

Лекция 1. Общие сведения о моделях и математическом моделировании

В самом общем смысле моделирование представляет собой процесс исследования реального (оригинального) объекта с помощью его модели. Процедура моделирования должна удовлетворять, по крайней мере, двум требованиям: экономичность и традуктивность. Экономичность предполагает, что исследование модели связано с меньшими затратами (денег, времени, физико-химических ресурсов и т. д.), чем исследование реального объекта. Традуктивность (от лат. *traductio* – перенесение, перевод) предполагает возможность количественного перенесения результатов моделирования на реальный объект. Традуктивность моделирования тесно связана с условием подобия между моделью и оригиналом. С учетом теории подобия можно сформулировать правило традукции: безразмерные комплексы (критерии подобия) в сходственных точках подобных объектов (то есть модели и оригинала) равны. На практике несложно решить проблему экономичности моделирования и гораздо сложнее обеспечить выполнение требования традуктивности, особенно при моделировании технологических процессов, когда результаты, полученные на модели, количественно, а иногда даже качественно, не воспроизводятся в реальном аппарате.

Из определения процедуры моделирования следует, что ее реализация предполагает наличие:

- объекта исследования;
- модели этого объекта;
- методов и инструментов исследования данного объекта с помощью используемой модели.

В общем случае круг объектов моделирования практически неисчерпаем, поскольку объектом исследования могут выступать физические тела, биологические существа, различные процессы (например, физико-химические, социальные, экономические) и многое другое. В рамках данной учебной дисциплины объектом моделирования является один или множество технологических процессов.

Разобравшись с объектами моделирования, можно перейти к определению понятия «модель». В общем случае под моделью понимают мысленно представляемую или материально реализованную систему, которая отображает и (или) воспроизводит реальный объект исследования (и, соответственно, позволяет получать о нем новые сведения). Здесь уместно напомнить, что под системой обычно понимают совокупность элементов, закономерно связанных друг с другом в единое целое, обладающее определенными свойствами. Более коротко можно определить систему как совокупность взаимосвязанных элементов.

В зависимости от способа воспроизведения объекта исследования модели можно разделить на материальные и идеальные (рис. 1.1). К материальным моделям относятся геометрически подобные (например, макет дома как модель здания); физически подобные (например, образец сплава как модель материала); аналоговые (например, химический стакан с раствором как модель химической ванны травления). Идеальные модели включают графические (например, чертеж камеры как модель элемента установки) и математические или аналитические модели (например, система математических уравнений как модель соответствующих физико-химических процессов, протекающих в аппарате).

