

# Основные понятия моделирования химических производств

# Основные понятия и определения

**Моделирование** - процесс создания модели, ее исследование и распространение результатов исследования на оригинал.

**Оригинал** - интересующий нас объект

**Модель** – изучаемый нами объект.

**Цель моделирования** – определение оптимальных условий протекания процесса.

**Область применения моделирования:**

- научные исследования;
- проектирование новых и совершенствование действующих процессов, аппаратов и производств.

**Применение моделирования позволяет осуществить:**

- оптимальное проектирование новых и оптимизацию действующих процессов;
- ускорение переноса результатов исследований на производство;
- решение задач исследования и реализация процессов, которые другими методами реализовать не удастся.

# Методы моделирования и область их применения

Физическое моделирование (ФМ) - метод исследования на моделях, имеющих одинаковую с оригиналом физическую природу и воспроизводящих весь комплекс свойств изучаемых явлений.

## Преимущества ФМ:

- полное воспроизводство процесса;
- наглядность процесса;
- возможность регистрации наблюдений без преобразующих устройств;
- изучение явлений, неподдающихся математическому описанию.

## Недостатки ФМ:

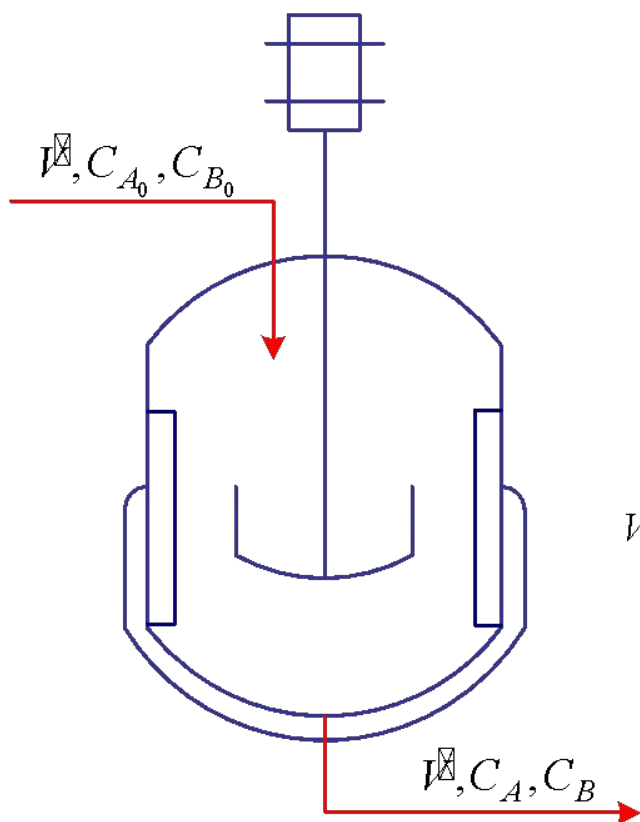
- для исследования каждого нового процесса необходимо создавать новую модель;
- изменение параметров оригинала часто требует физической переделки или полной замены модели;
- высокая стоимость изготовления моделей сложных объектов;
- в ряде случаев имеет ограничения или вообще неприменимо.

# Математическое моделирование (ММ)

- Математическое моделирование – изучение свойств объекта на математической модели.
- Математическая модель – приближенное описание процесса или явления с помощью математической символики.
- Преимущества ММ:
  - позволяет осуществить с помощью одного устройства решение целого класса задач, имеющих одинаковое математическое описание;
  - обеспечивает простоту перехода от одной задачи к другой, введение переменных параметров, возмущений и различных граничных условий;
  - дает возможность моделирования по частям (по элементарным процессам);
  - использует эффективное средство исследования процессов – ЭВМ, которое непрерывно совершенствуется;
  - экономичнее физического моделирования как по затратам времени, так и по стоимости.
- Существенный недостаток – трудоемкость детального описания свойств изучаемой сложной химической системы с помощью современного математического аппарата.

# Классификация моделей по временно-пространственному признаку

- Классификация процессов:
  - процессы неизменные во времени (стационарные);
  - процессы переменные во времени (нестационарные);
  - процессы с неизменными в пространстве параметрами;
  - процессы с изменяющимися в пространстве параметрами.
- Классификация моделей:
  - модели, неизменные во времени - статические модели;
  - модели, переменные во времени - динамические модели;
  - модели, с неизменными в пространстве параметрами - модели с сосредоточенными параметрами;
  - модели, с изменяющимися в пространстве параметрами - модели с распределенными параметрами.



