



моделирования и применения ЭВМ в химической технологии

Подготовила:
Климакина Анна
ОР-301

Предмет математического моделирования

- объекты химической технологии, изучение их свойств на математической модели, в целях определения оптимальных условий протекания процесса, управление объектом на основе математической модели и перенос результатов на моделируемый процесс.

Решение задач:

- ◎ Оптимальное проектирование производственных процессов;
- ◎ Полный контроль процесса;
- ◎ Максимальное ускорение переноса результатов лабораторных исследований и технологических схем в промышленность;
- ◎ Решение сложных вычислительных задач.

Основные качества специалиста:

1. четкое представление о сущности физико-химических явлений, протекающих в объекте;
2. умение математически описывать протекающие процессы и применять методы моделирования;
3. уметь обеспечить получение на модели содержательных результатов.

Необходимое условие
моделирования –
подобие объекта и его
модели.



Требования к модели:

- ✓ Затраты на создание модели должны быть значительно *меньше* затрат на создание оригинала.
- ✓ Должны быть четко определены *правила интерпретации* результатов вычислительного эксперимента.
- ✓ Основное требование - модель должна быть *существенной*.

Классификация моделей



Рис. 1.2. Классификация математических моделей (ТО — технический объект)

Классификация моделей по различным типам признаков

Тип признака	Модели
Природа моделей	Реальные Знаковые
По полноте отражения внутренних свойств объекта	Динамические Статические
По используемому математическому аппарату	Детерминированные Статистические
По форме представления	Мысленные Материальные

Классификация моделей

- По полноте отражения внутренних свойств объекта моделирования: - динамические;
- статические;
- По используемому математическому аппарату: - детерминированные;
- стохастические;

Классификация моделей

- по форме представления модели:

Мысленные		Материальные
Образные	Знаковые	Геометрическое
Описание	Символы	Физическое
Рисунки	Схемы, графики	Математическое

Особенности химических систем

Химическая реакция

```
graph TD; A[Химическая реакция] --> B[Изменение состава реагирующей смеси]; A --> C[Изменение температуры]; B --> D([Изменение скорости химического превращения]); C --> D;
```

Изменение состава
реагирующей смеси

Изменение температуры

Изменение
скорости
химического
превращения

Особенности химических систем

Изменение
размеров
реактора

The diagram consists of a light blue triangle on the left and a light blue oval on the right. A thin blue arrow points from the triangle to the oval. A diagonal line runs from the top-left corner of the slide towards the bottom-right corner, passing through the triangle and the oval.

Изменение
скорости
химического
превращения

Особенности химических систем



Сохранить одинаковое влияние физических факторов на скорость химического превращения в реакторах разного масштаба **НЕВОЗМОЖНО.**

Технохимические расчеты

I категория – расчеты, связанные с физическими и физико-химическими явлениями (перенос тепла и массы вещества);

II категория – расчеты, связанные с химическими процессами, протекающими в реакционных аппаратах.

Спасибо за внимание!