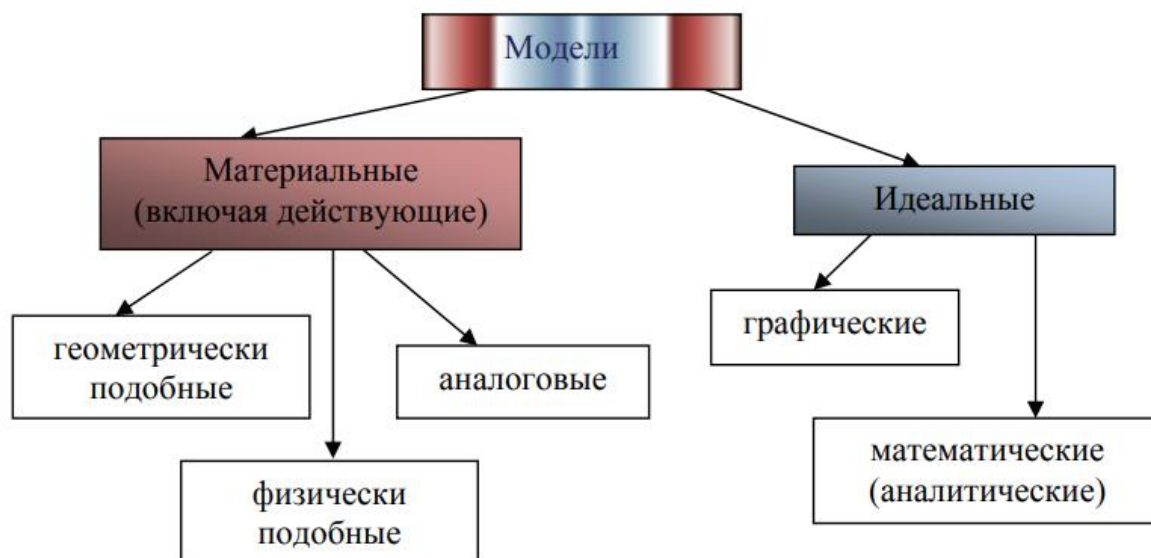


Рис. 1.1. Схема классификации моделей

Мы хорошо знакомы с материальными моделями, которые начинаются в нашей жизни с детских игрушек. При изучении технологических процессов к материальным моделям можно отнести лабораторное оборудование, с помощью которого воспроизводятся и исследуются заданные процессы. Ключевым достоинством физических или материальных моделей является их достоверность (табл. 1.1). Для расчетных исследований, в том числе технологических процессов, используются идеальные математические модели. Развитие цифровых технологий практически позволяет преодолеть основные недостатки математического моделирования при условии наличия у исследователя необходимых знаний и навыков. Вместе с тем решение задачи переноса результатов экспериментов с модели на объект моделирования, например в конкретный ХТП, остается зачастую затруднительным.

Таблица 1.1

Сравнительная характеристика материальных и математических моделей

Материальные модели	Математические модели
Достоинства	
<ul style="list-style-type: none"> ✓ Достоверность ✓ Воспроизводимость ✓ Наглядность 	<ul style="list-style-type: none"> ✓ Универсальность ✓ Производительность ✓ Экономичность
Недостатки	
<ul style="list-style-type: none"> ✓ Повышенные затраты ✓ Узкий диапазон варьирования входных переменных и параметров 	<ul style="list-style-type: none"> ✓ Пониженная точность ✓ Отсутствие визуализации

В рамках данной учебной дисциплины рассматриваются процессы только математического моделирования, которое с развитием информационных технологий стало неотъемлемой и весьма значимой частью научно-технического развития общества, в том числе промышленного производства. Это связано с тем, что компьютерные расчеты в сравнении с экспериментальными исследованиями доступны, скоротечны, дешевы, однако сопряжены с упрощениями объекта исследований.

- Среди целей математического моделирования можно выделить:
- 1) получение новых данных о существующем объекте (анализ);
 - 2) определение новых условий функционирования объекта, обеспечивающих достижение заданного результата (оптимизация);
 - 3) создание (синтез) нового объекта.

Обозначенные цели моделирования заданных объектов достигаются в результате последовательного решения следующих основных задач: создание модели, расчет по модели, оптимизация объекта.

Создание математической модели заключается в определении вида математических уравнений, которые отражают зависимость значений данной функции (то есть зависимой переменной) от одной или нескольких независимых переменных (аргументов) и описывают данный объект моделирования. То есть объект моделирования как система характеризуется вектором входных переменных X и вектором выходных переменных y . Различают два основных вида математических моделей: физико-химические (или теоретические, или детерминированные) и статистические (или эмпирические, или вероятностные) (табл. 1.2).

Таблица 1.2

Сравнительная характеристика основных видов математических моделей

Теоретические (или физико-химические, или детерминированные)	Эмпирические (или статистические, или вероятностные)
1. Принцип исследования	
Декомпозиция (блочно-структурный принцип)	Кибернетический (принцип черного ящика)
2. Подход к описанию объекта	
Детерминированный	Вероятностный
3. Математический аппарат	
Уравнения физико-химических законов и явлений	Теория вероятности и законы математической статистики
4. Использование экспериментальных данных	
Для проверки адекватности модели	Для определения вида уравнений модели и проверки ее адекватности
5. Тип решаемой задачи моделирования	
Прямая задача $\bar{X} \rightarrow \bar{y}$	Обратная задача $\bar{y} \rightarrow \bar{X}$
6. Возможности использования моделей	
Интерполяция и экстраполяция	Только интерполяция
7. Пример уравнения модели	
Уравнение Аррениуса: $k = k_0 \exp\left(-\frac{\Delta E_{\text{акт}}}{RT}\right),$ где k – константа скорости химической реакции, мин^{-1} (для реакции 1-го порядка); k_0 – предэкспоненциальный множитель, мин^{-1} ; ΔE – энергия активации данной реакции, Дж; R – универсальная газовая постоянная, $R = 8,314 \text{ Дж}\cdot\text{моль}^{-1}\cdot\text{К}^{-1}$; T – температура химической системы, К	Уравнение регрессии 1-го порядка: $y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3,$ где y – выходная переменная для объекта, b_i – коэффициенты полиномиального уравнения (параметры модели), x_i – входные переменные для объекта (факторы) в соответствующих единицах измерения

В физико-химических моделях используются уравнения, подчас весьма сложные, которые описывают определенные (детерминированные) физико-химические явления и законы, соответствующие объекту моделирования. При этом исследуемая система в соответствии с принципом декомпозиции разделяется на более простые подсистемы. Такие модели решают прямую задачу моделирования, то есть позволяют с помощью известных уравнений вычислять значения функций y для заданных значений независимых переменных x . Кроме того, физико-химические модели позволяют исследователю применять рабочие математические зависимости как внутри поля экспериментальных данных (интерполяция), так и за его пределами (экстраполяция).