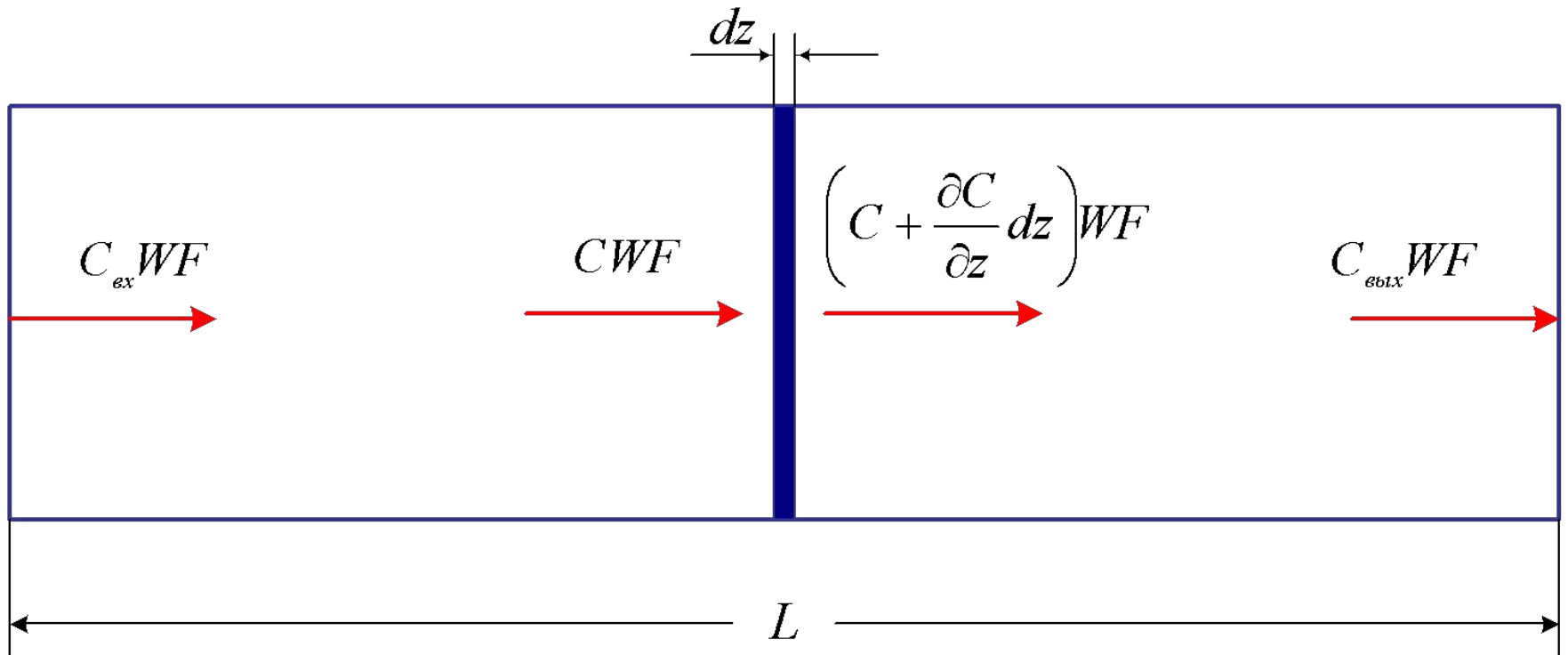
Статическая модель

$$V(C_{A_0} - C_A) = VkC_A C_B \quad , \quad V(C_{B_0} - C_B) = VkC_A C_B .$$

Динамическая модель

$$V \frac{dC_A}{dt} = V(C_{A_0} - C_A) - VkC_A C_B, \quad V \frac{dC_B}{dt} = V(C_{B_0} - C_B) - VkC_A C_B$$

# Модель с распределенными параметрами



## Основные принципы и направления при построении и решении математических моделей

- Составление модели.
  - Аналитический метод
  - Экспериментальный
  - Экспериментально-аналитический
- Нахождение решения модели.
- Проверка модели на адекватность.

**Аналитический метод** - вывод уравнений осуществляется на основании теоретического анализа физических и химических закономерностей протекания процесса, конструктивных параметров аппаратуры и свойств перерабатываемых веществ.

При выводе используются фундаментальные законы сохранения вещества и энергии, кинетические закономерности протекания химических процессов, процессов тепло- массопереноса и других.

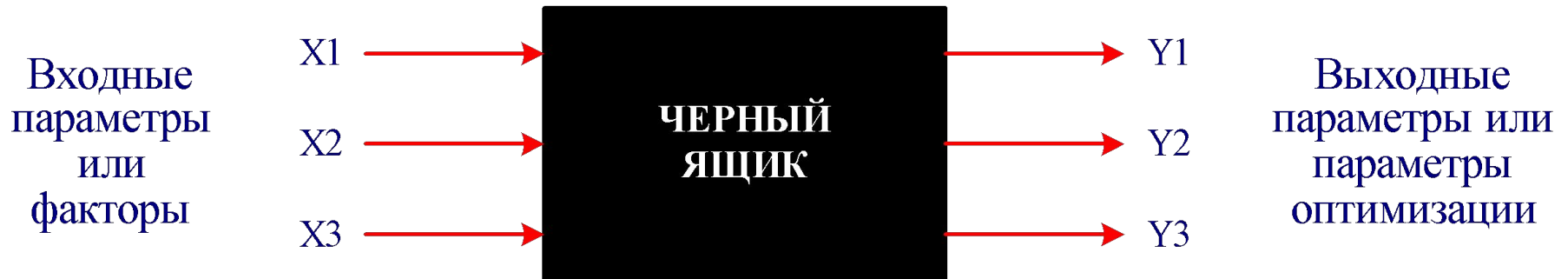
Аналитический метод используется для составления моделей только хорошо изученных процессов и не требует проведения экспериментов.

Недостаток – сложность решения полученных уравнений в случае сравнительно полного описания объекта.



