

УДК 51-7

<http://doi.org/10.5281/zenodo.2252778>

## МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В ПРОЦЕССАХ ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

©Шемелова О. В., SPIN-код: 4216-8679, канд. физ.-мат. наук,  
Казанский национальный исследовательский технологический университет,  
г. Нижнекамск, Россия, [olga-shemelova@yandex.ru](mailto:olga-shemelova@yandex.ru)

## MATHEMATICAL MODELING IN CHEMICAL TECHNOLOGY PROCESSES

©Shemelova O., SPIN-code: 4216-8679, Ph.D.,  
Kazan National Research Technological University, Nizhnekamsk, Russia, [olga-shemelova@yandex.ru](mailto:olga-shemelova@yandex.ru)

*Аннотация.* В практике исследований процессов химической технологии с помощью математического моделирования сравнительно просто удается изменять параметры исследуемого объекта и выяснять их влияние на качество его работы в целом. Это возможно потому, что деформация модели такого процесса исследуется не на его физической модели, а непосредственно на математической модели при использовании ЭВМ.

*Abstract.* In the practice of researching the processes of chemical technology with the help of mathematical modeling, it is relatively easy to change the parameters of the investigated object and to determine their influence on the quality of its work as a whole. This is possible because the deformation of the process model is studied not on the physical model, but directly on the mathematical model when using a computer.

*Ключевые слова:* математика, химические технологии, математическое моделирование, модель, задачи, решение задач, математическое описание.

*Keywords:* mathematics, chemical technologies, mathematical modeling, model, problems, problem solving, mathematical description.

Научно–технический прогресс опирается на взаимосвязь теории и экспериментирования. При быстром развитии теории, быстроте накопления научных данных, наблюдается стремительное развитие экспериментальных методов. Математика — это метод научного познания, т. к. в себе она объединяет теорию и эксперимент, при этом процесс познания протекает при помощи математической модели и математического подобия.

Природа дает возможность нам сталкиваться с общими количественными соотношениями, что способствует обобщению процесса, отвлекаясь от деталей, которые содержатся в комплексах качеств вещей, от происходящего процесса, и изображая ту или иную ее сторону с использованием математики, которая имеет вид функциональной связи или дифференциального уравнения [1].

С использованием данной модели идет воспроизведение не самого физического процесса, а его математические описания или аналогии между законами, выражающие

явления (в оригинальной форме или как модель) [2]. В данной ситуации математика может выступать как универсальный язык данной дисциплины.

Идея использования математики заключается в том, что реальные объекты заменяются на «образ», т. е. на математическую модель. После решения с такой моделью некоторой задачи, результаты могут рассматриваться для того, чтобы получить информацию о реальном объекте. В данной ситуации у исследователей появляются возможности проведения эксперимента с моделями объектов даже в том случае, когда в реальности это практически невозможно. Выполняя действия с моделью, появляется возможность достаточно быстро провести исследование свойств реального объекта, а также его поведения в любой мыслимой ситуации (характерно для теории). Также провести вычислительный (имитационный) эксперимент с моделью объекта дает возможность подробного и глубокого изучения объекта достаточно полно, что является недоступным для теории (является преимуществом эксперимента).

Для математического моделирования характерно:

- осуществление при помощи единственного средства решить целый класс задач, которые имеют одинаковые математические описания;
- простота смены задач, процесс введения переменного параметра, возмущения и различного начального условия;
- частичное моделирование (с использованием элементарных процессов), что рассматривается как существенное в процессе исследования сложного объекта химической технологии;
- использование эффективного средства (быстродействующая вычислительная техника) непрерывно совершенствующаяся;
- экономически эффективна, если сравнивать с физическим моделированием (затраты времени, стоимость и пр.) [3].

Существенный недостаток математического моделирования является сложность математического описания. Принимаемое допущение часто искажает сущность процесса, значительно снижая точность решения задач, несмотря на возможность современной вычислительной техники обеспечить высокую точность решения. Кроме того, при математическом моделировании не удастся визуально наблюдать за ходом процесса.

