

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РФ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«СЕВЕРО-КАВКАЗСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»



Методические указания
к практическим занятиям по дисциплине
«Моделирование химико-технологических процессов»
для направления подготовки 18.03.01 Химическая технология
направленность (профиль) Технология химических производств

Невинномысск 2024

Методические указания составлены в соответствии с программой по дисциплине «Моделирование химико-технологических процессов». В методических указаниях приводятся теоретическое обоснование практических работ, указаны методики их выполнения, требования к оформлению отчета, приведены вопросы для защиты работы и примеры выполнения работ.

В приложении приведены статистические таблицы, необходимые для обработки данных и варианты заданий для выполнения работ.

Настоящие указания разработаны для направления подготовки 18.03.01 Химическая технология

Методические указания рассмотрены на заседании кафедры ХТМиАХП и рекомендованы к внутривузовскому изданию.

Составил *старший*

преподаватель Е.В.Вернигорова

Рецензент *доцент* *Т.С.*

Чередниченко

СОДЕРЖАНИЕ

Введение	4
Практическое занятие 1	5
ТЕМА: «МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ТИПОВЫХ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ»	5
Вопросы для контроля	12
Практическое занятие 2	13
Тема «ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЬ СОСТАВЛЕНИЯ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ»	13
Вопросы для контроля	16
Практическое занятие 3	17
Тема «АДЕКВАТНОСТЬ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ»	17
Практическое занятие 4	23
Тема «МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ОПИСАНИЯ ТИПОВЫХ МОДЕЛЕЙ ГИДРОДИНАМИКИ»	23
РЕКОМЕНДУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА	35

Введение

Целью освоения дисциплины «Моделирование химико-технологических процессов

» является формирование набора профессиональных компетенций будущего бакалавра по направлению подготовки 18.03.01 Химическая технология.

Основные задачи изучения состоят в усвоении студентами:

- методов системного подхода к исследованию и анализу технологических процессов;
- принципов создания математических моделей физико-химических процессов с использованием стандартных пакетов и средств автоматизированного проектирования;
- методам реализации математических моделей физико-химических процессов на ЭВМ и установления их адекватности.
- методов проведения экспериментов с использованием математических моделей и установления границ их применения.

Практическое занятие 1

ТЕМА: «МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ТИПОВЫХ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ»

1.1 Классификация основных процессов и аппаратов

Наиболее целесообразно классифицировать все многообразие применяемых в химической промышленности типовых процессов по способу создания движущей силы процесса. По этому признаку все процессы можно разделить на шесть типов:

Гидравлические процессы

Связаны с перемещением жидких и газообразных материалов. К ним относятся: перекачивание, транспортирование, хранение, дозирование.

Осуществляются с помощью насосов, компрессоров, вентиляторов, воздуходувок, емкостей.

Движущей силой гидравлических процессов является разность давлений. Скорость протекания определяется законами гидродинамики.

Тепловые процессы

Связаны с передачей тепла от одного тела (потока) к другому.

К ним **относятся**: нагревание и охлаждение, испарение и конденсация, плавление и затверждение.

Осуществляются с помощью нагревательных и плавильных печей, теплообменников, конденсаторов-холодильников, испарителей.

Движущей силой тепловых процессов является разность температур. Скорость протекания процесса определяется законами теплопередачи.

Массообменные (диффузионные) процессы

Связаны с переходом веществ из одной фазы в другую в результате диффузии.

К ним **относятся:** перегонка, ректификация, абсорбция, адсорбция и десорбция, экстракция, сушка, кристаллизация и др.

Осуществляются в ректификационных колоннах, абсорберах, адсорберах и десорберах, экстракторах, сушильных аппаратах, кристаллизаторах и др.

Движущей силой массообменных процессов является разность концентрации. Скорость процесса определяется законами массопередачи.

Гидромеханические процессы

Связаны с обработкой неоднородных систем – жидкостей и газов со взвешенными в них твердыми или жидкими веществами.

К ним **относятся:** отстаивание в поле силы тяжести, центробежном поле, электрическом и магнитном полях, центрифугирование, фильтрование, течение газа или жидкости через слой сыпучих материалов.

Осуществляются в отстойниках, центрифугах, электродегидраторах, циклонах, фильтр-прессах, аппаратах с мешалкой, в барботажных аппаратах и др.

Движущей силой является разность давлений.

Скорость процесса определяется законами гидродинамики неоднородных систем.