# Экспериментальный

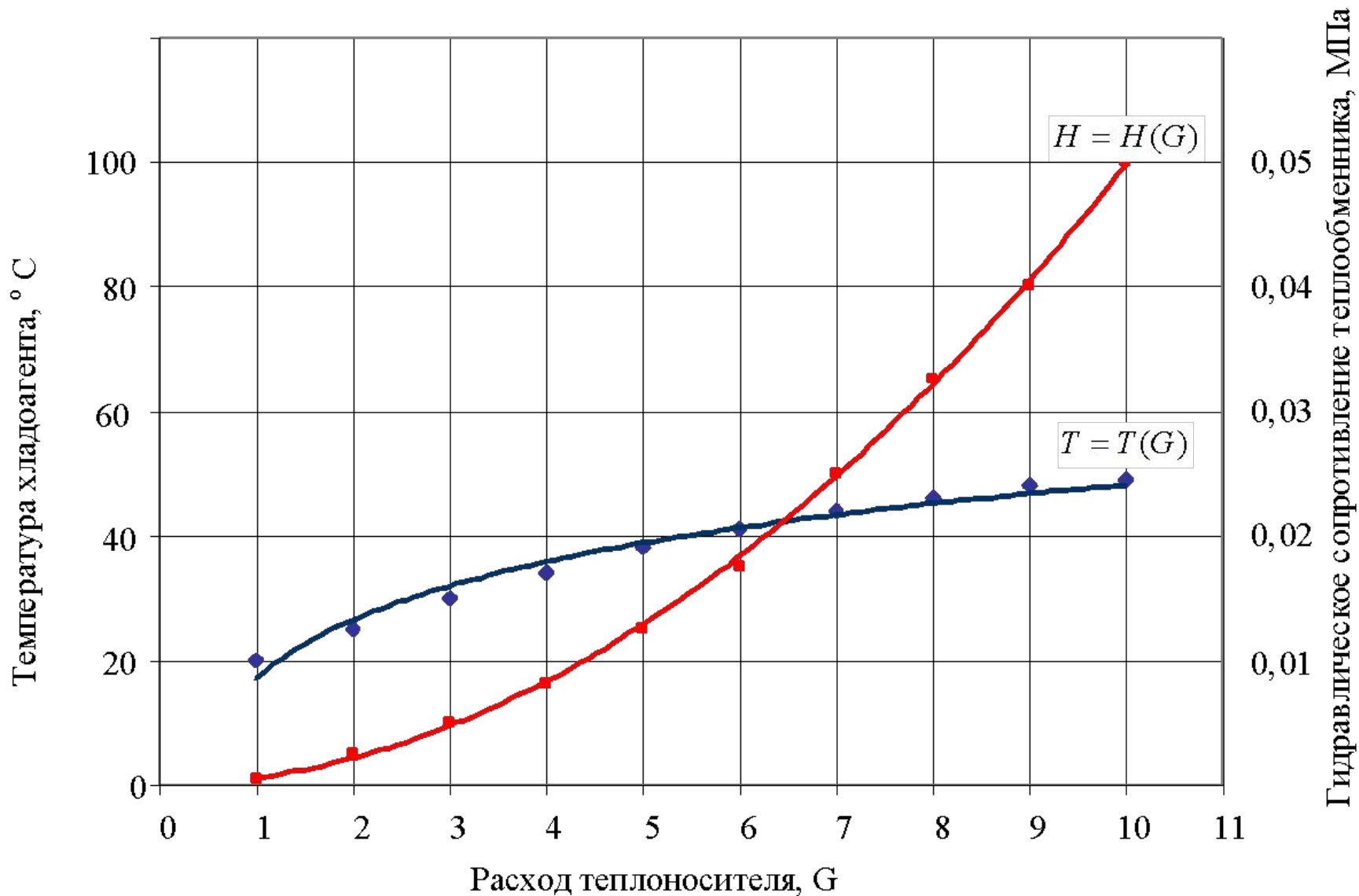
Заключается в опытном определении функциональной зависимости между исходными параметрами и результатами процесса.



Достоинство – простота получения математического описания при достаточно точном описании свойств оригинала.

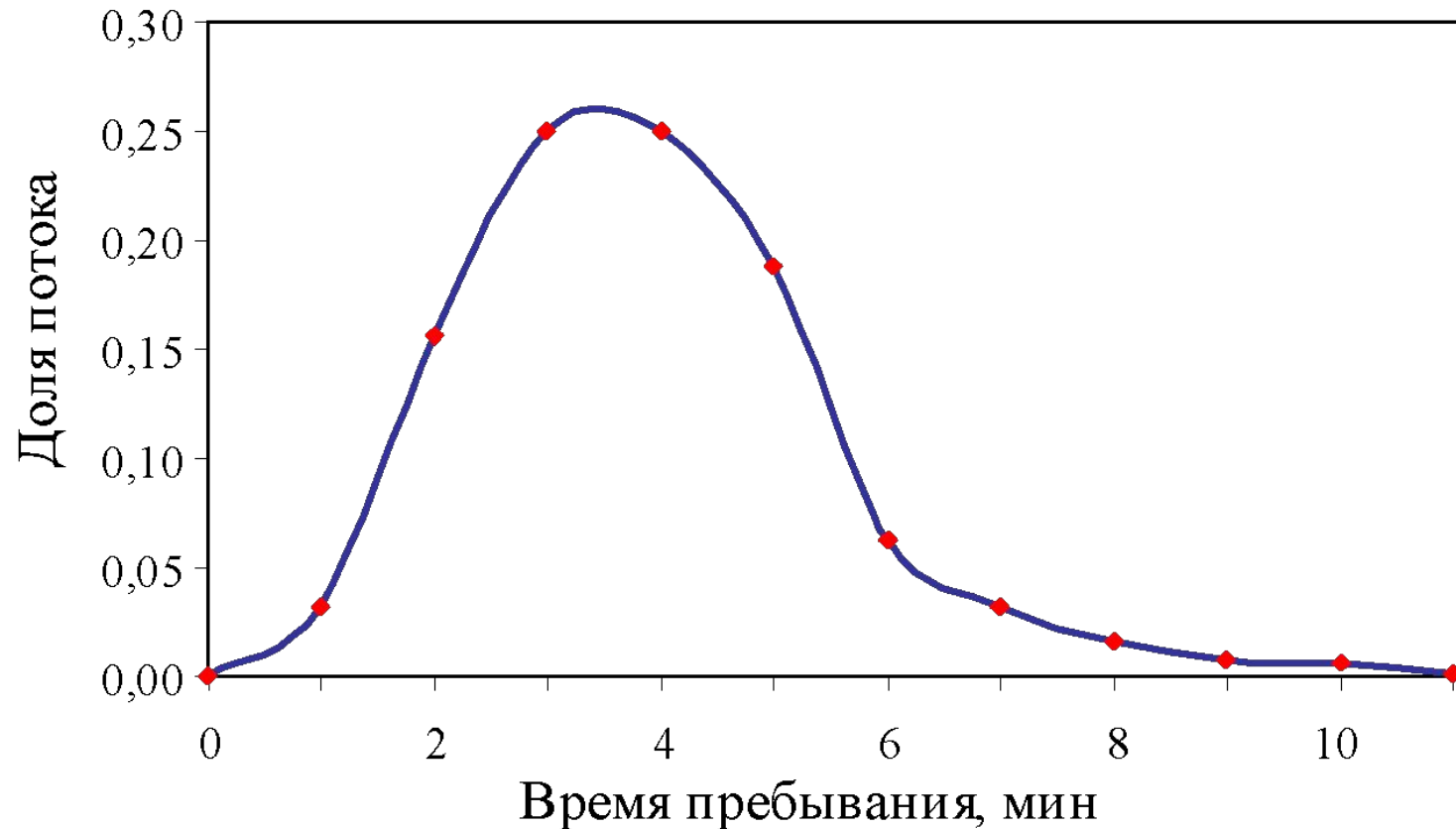
Недостаток – невозможность установления физической сущности процесса и невозможность распространения полученных эмпирических зависимостей на другие однотипные объекты.

