

## Лекция 2. Химико-технологический процесс как объект моделирования

Определившись с видом и основными процедурами моделирования, можно уточнить ситуацию с объектами моделирования. Если конкретизировать объекты моделирования, захватывающие компетенции химиков-технологов, то в самом сокращенном рассмотрении необходимо выделить два таких объекта:

- 1) химико-технологический процесс;
- 2) химико-технологическая система.

Для эффективного решения задач математического моделирования химико-технологических объектов, предполагающего формализацию объекта исследования, применяется системный подход. В рамках системного подхода химико-технологическим объектам моделирования в нашем рассмотрении можно дать следующие определения.

Химико-технологический процесс – совокупность взаимосвязанных физико-химических процессов, обеспечивающих реализацию заданных химических превращений и протекающих, как правило, в одном технологическом аппарате или реакторе.

Химико-технологическая система – совокупность ХТП (или технологических аппаратов), взаимосвязанных технологическими (материальными и (или) энергетическими) потоками, функционирующая как единое целое с целью выпуска заданной продукции.

В соответствии с названием данной учебной дисциплины основным объектом моделирования для нас является ХТП, а точнее различные ХТП, составляющие промышленные и опытные технологии получения материалов и изделий электронной техники. Например, в производстве керамических сердечников на основе магнитомягких ферритов такими отдельными ХТП, образующими общую ХТС получения сердечников на основе магний-цинкового феррита с общей формулой  $Zn_{1-x}Mg_xFe_2O_4$  из исходных оксидов, являются следующие основные технологические операции:

- 1) взвешивание аттестованных порошков исходных оксидных компонентов ( $ZnO$ ,  $MgO$ ,  $Fe_2O_3$ ) на весах с учетом загрузки в вибромельницу 200 кг шихты состава, например,  $Fe_2O_3:ZnO:MgO$  74,5:18,9:6,6 мас. % в течение 10–20 мин;

- 2) приготовление шихты при измельчении и усреднении смеси порошков в вибромельнице со стальными шарами диаметром 10 мм при соотношении масс загрузки и шаров 1:2 в течение 5 ч;

- 3) синтетический отжиг оксидной шихты (ферритизация) в воздушной среде при максимальной температуре 1100 °С в течение 2 ч, сопровождающийся твердофазным синтезом ферритовой фазы в соответствии с уравнением  $0,59ZnO + 0,41MgO + Fe_2O_3 = Zn_{0,59}Mg_{0,41}Fe_2O_4$ ;

- 4) измельчение ферритового спека в вибромельнице в течение 4 ч до удельной поверхности частиц порошка 0,32–0,51 м<sup>2</sup>/г;

- 5) прессование приготовленной пресс-массы на заготовки сердечников диаметром 11 мм и длиной 110 мм прессом при давлении прессования 10 МПа в течение 30–90 с;

- 6) отжиг (спекание) разрезанных и высушенных заготовок сердечников в воздушной среде при максимальной температуре 1200 °С в течение 2 ч при общей продолжительности выдержки в печи 94 ч;

- 7) выходной контроль магнитных и геометрических параметров керамических сердечников с помощью измерительного оборудования в течение 5–20 мин.

Процедура математического моделирования отдельных ХТП во многом сводится к определению вида физико-химического или химико-технологического оператора  $\Omega$ , который отображает математическую зависимость входных переменных  $X$  от выходных переменных  $y$ .  $y = \Omega X$ .

Другими словами, основу математической модели ХТП составляют уравнения, которые отражают зависимость выбранных для данного процесса входных и выходных переменных с учетом параметров объекта моделирования, которые математически представляют собой конечные коэффициенты уравнений модели. В общем случае входные

(независимые) переменные влияют и определяют состояние процесса, а выходные переменные характеризуют состояние процесса и зависят от входных переменных.

Основными характеристиками любого технологического процесса являются его технологические параметры, отражающие условия проведения, и показатели, отражающие результат проведения данного процесса. В качестве технологических параметров ХТП выступают:

- состав активных сред;
- температура и давление в аппарате;
- продолжительность процесса;
- скорость передвижения отдельных элементов ХТП.

Перечень показателей ХТП весьма обширен и включает не только технологические, но и экономические, эксплуатационные и социальные показатели. В поле нашего рассмотрения в первую очередь попадают технологические показатели ХТП, которые подробно рассматривались в рамках учебной дисциплины «Общая химическая технология» и к которым относят:

- степень превращения исходных реагентов  $\alpha$  (%);
- селективность процесса  $S$  (отн. ед.);
- выход заданной продукции  $B_i$  (%);
- скорость  $v$  или производительность  $\Pi$  процесса (например, мкм/мин, кг/ч и др.);
- нормы расхода ресурсов, в том числе исходных реагентов, воды, энергии  $P_i$  (например, г/шт. или кг/кг и др.);
- показатели качества продукции в соответствующих единицах измерения, отражающие функциональные или эксплуатационные характеристики продукта ХТП (например, длина монокристаллического слитка, удельное электросопротивление полупроводника и его разброс по длине слитка  $\rho_{ном} \pm \Delta\rho$  (например,  $10 \text{ Ом}\cdot\text{см} \pm 25 \%$ ), толщина пленки, электрическая прочность диэлектрика, пористость керамического изделия, глубина легированного слоя, плотность дислокаций в кристалле, число светящихся точек на поверхности, смещение размеров литографического топологического рисунка и многое другое).

При моделировании ХТП чаще технологические параметры выступают в роли входных переменных, а показатели – в качестве выходных переменных. Выбор выходной переменной обычно вытекает из конкретной задачи моделирования. Например, если необходимо повысить производительность установки выращивания монокристаллических слитков, то логичной выходной переменной является скорость роста кристалла. При выборе входных переменных необходим экспертный анализ соответствующего ХТП, позволяющий определить параметры, которые наиболее эффективно влияют на заданную выходную переменную. При этом следует учитывать, что по природе входные переменные разделяют на технологические, конструктивные и экономические. С точки зрения управления входные переменные разделяют:

- на неконтролируемые;
- контролируемые, среди которых регулируемые (управляющие) и нерегулируемые (возмущающие).

Неконтролируемые параметры изучать затруднительно, возмущающие параметры необходимо учитывать, а управляющие – можно полноценно изучать и оптимизировать. Например, в технологии ферритовых магнитных изделий в ряде случаев присутствует операция естественной сушки заготовок перед спеканием. При моделировании такого технологического процесса выходной переменной может быть влажность заготовок. Неконтролируемой входной переменной в случае, например, слабоventилируемого производственного помещения является влажность воздуха, возмущающей переменной может быть диаметр цилиндрической заготовки, а управляющей – продолжительность сушки.

Кроме входных и выходных переменных при создании модели конкретного ХТП необходимо определиться с фиксированными коэффициентами (параметрами) в используемых математических уравнениях. Эти коэффициенты остаются постоянными в данном расчете, и количественно характеризуют конструктивные или физико-химические особенности объекта моделирования.