.5	Уравнение передачи тепла.....	158
6.4.6	Начальные и граничные условия.....	158
7	Математическое моделирование химических реакторов.....	160
7.1	Классификация химических реакторов.....	162
7.2	Математические модели процесса в реакторе.....	164

7.2.1 Математические модели реакторов идеального смешения.....	165
7.2.2 Математические модели химических реакторов идеального вытеснения .....	170
7.2.3 Каскад реакторов идеального смешения .....	173
7.3 Сравнение химических реакторов идеального смешения и идеального вытеснения и каскада РИС .....	176
III Вероятностный подход к моделированию .....	179
8 Функция одной переменной .....	179
8.1 Выбор вида и определение параметров эмпирической зависимости .....	179
8.2 Пример монотонной зависимости .....	182
8.3 Выбор вида и определение параметров немонотонной зависимости.....	186
8.4 Варианты заданий для самостоятельной работы .....	188
9 Функции многих переменных .....	190
9.1 Множественная регрессия .....	190
9.2 Планирование эксперимента.....	192
9.2.1 Полный факторный эксперимент .....	192
9.2.2 Пример .....	200
9.2.3 Планирование второго порядка.....	205
9.3 Варианты заданий для самостоятельной работы .....	209
Библиографический список.....	211