# Пример создания математической модели экспериментальным методом



◆ Температура хладагента T    ■ Гидравлическое сопротивление H

# Математическое описание структуры потока в аппарате – основа построения моделей



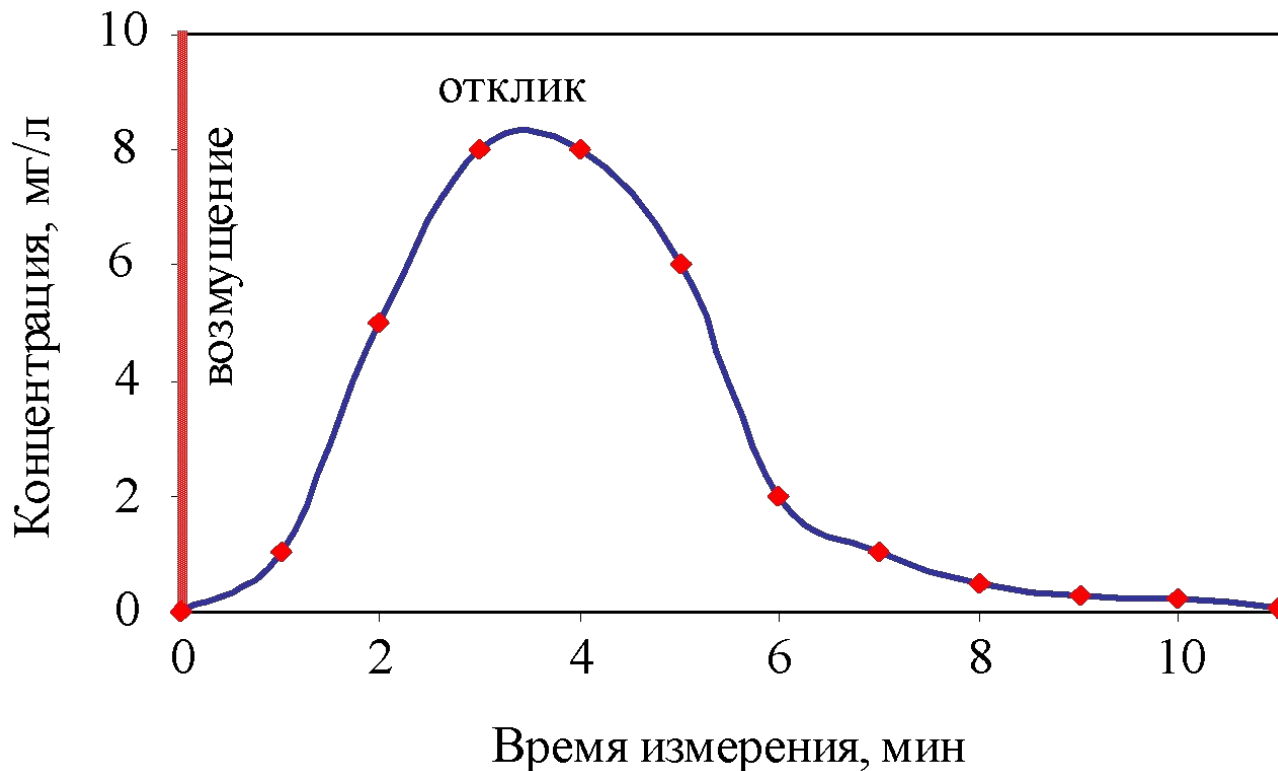
Функция распределения по времени пребывания частиц потока в аппарате