Статистические модели используют уравнения, полученные в результате статистической обработки эмпирических данных на основе теории вероятности с использованием кибернетического принципа «черного ящика», в соответствии с которым исследуется внешнее поведение системы без учета ее внутренней структуры. При этом решается обратная задача моделирования, когда по известным дискретным значениям выходных и входных переменных y и x определяют вид функциональной зависимости $y = f(x)$ и используют ее для дальнейших расчетов. Данные модели допускают только интерполяцию данных с использованием полученных уравнений.

При выборе уравнений модели важно учитывать особенности поведения исследуемой системы в пространстве и во времени. В отношении пространства выделяют 2 вида объектов:

- с сосредоточенными параметрами (неизменные в пространстве);
- с распределенными параметрами (изменяющиеся в пространстве и, соответственно, требующие задания граничных условий при $x = 0$).

В отношении времени выделяют также 2 вида объектов:

- стационарные системы (не изменяющиеся во времени);
- нестационарные системы (изменяющиеся во времени и, соответственно, требующие задания начальных условий при $t = 0$).

В рамках моделирования технологических процессов наиболее часто используются 3 вида математических уравнений:

1) конечные алгебраические уравнения (обычно описывают стационарные системы с сосредоточенными параметрами), в том числе линейные, логарифмические, тригонометрические и другие, например уравнение для расчета профиля распределения примеси по кристаллу, выращенному методом зонной плавки.

2) обычные дифференциальные уравнения (обычно описывают нестационарные системы с сосредоточенными параметрами и требуют задания начальных условий при $t = 0$), например дифференциальное кинетическое уравнение химической реакции 2-го порядка по i -тому исходному компоненту

3) дифференциальные уравнения в частных производных (обычно описывают нестационарные или стационарные системы с распределенными параметрами и требуют задания начальных (при $t = 0$) и граничных (при $x = 0$) условий), например уравнение двухпараметрической диффузионной модели для случая одномерного равномерного движения потока в цилиндрическом аппарате.

Методики проведения расчетов при моделировании зависят от вида используемых моделей, то есть детерминированных или статистических (табл. 1.2). В настоящее время расчеты проводят с использованием прикладных пакетов компьютерных программ, что практически не требует математических знаний, а требует навыков работы с соответствующим программным продуктом. Среди таких программ можно использовать в самом простом случае табличный процессор Excel. Гораздо больше возможностей предоставляет пользователю популярный математический пакет под названием MathCAD, который студенты обычно используют при выполнении лабораторных работ по моделированию ХТП. Пакет MathCAD объединяет несколько интегрированных компонентов, включая:

- 1) мощный текстовый редактор, работающий и с текстом, и с формулами;
- 2) вычислительный процессор, обеспечивающий расчет с использованием встроенных численных методов, например Рунге – Кутты, Булирша – Штёра и др.;
- 3) символьный процессор, являющийся фактически системой искусственного интеллекта;
- 4) базу данных математической и инженерной информации в виде интерактивной электронной книги.

При выполнении расчетов с использованием пакета MathCAD, как, впрочем, и других компьютерных пакетов, полезно помнить, что программный продукт содержит справочное приложение, где можно получить консультацию по возникающим проблемам реализации необходимых действий, связанных с расчетами, графическими построениями и другими задачами.

Для расчетов химико-технологических объектов созданы специализированные пакеты моделирующих программ (ПМП), использование которых требует как специальных знаний, так и конкретных навыков. Среди химико-технологических ПМП можно упомянуть пакеты ChemCAD, HYSYS, Process (более поздняя версия Pro II), которые позволяют моделировать статические и динамические процессы с последующей оптимизацией режимов обработки, рассчитывать конструктивные параметры аппаратов и бизнес-планы.

Заключительным этапом моделирования обычно является оптимизация ХТП и ХТС, которая не зависит от вида используемых моделей. Результатом моделирования производственных процессов являются оптимизированные режимы реализации ХТП, разработанные ХТП или ХТС, а также системы автоматизированного проектирования (САПР), автоматизированные системы управления технологическими процессами (АСУТП) или предприятиями (АСУП).