Химические процессы

Связаны с превращением обрабатываемых материалов для получения новых соединений.

К ним **относятся:** паровая конверсия природного газа, синтез аммиака, окисление аммиака, получение аммиачной селитры и др.

Осуществляются в химических реакторах, конструкция которых определяется условиями (T , P), скоростью химической реакции, наличием катализатора и др.

Движущей силой химических процессов является разность концентраций реагирующих веществ. Скорость процесса определяется законами химической кинетики.

Механические процессы

Связаны с обработкой твердых материалов.

К ним **относится**: измельчение, рассев, транспортирование, дозирование, смешивание.

Осуществляется в дробилках, классификаторах, дозаторах, смесителях.

Движущей силой является приложенное к телу усилие или напряжение (сжатия, сдвига).

Скорость процесса определяется законами механики.

Основные процессы могут быть периодическими и непрерывными.

Периодические процессы характеризуются единством места проведения различных стадий изменяющимися во времени массами и составами потоков. То есть такие процессы являются **Нестационарными**, что затрудняет их автоматизацию, создание крупнотоннажных производств, усложняет конструкцию аппаратов и т. д.

Например, на рис. 1 изображен реактор, представляющий собой аппарат с мешалкой, оборудованный рубашкой, в которую подается теплоноситель.

Работа такого реактора в периодическом режиме характеризуется следующими стадиями:

- а) загрузка исходных веществ в реактор;
- б) нагрев с помощью подачи теплоносителя в рубашку до необходимой температуры;

- в) создание с помощью инертного газа (N_2) необходимого давления;
- г) проведение реакции до заданной концентрации продуктов реакции;
- д) охлаждение продуктов и снижение давления;
- е) выгрузка продуктов реакции;
- ж) продувка аппарата.

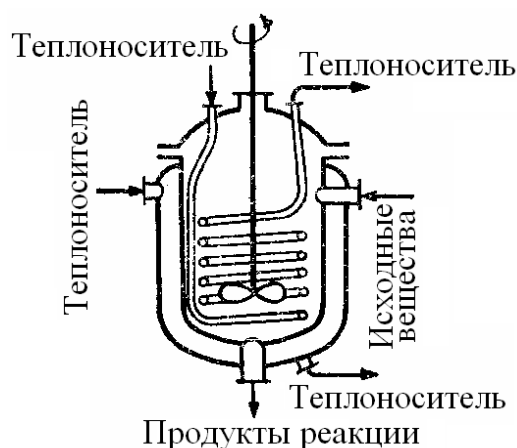


Рисунок. 1 – Реактор смешения, работающий в периодическом режиме

Непрерывные процессы характеризуются единством времени проведения всех стадий процесса, каждая из которых осуществляется в специальном аппарате.

Потоки, их составы и другие параметры на всех стадиях являются **установившимися**. Это облегчает их автоматизацию, позволяет упростить конструкцию.

На рис. 2 представлен реактор смешения, работающий в непрерывном режиме. Для осуществления непрерывного режима требуется большее число аппаратов.

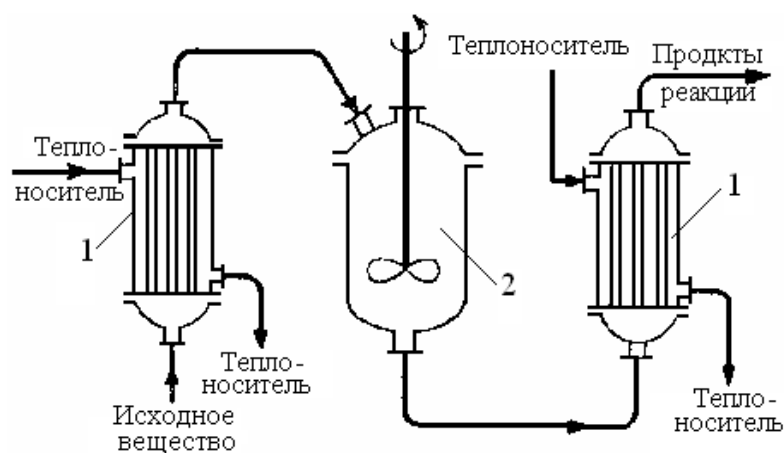


Рисунок. 2 – Реактор смещения, работающий в непрерывном режиме:

1 – теплообменные аппараты; 2 – реактор смешения.

Основные законы

Проведение любого процесса связано с использованием различных материалов и энергии (главным образом тепловой).

