

УДК 66.0

*Фёдоров Олег Сергеевич, кандидат философских наук,
доцент кафедры экономики и управления инновациями,
Нижекамский химико-технологический институт (филиал)
ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский
технологический университет»
Россия, г. Нижнекамск*

*Корчагин Игорь Валерьевич,
студент магистратуры, 1 курс, факультет технологический,
Нижекамский химико-технологический институт (филиал)
ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский
технологический университет»
Россия, г. Нижнекамск*

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ХИМИКО-
ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ: ИСТОРИЯ СТАНОВЛЕНИЯ И
ВЛИЯНИЕ НА ПРОЦЕСС ИССЛЕДОВАНИЯ ХИМИКО-
ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ**

Аннотация: в статье кратко рассмотрена история становления математического моделирования и вычислительного эксперимента химической технологии. Описано влияние математического моделирования и вычислительного эксперимента, в частности, на процесс исследования и оптимизации химико-технологических процессов.

Ключевые слова: модель, математическое моделирование, вычислительный эксперимент, химическая технология, химико-технологический процесс, математическое моделирование химико-технологических процессов, компьютерное моделирование.

***Annotation:** the article briefly discusses the history of the formation of mathematical modeling and computational experiment of chemical technology. The influence of mathematical modeling and computational experiment, in particular, on the process of research and optimization of chemical and technological processes is described.*

***Key words:** model, mathematical modeling, computational experiment, chemical technology, chemical-technological process, mathematical modeling of chemical-technological processes, computer modeling.*

Объектом исследования в данной работе является история развития математического моделирования химико-технологических процессов (ММ ХТП). Предмет исследования – влияние и последствия внедрения математического моделирования (ММ) в процесс исследования ХТП.

Модель (от лат. слова *modulus* – аналог) представляет собой объект, изучение которого позволяет получить информацию о более сложном объекте. Моделирование – процесс создания моделей – используется для получения более простого представления о реальном объекте или процессе. В свою очередь, математическая модель – это описание изучаемого явления с помощью математических формул или уравнений. В настоящее время математические модели широко используются как способ изучения различных явлений, т. к. последние не всегда могут быть описаны простыми формулами. И единственным выходом решения задачи остаётся использование численных методов решения задач. Для получения ответа необходим алгоритм, представляющий собой строгую последовательность вычислительных и логических операций [1].

Набор инструкций, описывающих порядок действий, выполняемых при решении той или иной задачи, мы и называем алгоритмом. Так как изучаемые явления сложны, то и модель, в виду соответствия полноте описания этого явления, должна быть сложной. Если рассматривать математические модели,

то они состоят из большого количества величин, зависящих от постоянных и переменных параметров [1].

В 50-х гг. XX в. академик А.А. Самарский, основоположник ММ в России, описывал ММ как триаду – «модель – алгоритм – программа». Школа А.А. Самарского создала так называемый «вычислительный эксперимент» (ВЭ). ВЭ – это метод исследования, целью которого является «изучение явлений окружающего мира, когда натурный эксперимент оказывается слишком дорогим и сложным» [1].

ВЭ заключается в постройке математической модели явления и последующем задействовании компьютера. Принцип работы ВЭ заключается в проведении исследования объектов с помощью компьютера, рассмотрении разных вариантов математических моделей, поиске наиболее оптимальных параметров и уточнении математической модели. Главное отличие ВЭ от натурального исследования – возможность накопления результатов проведённых экспериментов и быстрого применения их в решении задач. Это универсальная математическая модель. Например, уравнение нелинейной теплопроводности подходит не только для описания тепловых процессов, но и для описания диффузии вещества, движения грунтовых вод и фильтрации газа в пористых средах. Меняется только физический смысл величин, содержащихся в этом уравнении. В рамках методологии ВЭ, если имеется необходимость, проводится уточнение модели как её «усложнение» (учёт других параметров) или «упрощение» (выявление параметров, которыми можно пренебречь). ВЭ заканчивается, когда исследователь уверен, что математическая модель в полной мере описывает натурный объект [2].

ММ и ВЭ, в частности, позволяют исследовать объекты и решать связанные с ними задачи во многих сферах. Одной из таких сфер является химическая технология (ХТ).