Теория эксперимента предоставляет исследователю вполне определенную логическую схему, а также метод решения поставленных задач на различных этапах исследования. Исследование состоит из следующих составных этапов: формализация априорных сведений об исследуемом технологическом объекте, выдвижении гипотезы о математической структуре объекта, планировании экспериментов, оценивании и проверке гипотез о параметрах модели, проверка гипотез об адекватности модели и условиях окончания построения модели.

Изучение методов математического моделирования предполагает тщательную отработку моделей. При этом, как правило, начиная с довольно-таки простой модели, постепенно продвигаются к более совершенной ее форме, которая наиболее точно отражает сложную природу изучаемого объекта.

Существует два подхода к формированию математического описания.

1. Когда весь химико–технологический процесс рассматривается как единая структурная единица с протекающими в ней процессами тепло– и массообмена, физическими и химическими процессами и т.д.

2. Расчленение сложного объекта на технологические звенья, в которых протекают сходные между собой процессы химической технологии [4].

Установление признаков схожести процессов осложняется тем, что химическая технология характеризуется многообразием процессов, которые можно классифицировать с разных позиций. Поэтому в целях выделения типовых процессов химической технологии и определения их природы используют несколько основных критериев.

Таким образом, метод математического моделирования позволяет:

–исключить необходимость изготовления громоздких физических моделей, связанную с материальными затратами;

–сокращать время определения характеристик (в особенности при расчете математических моделей на ЭВМ и применении эффективных вычислительных методов и алгоритмов);

–изучать поведение объекта моделирования при различных значениях параметров;

–анализировать применимость различных элементов;

–получать характеристики и показатели, которые сложно снимать экспериментально (корреляционные, частотные, параметрической чувствительности).

Для решения задач, связанных с изучением и разработкой в химической технологии, процесс можно представить несколькими моделями, с помощью которых можно не только воспроизвести известные свойства процесса, но и предсказать ранее неизвестные [5].

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект №16-08-00558.*

#### *Список литературы:*

1. Бельков В. П. Математические модели химико-технологических процессов. М.: Книга-Пресс, 2011. 40 с.

2. Шемелова О. В. Классификация основных характеристик систем различной физической природы // Вестник Казанского технологического университета. 2015. Т. 18. №6. С. 192-194.

3. Бондарь А. Г. Математическое моделирование в химической технологии. СПб.: ПРОТОС, 2012. 280 с.

4. Гордеев Л. С. Математическое моделирование химико-технологических систем. М.: ТЕРРА-НОВА. 2014. 48 с.

5. Федорова С. А. Математическое моделирование и применение ЭВМ в химической технологии. Севастополь: СНУЯЭиП. 2012. 184 с.

#### *References:*

1. Belkov, V. P. (2011). *Matematicheskie modeli khimiko-tekhnologicheskikh protsessov*. Moscow, Kniga-Press, 40. (in Russian).

2. Shemelova, O. V. (2015). *Klassifikatsiya osnovnykh kharakteristik sistem razlichnoi fizicheskoi prirody*. *Bulletin of the Technological University*, 18(6), 192-194.

3. Bondar, A. G. (2012). Matematicheskoe modelirovanie v khimicheskoi tekhnologii. St. Petersburg, PROTOS, 280. (in Russian).

4. Gordeev, L. S. (2014). Matematicheskoe modelirovanie khimiko-tekhnologicheskikh sistem. Moscow, TERRA-NOVA, 48. (in Russian).

5. Fedorova S. A. (2012). Matematicheskoe modelirovanie i primeneniye EVM v khimicheskoi tekhnologii. Sevastopol, SNUYaEiP, 184. (in Russian).

*Работа поступила  
в редакцию 21.11.2018 г.*

*Принята к публикации  
26.11.2018 г.*

---

*Ссылка для цитирования:*

Шемелова О. В. Математическое моделирование в процессах химической технологии // Бюллетень науки и практики. 2018. Т. 4. №12. С. 20-23. Режим доступа: <http://www.bulletennauki.com/12-84> (дата обращения 15.12.2018).

*Cite as (APA):*

Shemelova, O. (2018). Mathematical modeling in chemical technology processes. *Bulletin of Science and Practice*, 4(12), 20-23. (in Russian).