# Методы исследования структуры потоков

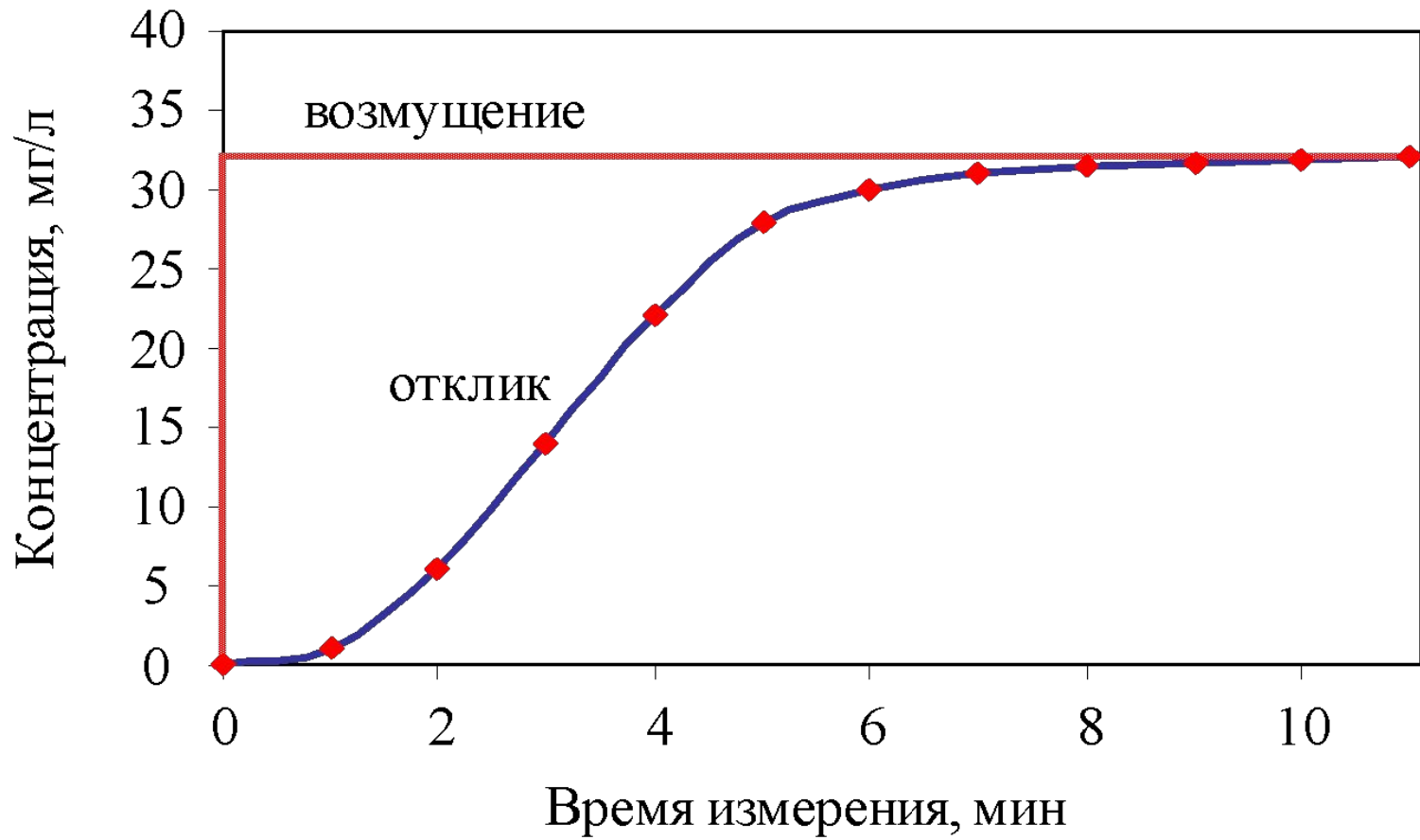
Требования к индикатору:

- поведение в аппарате подобно поведению частиц потока;
- отсутствие взаимодействия со средой;
- легко измеряться.

## Импульсный метод



# Ступенчатый



# Типовые модели структуры потока

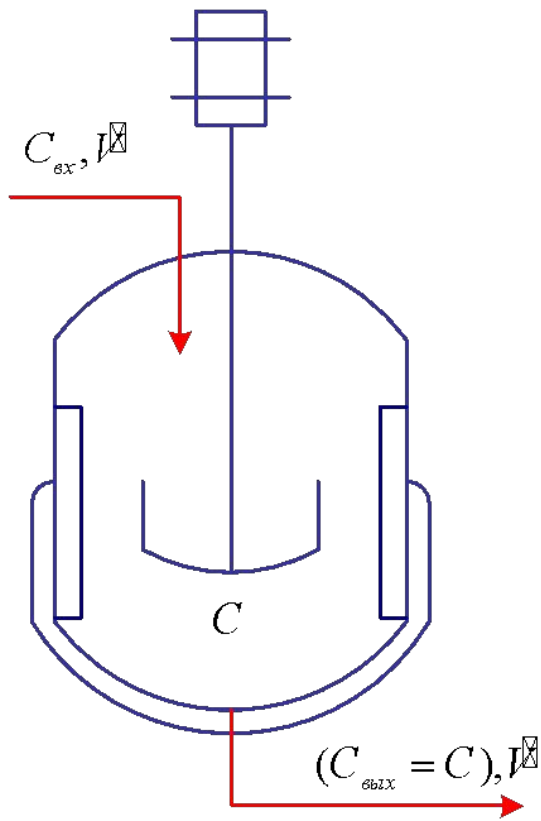
Требования к моделям:

- отражение физической сущности реального потока при достаточно простом математическом описании;
- простота определения параметров экспериментальным или расчетным путем;
- удобство для использования при расчетах конкретных химико-технологических процессов.

Классы моделей: идеальные и реальные.

- Идеальные: ИП и ИВ. Предполагают идеальную структуру потока и не всегда адекватны реальным процессам.
- Реальные: ЯМ; ЯМР и ДМ.