Материальные балансы основаны на законе сохранения материи, а **тепловые** балансы – на законе сохранения энергии [1].

$$\sum_{i=1}^n G_i c_{ij} + \sum_{k=1}^m G_k^* = 0 \quad ; \quad (1.1)$$

$$\sum_{i=1}^n G_i C p_i t_i + \sum_{k=1}^m Q_k^* = 0 \quad (1.2)$$

Плотность. Масса жидкости, содержащаяся в единице ее объема, называется плотностью (ρ):

$$\rho = \frac{m}{V}, \quad (1.3)$$

где m – масса жидкости, кг; V – объем жидкости, м³.

Плотность жидкости мало зависит от давления и температуры.

Плотность газов в значительной степени зависит от температуры и давления. Зависимость между температурой, давлением и объемом

газа определяется уравнением состояния (управлением Менделеева – Клайперона):

$$pV = \frac{mRT}{M}, \quad (1.4)$$

где p – давление, Па; V – объем газа, м³; m – масса газа, кг; R – универсальная газовая постоянная, $R = 8314$ Дж/(кмоль·К); T – температура, К; M – молекулярная масса газа, кг/моль.

Из уравнения получим:

$$P = \frac{m}{V} \cdot \frac{RT}{M} = \rho \cdot \frac{RT}{M}. \quad (1.5)$$

Учитывая, что

$$\frac{pV}{T} = const, \quad (1.6)$$

можно получить следующие соотношения, позволяющие рассчитывать объем и плотность при изменении температуры:

$$V = V_0 \frac{P_0 \cdot T}{P \cdot T_0}, \quad (1.7)$$

$$\rho = \rho_0 \frac{T_0 \cdot P}{T \cdot P_0}, \quad (1.8)$$

где $T_0 = 273\text{К}$ (0°C); $P_0 = 101325$ Па (нормальные условия).

Расходом называется количество жидкости, протекающей через живое сечение потока в единицу времени. Расход может быть выражен в массовых (m , кг/ч) или объемных (v , м³/ч) единицах.

Массовый и объемный расходы связаны соотношением:

$$m = \rho \cdot v, \quad (1.9)$$

где ρ – плотность жидкости.

Скоростью потока (ω) называется отношение объемного расхода (v) к площади поперечного сечения потока (F):

$$\omega = \frac{v}{F} \quad (1.10)$$

Плотность смеси жидкостей ($\rho_{см}$) приближенно можно рассчитать по формуле:

$$\frac{1}{\rho_{см}} = \sum_{i=1}^n \frac{x_i}{\rho_i}, \quad (1.11)$$

где x_i – массовая доля i -го компонента в смеси, ρ_i – плотность i -го компонента, кг/м³;

Плотность любого газа ρ при температуре T и давлении P может быть рассчитана по формуле:

$$\rho = \rho_0 \frac{T_0 \cdot P}{T \cdot P_0} = \frac{M}{22,4} \cdot \frac{273,15 \cdot P}{T \cdot P_0} \quad (1.12)$$

$$(T_0 = 273,15 \text{ К}, P_0 = 1,013 \cdot 10^5 \text{ Па}),$$

где $\rho_0 = M/22,4$ кг/м³ – плотность газа при н. у., M – мольная масса газа, кг/кмоль; T – температура, К; P и P_0 должны быть выражены в одинаковых единицах.

Плотность смеси газов:

$$\rho_{см} = \sum_{i=1}^n y_i \rho_i, \quad (1.13)$$

где y_i – объем доли компонентов газовой смеси; ρ_i – плотность i -го компонента, кг/м³.

Давление P столба жидкости высотой h при плотности жидкости ρ равняется:

$$P = \rho \cdot g \cdot h, \quad (1.14)$$

здесь P выражено в Па; ρ -в кг/м³; $g = 9,81$ м/с²; h – высота, в м.

Основное уравнение гидростатики:

$$P = P_0 + \rho \cdot g \cdot h, \quad (1.15)$$

где P – гидростатическое давление на глубине h (в, м) от поверхности жидкости, Па; P_0 – давление на поверхность жидкости, Па.

Основные законы:

Закон сохранения массы вещества.

Закон сохранения энергии.

Законы гидродинамики.

Законы теплопередачи.

Законы массопередачи.

Вопросы для контроля

1. По какому признаку классифицируются основные процессы химической технологии?

2. Приведите классификацию основных процессов химической технологии.

