

МОДЕЛИРОВАНИЕ ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Выполнил: студент 145 н группы
Межаков Владимир

- Материальное (экспериментальное) моделирование широко используется в химии для познания и изучения строения веществ и особенностей протекания химических реакций, для выявления оптимальных условий химико-технологических процессов и др.

○ **Классификация моделей и виды моделирования**

- Единая классификация видов моделирования затруднительна в силу уже показанной многозначности понятия «модель» в науке и технике. Её можно проводить по различным основаниям:
 - · по характеру моделей (т. е. по средствам моделирования);
 - · по характеру моделируемых объектов;
 - · по сферам приложения моделирования (моделирование в технике, в физических науках, в химии, моделирование процессов живого, моделирование психики и т. п.)
 - · по уровням («глубине») моделирования, начиная, например, с выделения в физике моделирования на микроуровне (моделирование на уровнях исследования, касающихся элементарных частиц, атомов, молекул).

- Исследовать реактор в целом и осуществить масштабный переход позволило математическое моделирование. Процесс в реакторе складывается из большого числа химических и физических взаимодействий на различных структурных уровнях – молекула, макрообласть, элемент реактора, реактор. В соответствии со структурными уровнями процесса строится многоступенчатая математическая модель реактора. Первому уровню (собственно химическому превращению) соответствует кинетическая модель, уравнения которой описывают зависимость скорости реакции от концентрации реагирующих веществ, температуры и давления во всей области их изменений, охватывающей практические условия проведения процесса. Характер следующих структурных уровней зависит от типа реактора. Например, для реактора с неподвижным слоем катализатора второй уровень – процесс, протекающий на одном зерне катализатора, когда существенны перенос вещества и перенос тепла в пористом зерне. Каждый последующий структурный уровень включает все предыдущие как составные части, например математическое описание процесса на одном зерне катализатора включает как уравнения переноса, так и кинетические. Модель третьего уровня включает, кроме того, уравнения переноса вещества, тепла и импульса в слое катализатора и т. д. Модели реакторов других типов (с псевдосжиженным слоем, колонного типа с суспендированным катализатором и др.) также имеют иерархическую структуру.

- С помощью математического моделирования выбираются оптимальные условия проведения процесса, определяются необходимое количество катализатора, размеры и форма реактора, параметрическая чувствительность процесса к начальным и краевым условиям, переходные режимы, а также исследуется устойчивость процесса. В ряде случаев сначала проводится теоретическая оптимизация — определяются оптимальные условия, при которых выход полезного продукта наибольший, независимо от того, смогут ли они быть осуществлены, а затем, на втором этапе, выбирается инженерное решение, позволяющее наилучшим образом приблизиться к теоретическому оптимальному режиму с учётом экономических и других показателей. Для осуществления найденных режимов и нормальной работы реактора необходимо обеспечить равномерное распределение реакционной смеси по сечению реактора и полноту смешения потоков, различающихся составом и температурой. Эти задачи решаются физическим (аэрогидродинамическим) моделированием выбранной конструкции реактора.

- Для исследования различных процессов, в которых протекают фазовые и химические превращения, применяются методы термодинамического моделирования.
- *Термодинамическое моделирование* фазово-химических превращений основывается, с одной стороны, на законах и методах химической термодинамики, с другой - на математическом аппарате решения экстремальных задач. Полноценное сочетание этих двух подходов позволяет реализовать методику расчета, которая не имеет принципиальных ограничений на природу и компонентность исследуемых систем.
- Для исследования различных практических и теоретических задач, связанных с фазовыми и химическими превращениями, необходимо глубокое и детальное исследование физико-химической сущности процесса, выявление закономерностей протекающих при этом фазовых и химических превращений, влияния на них и на выход продукта параметров состояния (температуры, давления, состава реакционной смеси и др.).
- Сложность большинства реальных физико-химических процессов не позволяет решить описанные проблемы исключительно экспериментальным путем. Анализ возможных подходов показывает эффективность привлечения современных теорий и методов физико-химического и математического моделирования и расчета с использованием термодинамических представлений. С помощью данных методов можно проводить детальное исследование фазовых и химических превращений.

- Моделирование глубоко проникает в теоретическое мышление. Более того, развитие любой науки, в том числе и химии, можно трактовать — в весьма общем, но вполне разумном смысле, — как «теоретическое моделирование». Важная познавательная функция моделирования состоит в том, чтобы служить импульсом, источником новых теорий. Нередко бывает так, что теория первоначально возникает в виде модели, дающей приближенное, упрощенное объяснение явления, и выступает как первичная рабочая гипотеза, которая может перерасти в «предтеорию» — предшественницу развитой теории. При этом в процессе моделирования возникают новые идеи и формы эксперимента, происходит открытие ранее неизвестных фактов. Такое «переплетение» теоретического и экспериментального моделирования особенно характерно для развития физических теорий (например, молекулярно-кинетической или теории ядерных сил). Моделирование — не только одно из средств отображения явлений и процессов реального мира, но и объективный практический критерий проверки истинности наших знаний, осуществляемой непосредственно или с помощью установления их отношения к другой теории, выступающей в качестве модели, адекватность которой считается практически обоснованной. Применяясь в органическом единстве с другими методами познания, моделирование выступает как процесс углубления познания, его движения от относительно бедных информацией моделей к моделям более содержательным, полнее раскрывающим сущность исследуемых явлений действительности.
- Для развития химической науки важную роль играет не только теоретическое, но и экспериментальное моделирование химических процессов, позволяющее изучать сложные химико-технологические процессы, подбирать оптимальные условия их протекания, рассчитывать состав и выход продуктов реакций.