Процессы, связанные с ХТ, очень сложны – это химические превращения в аппаратах различных конструкций (включая необходимость

проведения катализа), а также массообменные (предназначены для разделения продуктов реакции и отделения непрореагировавшего сырья от продукта) и теплообменные (нагрев, охлаждение, конденсация, выпаривание и т. д.) процессы [3].

История моделирования процессов ХТ связана с развитием информатики, компьютерного оборудования и языков программирования. Датой зарождения моделирования процессов ХТ считаются 1970-е гг., когда стало доступно подходящее аппаратное и программное обеспечение (в основном языки программирования Fortran и C). Математическое моделирование в исследовании и оптимизации химико-технологических процессов (ММ ХТП) начало применяться для создания модели, которая должна адекватно описывать исследуемый процесс. Разрабатывались математические модели аппаратов, основанных на протекающих в них моделях процессов, моделировались технологические процессы, являющиеся совокупностью данных аппаратов [3, 4].

ММ ХТП предоставляет возможность исследования и прогноза реального ХТП, а также подбора наиболее оптимальных параметров [5].

Современное ММ ХТП осуществляется с помощью персональных компьютеров. На сегодняшний день существует большое количество программ для компьютерного моделирования химико-технологических процессов (КМ ХТП). Компьютерные программы «объединяют базы данных химических компонентов и расширенных методов расчёта термодинамических свойств с гибкими методами расчёта аппаратов. Эти программы обладают хорошими вычислительными средствами для выполнения расчётов всех материальных и тепловых балансов, необходимых для моделирования большинства статических и некоторых динамических процессов. Экспертные системы и расширенная обработка входных данных, а также проверка ошибок обеспечивают его высокую эффективность и надёжность. Данные программы предназначены для выполнения поверочно-оценочных и проектных расчётов

различных аппаратов, а также сложных многостадийных процессов с большим числом единиц оборудования и рециклических потоков». Ещё одной важной функцией, которую стоит отметить, является учёт влияния внешних факторов (изменение состава сырья, изменение требований к конечным и промежуточным продуктам и т. д.) на показатели ХТП [6].

Исследование такой сложной системы, как ХТП, не подлежит полноценному изучению обычными теоретическими методами, а прямой натурный эксперимент над ним, чаще всего, характеризуется большой длительностью, высокими затратами и наличием рядом опасностей. Цена ошибок и просчётов недопустимо высока. Поэтому ММ ХТП является неизбежной составляющей научно-технического прогресса и в силу таких достоинств, как эффективность, точность и экономия затрат (материалов и времени), в настоящее время уже невозможно представить процесс исследования и оптимизации ХТП без моделирующих программ [1, 6].

Обзор моделирующих программ является частью нашего дальнейшего исследования.

Список использованных источников:

1. Острая, О.В. Математическое моделирование. Краткий исторический обзор / О.В. Острая // Университетский комплекс как региональный центр образования, науки и культуры, 1-3 февраля 2017 года. Материалы Всероссийской научно-методической конференции. – 2017. – С. 3146-3150.

2. Корешкова, И.А. История математического моделирования и технологии вычислительного эксперимента / И.А. Корешкова // Научные исследования в образовании. – 2009. – № 4. – С. 33-44.

3. Математическое моделирование химико-технологических процессов: учебное пособие / Н.В. Ушева, О.Е. Мойзес, О.Е. Митянина, Е.А. Кузьменко. – Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2014. – 135 с.

4. Process Simulation [Электронный ресурс]. URL: <https://academic-accelerator.com/encyclopedia/process-simulation> (дата обращения: 25.10.2023).

5. Демиденко, Л.Л. Математическое моделирование как инструмент для решения задачи химико-технологических процессов / Л.Л. Демиденко, В.А. Галицкова, С.В. Столярова // Теория и технология металлургического производства. – 2012. – № 12. – С. 181-186.

6. Гартман, Т.Н. Аналитический обзор современных пакетов моделирующих программ для компьютерного моделирования химико-технологических систем / Т.Н. Гартман, Ф.С. Советин // Успехи в химии и химической технологии. – 2012. – Т. 26, № 11 (140). – С. 117-120.