3. С помощью каких аппаратов осуществляются гидравлические процессы?

4. Что является движущей силой тепловых процессов? В каких аппаратах они осуществляются?

5. В каких аппаратах проводятся массообменные процессы?

6. Перечислите процессы, относящиеся к массообменным процессам.

7. Что является движущей силой массообменных процессов?

8. Какие системы являются неоднородными? Приведите примеры.

9. В каких аппаратах происходит разделение неоднородных систем?

10. Что является движущей силой химических процессов? В каких аппаратах они проводятся?

11. Что является движущей силой механических процессов?

12. Какими стадиями характеризуется работа реактора в периодическом режиме?

13. Перечислите преимущества непрерывных процессов.

14. Перечислите основные законы, используемые в химической технологии.

Практическое занятие № 2

Тема «ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЬ СОСТАВЛЕНИЯ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ»

Моделирование как метод исследования технологических процессов включает в себя следующие основные этапы:

- постановка цели моделирования;
- построение модели процесса;
- проверка адекватности модели и внесение корректив;
- проведение расчетных исследований и оптимизация процесса с использованием модели.

Каждый этап включает стадии. Общая схема процесса математического моделирования приведена на рис. 3.1.

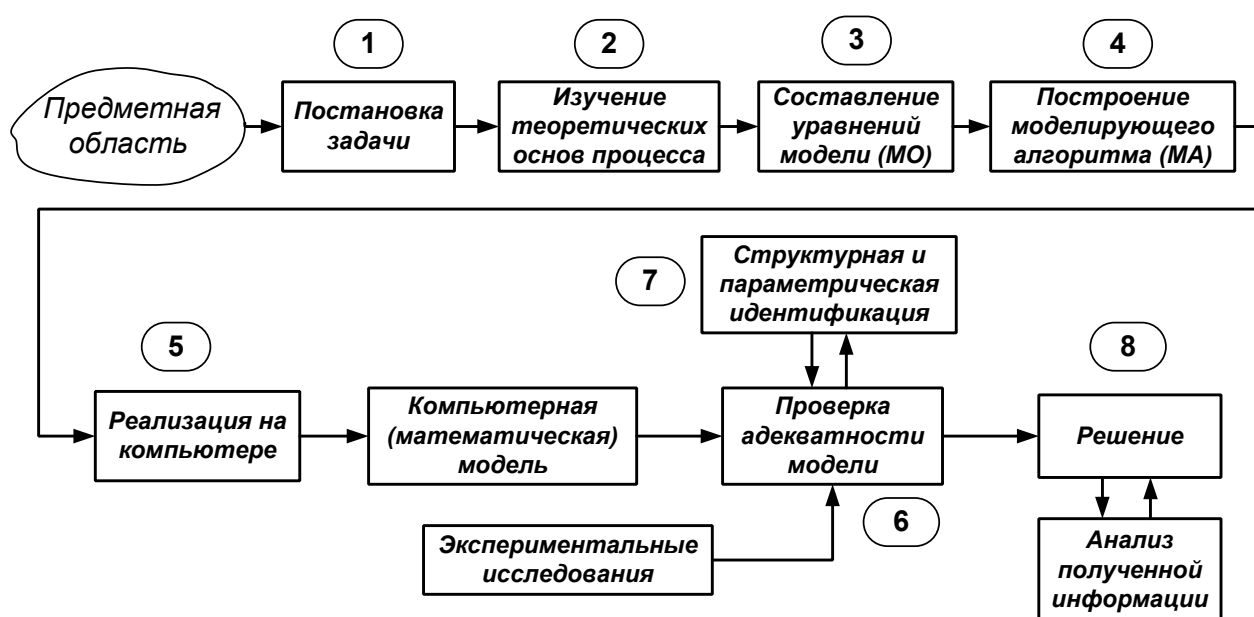


Рисунок 1 – Общая схема процесса математического моделирования

Первая стадия – это постановка задачи. Одному и тому же объекту-оригиналу в зависимости от целей моделирования может соответствовать большое число моделей, отражающих разные его

стороны. Эта стадия определяет не только цель анализа, но и пути решения задачи.

Вторая стадия – это определение фундаментальных законов, которым подчиняется механизм явлений, лежащих в основе рассматриваемой проблемы.

Третья стадия. На основе выбранной физической модели записывается система уравнений **математического описания** (МО).