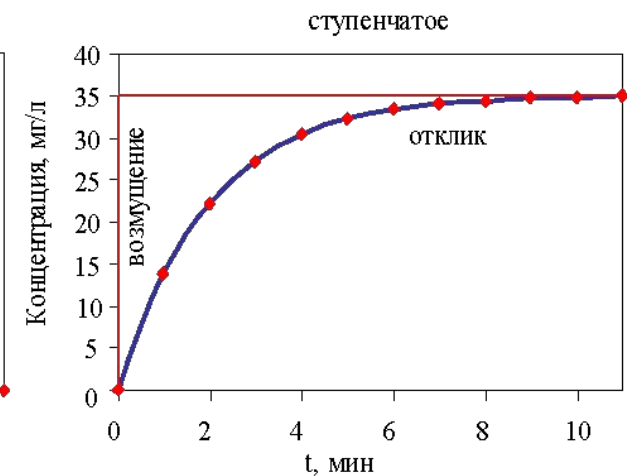
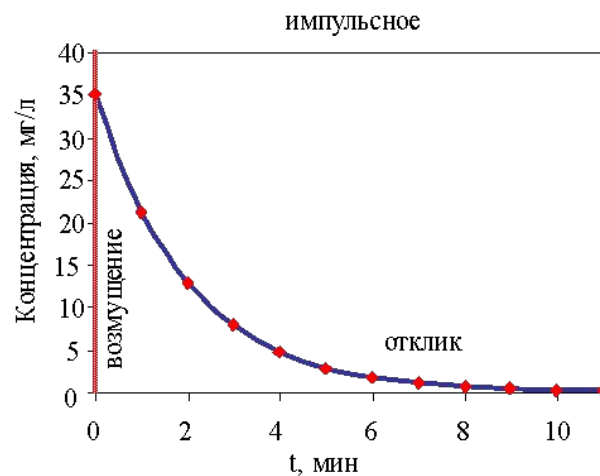
# Модель идеального перемешивания



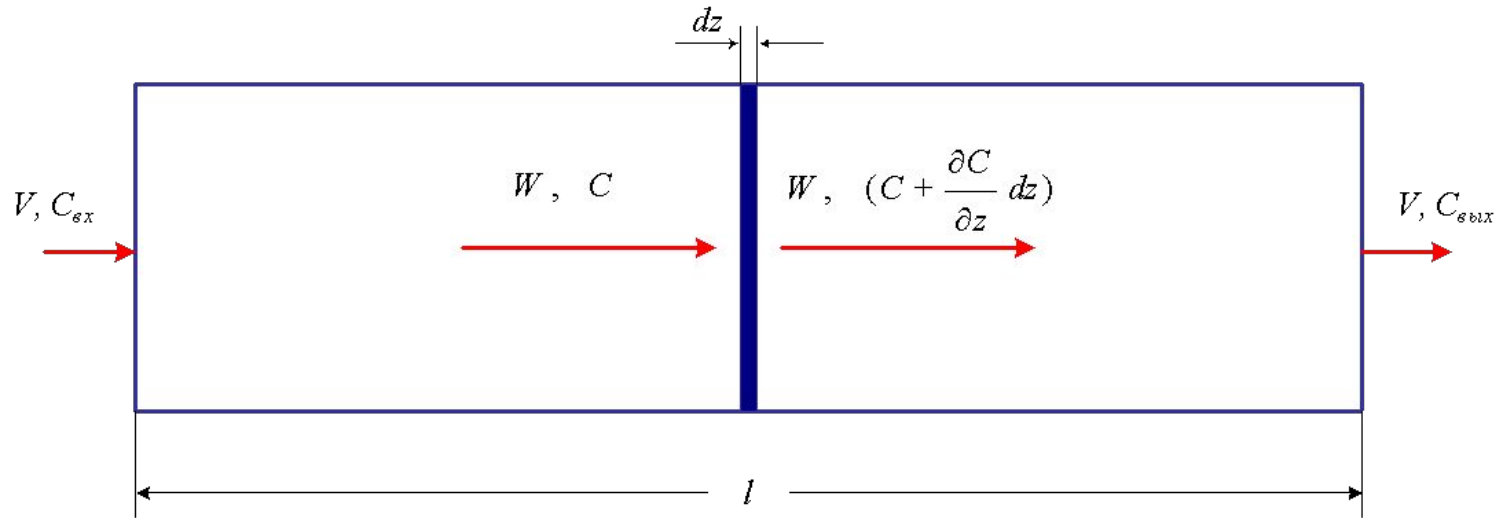
$$C_{\text{ВХ}} \xrightarrow{\text{скачок}} C = C_{\text{ВЫХ}}$$

$$V \frac{dC}{dt} = V(C_{ax} - C) \quad \rightarrow \quad \frac{dC}{dt} = \frac{C_{ax} - C}{\bar{t}}$$

$\bar{t} = V / V$  - среднее время пребывания потока в аппарате .

