

Лекция 1. Мерусков Дмитрий КС-26
Компьютерное моделирование химико-технологических процессов (ХТП):

- системный анализ ХТП
- построение систем ур-й мат-го описания ХТП
- разработка и реализация расчётных модулей и моделирующих алгоритмов ХТП
- идентификация мат-х моделей ХТП
- оптимизация ХТП

Для решения задач комп. модел. применяется системный подход, в соотв. с которым ХТП рассматривается как некоторая функ-я система (объект), изучение которой осущ-ся на различных иерархических уровнях.

Объект, являющийся совокупностью соединённых между собой аппаратов (хим. производство), в частности, для производства некоторого целевого продукта, наз-ся химико-технологической системой (ХТС)

Важнейший этап построения адекватной математической модели ХТС — анализ её структуры и закономерности сложной системы на более простых подсистемах в соответствии со след. пар-ми:

- определение иерархической структуры системы;
- реализация принципа иерархической соподчинённости;
- комплексное исследование отдельных процессов.

В хим. промышленности целесообразно выделять 5 ступеней иерархии системы:

1) Микроуровень — процесс или явления рас-ся без учёта влияния закономерностей движения потоков фаз в аппаратах.

2) Макроуровень — ФХС — представляет собой секцию аппарата или отдельный аппарат. Все процессы рас-ся с учётом движения материальных и тепловых потоков

3) Уровень хим. производства — ХТС — представляет собой совокупность аппаратов, связанных между собой материальными, тепловыми и инф. потоками.

4) Уровень предприятия — это несколько производств, составляющих предприятие, при анализе работы которого необходимо учитывать экономические и

управление закономерности протекания
бизнес-процессов функ-я предприятия.

5) Уровень компании или объединения - это несколько
предприятий, объединенных в компанию

Построение мат. описания ХТП

Типы моделей ХТП(ФХС)

теоретические

↓
фундаментальное
копированное

эмпирические

↓
вероятностно-
статические

↓
физико-химические
блочно-структурные

Ур-я баланса гидродинамических
моделей движущихся потоков

↓
химич-е превращения

↓
массопередача

↓
фазовые переходы при изменении
агрегатного состояния потоков

↓
теплопередача

↓
теплоизлучение

Математическое
моделирование
процесса (модель)
е помощью
у-ий, а с помощью
компьютера

Адекватность
модели
II ур-я

Основные
- форма
- алгоритм
- программа
- практика

Выбор и
1) Прямой
арифметический
2) Итерационный
получение
сходящегося

Математическая модель - система ур-й, которая связывает между собой входные и выходные переменные реального процесса (мо), для прогнозирования в-в которого необходимо и помощью специального алгоритма решить эту систему ур-й, а сам алгоритм должен быть реализован на компьютере.

Адекватность ММ проверяется с помощью выражения, вычисляющего норму вектора рассогласования:

$$\|\bar{y}_{расч} - \bar{y}_{жсч}\| = \sqrt{\sum_{i=1}^n (y_{расч}^i - y_{жсч}^i)^2}$$

$$\|\bar{y}_{расч} - \bar{y}_{жсч}\| \leq \varepsilon$$

Основные этапы мат.мод-я:

- формализация
- алгоритмизация
- программирование
- практическое использование

Виды численных методов:

1) Прямые - решение получают за конечное число арифметических действий

2) Итерационные - точное решение может быть получено теоретически в виде предела бесконечной сходящейся последовательности вычислений

3) Вероятностное - метод случайного поиска решения (угадывания)

Все виды численных методов позволяют получить только приближенные решения задачи, то есть численное решение всегда содержит погрешность.