Типами систем МО являются:

1. Конечные (системы линейных алгебраических и нелинейных уравнений).
2. Системы обыкновенных дифференциальных уравнений.
3. Системы дифференциальных уравнений в частных производных.

Четвертая стадия. Определяется **моделирующий алгоритм** решения системы уравнений (МА). В [1] для определения последовательности решения системы уравнений предлагается располагать их в логической последовательности с помощью построения блочной поточно-информационной диаграммы (схемы связей отдельных стадий технологического процесса). В [2] предлагается построить и проанализировать информационную матрицу системы уравнений.

Пятая стадия. Создается программа для реализации разработанного моделирующего алгоритма на ЭВМ (создание компьютерной модели).

Математическая Модель – это реализованный на компьютере алгоритм (МА) решения системы уравнений математического описания (МО).

Шестая стадия – это проверка адекватности модели.

Адекватность – соответствие математической модели реальному объекту и качественное (тенденции изменения переменных в модели и в объекте одинаковы) и количественное (экспериментальные данные).

$$\|\bar{y}^{раст} - \bar{y}^{эксн}\| = \sqrt{\sum (\bar{y}^{раст} - \bar{y}^{эксн})^2} = \varepsilon$$

где ε – не меньше погрешности экспериментальных измерений.

Седьмая стадия – идентификация. Если адекватность не достигнута, то нужно решить задачу идентификации:

$$\min \|\bar{y}^{раст} - \bar{y}^{эксн}\|.$$

На этом этапе для обеспечения качественного и количественного соответствия поведения модели и объекта (адекватности модели) параметры модели корректируют на основании экспериментальных данных. При этом корректируются как коэффициенты (параметры) уравнений математического описания, т.н. параметрическая идентификация, так и сам вид уравнений, учитывающий механизмы протекающих процессов, т.н. структурная идентификация.

Восьмая стадия – изучение и подтверждение результатов, полученных при решении математической модели.

Проводятся расчетные исследования модели, адекватной реальному процессу, ставятся различного рода **вычислительные эксперименты на компьютере**, позволяющие более глубоко понять закономерности протекания исследуемого процесса. Результатами исследований являются статические и динамические характеристики процессов, часто представляемые в виде графиков, анализ которых позволяет принимать решения по усовершенствованию и модернизации работы реальных производств.

Для построения модели необходимо соблюдать следующие простые правила:

- уравнений должно быть столько (не больше и не меньше), сколько имеется неизвестных величин, определяющих поведение физической системы;
- любое уравнение может быть решено относительно какой-то неизвестной величины в том случае, когда остальные входящие в него неизвестные величины получены из других уравнений;

- каждое уравнение решается относительно наиболее значимой из входящих в него переменных; при ее выборе надо руководствоваться физическими аспектами задачи.

Вопросы для контроля

1. Какие этапы включает в себя моделирование как метод исследования технологических процессов?

2. Какие типы систем уравнений входят в математическое описание технологического объекта?

3. Как определяется моделирующий алгоритм решения системы уравнений?

4. Дайте определение математической модели технологического объекта.

5. Что такое адекватность математической модели?

Практическое занятие 3

Тема «АДЕКВАТНОСТЬ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ»

3.1 Критерии адекватности моделей

Математическая модель объекта является лишь его аналогом. Поэтому значения переменных, получаемых на модели и объекте, различаются. Здесь возникает задача установления близости модели реальному объекту (установления адекватности модели). Критерии адекватности модели (**R**) базируется в основном на методах дисперсионного анализа и анализа остатков.

Разность между экспериментальными данными ($y_i^э$) и рассчитанными по модели ($y_i^м$) называются остатками:

$$e_i^м = y_i^э - y_i^м \quad (3.1)$$

Очевидно, что если испытывается модель истина, то остатки сравнимы с величинами $e_i^э$, характеризующими ошибку изменений. Поэтому общая мера несоответствия модели результатам эксперимента $SS_м$ представляется в виде:

$$SS_м = \sum_{i=1}^n (y_i^э - y_i^м)^2 \quad (3.2)$$

В статистике эта величина называется **остаточной суммой квадратов**.