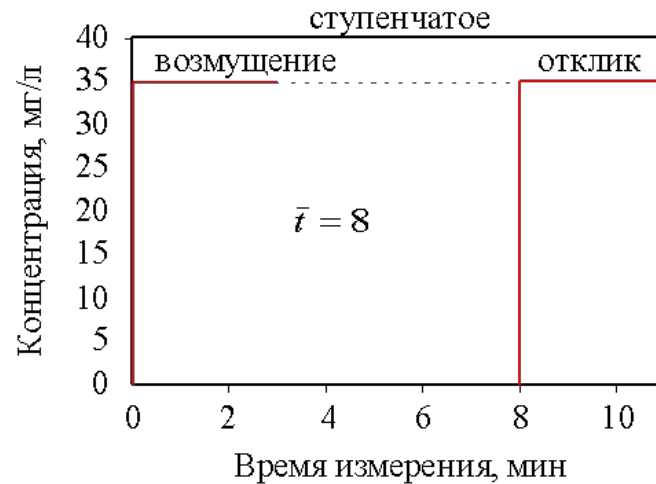


# Модель идеального вытеснения



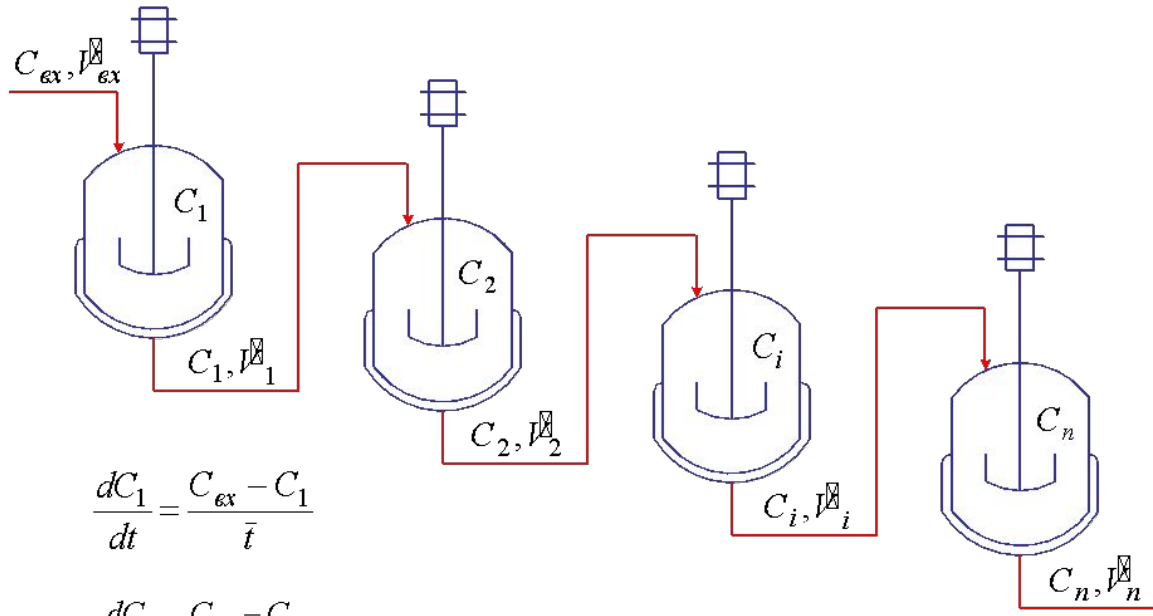
$$F dz \frac{\partial C}{\partial t} = C W F - \left( C + \frac{\partial C}{\partial z} dz \right) W F$$

$$F dz \frac{\partial C}{\partial t} = C W F - C W F - \frac{\partial C}{\partial z} dz W F \rightarrow \frac{\partial C}{\partial t} = - \frac{\partial C}{\partial z} W$$





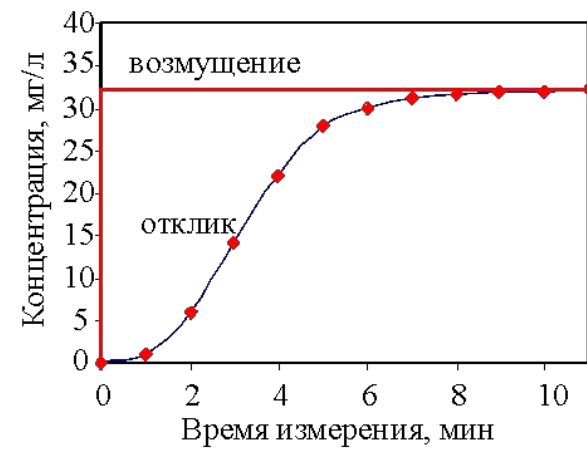
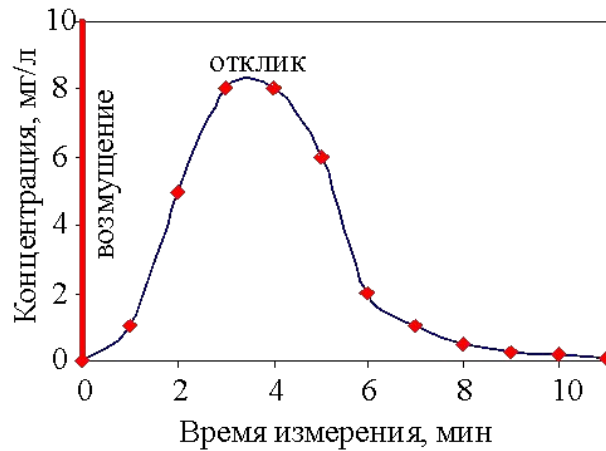
# Ячеечная модель



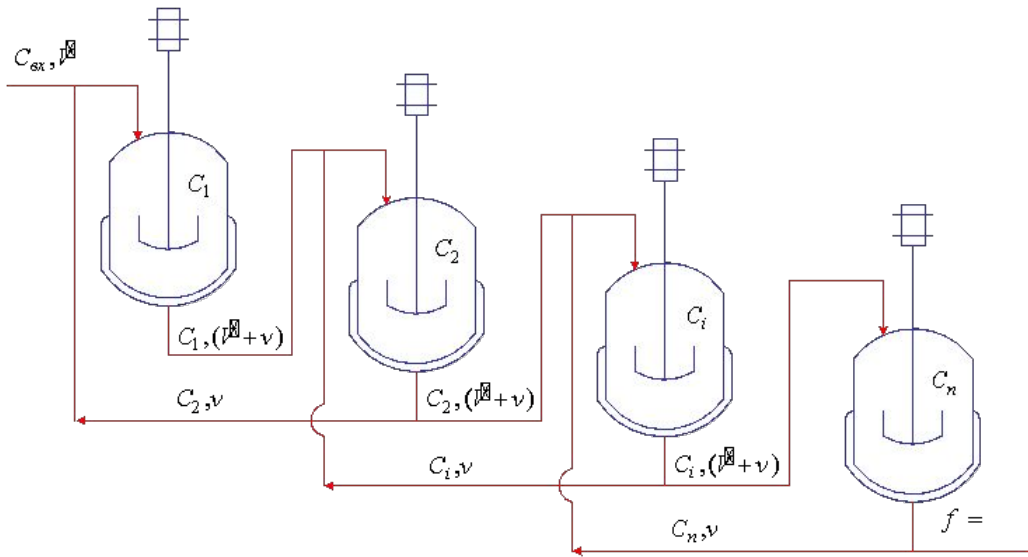
$$\frac{dC_1}{dt} = \frac{C_{ex} - C_1}{\bar{t}}$$

$$\frac{dC_i}{dt} = \frac{C_{i-1} - C_i}{\bar{t}}$$

$$\frac{dC_n}{dt} = \frac{C_{n-1} - C_n}{\bar{t}}$$



# Ячеечная модель с рециркуляцией

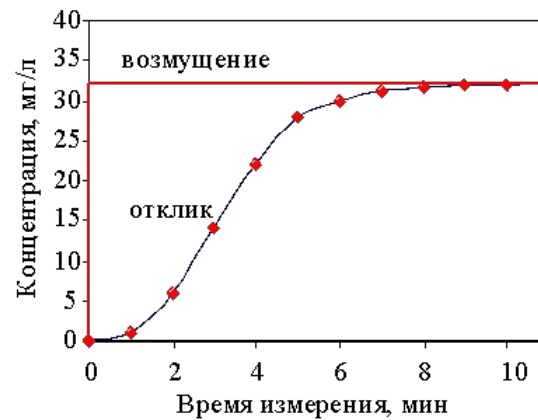
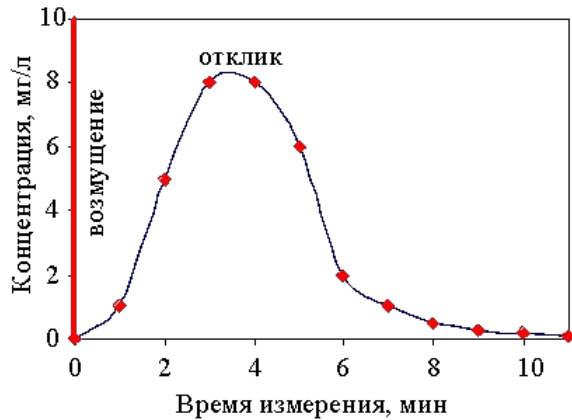


$$V \frac{dC_1}{dt} = \bar{v} C_{ex} + v C_2 - (\bar{v} + v) C_1$$

$$V \frac{dC_i}{dt} = (\bar{v} + v) C_{i-1} + v C_{i+1} - (\bar{v} + 2v) C_i$$

$$V \frac{dC_n}{dt} = (\bar{v} + v) C_{n-1} - (\bar{v} + v) C_n$$

$$f = v / \bar{v} \quad \bar{t} = V / \bar{v}$$

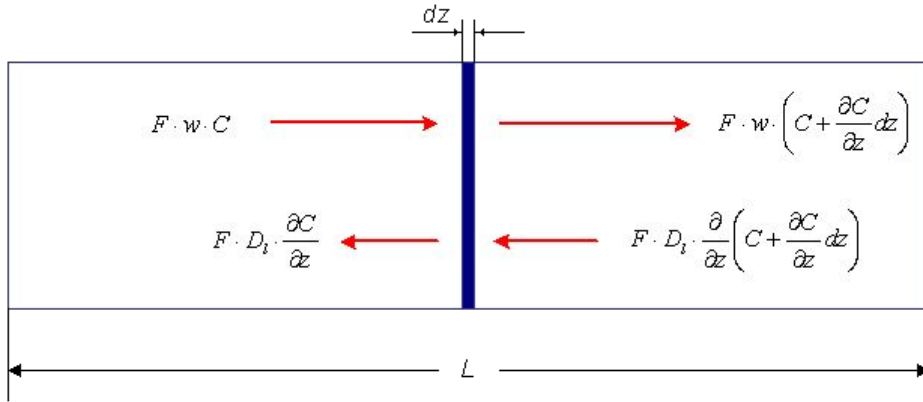


$$\bar{t} \frac{dC_1}{dt} = C_{ex} + f C_2 - (1 + f) C_1$$

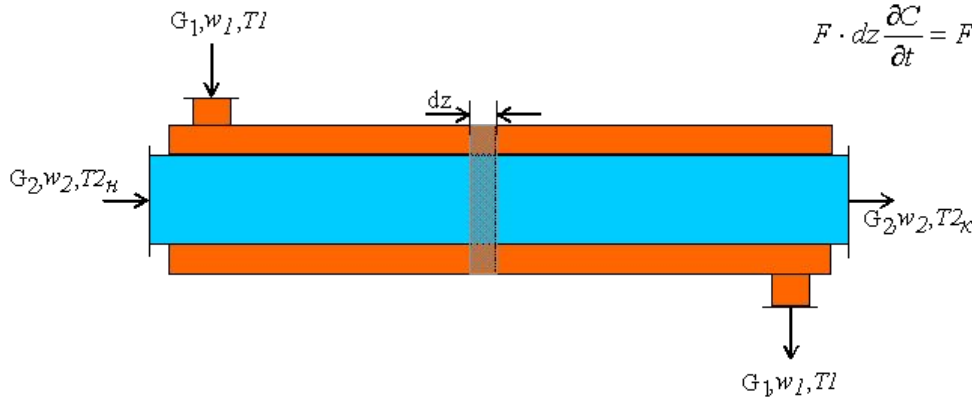
$$\bar{t} \frac{dC_i}{dt} = (1 + f) C_{i-1} + f C_{i+1} - (1 + 2f) C_i$$

$$\bar{t} \frac{dC_n}{dt} = (1 + f) C_{n-1} - (1 + f) C_n$$

# Диффузионная модель



$$F \cdot dz \frac{\partial C}{\partial t} = F \cdot w \cdot C + F \cdot D_1 \cdot \frac{\partial}{\partial z} \left( C + \frac{\partial C}{\partial z} dz \right) - F \cdot D_1 \cdot \frac{\partial C}{\partial z} - F \cdot w \cdot \left( C + \frac{\partial C}{\partial z} dz \right)$$



Математическое описание модели

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_1 \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - w \frac{\partial C}{\partial z}$$