Если при проведении экспериментальных исследований проводятся параллельные опыты (т.е. повторные измерения в одинаковых условиях), то информацию об ошибках измерения содержится в:

$$SS_э = \sum_{j=1}^N (y_j^э - \bar{y})^2 \quad , \text{ где } \bar{y} = \frac{1}{N} \cdot \sum_{j=1}^N y_j \quad (3.3)$$

Тогда величина SS , определяет меру способности модели отражать результаты эксперимента.

$$SS_{ad} = \sum_{i=1}^n (y_i^j - y_i^m)^2 - \sum_{j=1}^N (y_j^j - \bar{y})^2 \quad (3.4)$$

Сумма квадратов SS_{ad} характеризует **степень адекватности модели**, так как чем меньше SS_{ad} , тем лучше модель воспроизводит эксперимент.

Суммы квадратов, будучи поделенными на соответствующие числа степеней свободы, определяют соответствующие **дисперсии**. Очевидно, что адекватность модели может определяться отношением *дисперсии адекватности* к *дисперсии воспроизводимости*. Если это отношение велико ($\gg 1$), то испытываемая модель не отражает результаты эксперимента.

3.2 Оценка адекватности моделей с помощью критерия Фишера (F)

Для этого находят отношение:

$$F = \frac{S_{ad}^2}{S_{воспр}^2} \quad (3.5)$$

где S_{ad}^2 , $S_{воспр}^2$ – соответственно дисперсия адекватности и дисперсия воспроизводимости, определяемые как

$$S_{ad}^2 = \frac{SS_m}{f_{ad}}, \quad S_{воспр}^2 = \frac{SS_j}{f_{воспр}} \quad (3.6)$$

Число степеней свободы зависит от того, каким образом определялась воспроизводимость опытов.

Если дисперсия воспроизводимости определялась в отдельной серии опытов, то

$$f_{ad} = n - p_j, \quad \text{а} \quad f_{воспр} = \tilde{n} - 1, \quad (3.7)$$

где p_i – число устанавливаемых параметров i -ой модели;
 \tilde{n} – число повторных опытов;

n – общее число опытов.

Если дисперсия воспроизводимости определялась в каждом из q различных условий, при которых проводилось \tilde{n} повторных опытов, то

$$f_{ад} = n - p_j - q(\tilde{n} - 1), \quad \text{а} \quad f_{воспр} = q(\tilde{n} - 1). \quad (3.8)$$

Основная гипотеза, которая при этом проверяется, состоит в следующем: можно ли считать сравниваемые выборочные дисперсии оценками одной и той же генеральной дисперсии.

Если да, то дисперсии незначительно отличаются друг от друга и модель **адекватна объекту** в пределах точности эксперимента. В противном случае модель **неадекватна объекту**.

В качестве критерия отличия дисперсий используется критерий Фишера (F -критерий). Значения F -распределения для различных степеней свободы $f_{ад}$ и $f_{воспр}$ приведены в литературе по статистике.

Если рассчитанное по (5) значение $F < F_{табл}(f_{ад}, f_{воспр})$ для уровня значимости p , то гипотеза верна, т.е. **модель адекватна объекту**.

3.3 Оценка модели относительно среднего значения

При отсутствии параллельных опытов и дисперсии воспроизводимости (SS , неизвестно) качество модели можно оценить, сравнив $S_{ад}^2$ и дисперсию относительно среднего $S_{ср}^2$.

$$S_{ср}^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}{n - 1}, \quad \text{где} \quad \bar{y} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i. \quad (3.9)$$

Для этого используют критерий Фишера и составляют отношение

$$F_p = \frac{S_{ад}^2}{S_{воспр}^2}. \quad (3.10)$$

Затем его сравнивают с табличным значением $F_{1-p}^{табл} (f_{cp}, f_{ad})$ для заданного уровня значимости p .

Если $F_p < F_{1-p}^{табл} (f_{cp}, f_{ad})$,

то гипотеза о том, что дисперсии S_{cp}^2 и S_{ad}^2 принадлежат одной и той же генеральной совокупности, **верна**. Тогда использовать модель **нецелесообразно**, так как она обладает одинаковой прогнозирующей способностью со средним значением.

Если $F_p > F_{1-p}^{табл} (f_{cp}, f_{ad})$,

то дисперсии S_{cp}^2 и S_{ad}^2 значительно отличаются друг от друга, причем $S_{cp}^2 > S_{ad}^2$. Использование проверяемой модели **является целесообразным**.

Рассмотренная проверка часто называется проверкой целесообразности использования модели.

Пример. Исследовалась гидродинамика потока жидкости на тарелке ректификационной колонны. Вводили трассер и измеряли отклик на выходе из тарелки. Для описания движения потока жидкости была принята ячеечная модель, содержащая один параметр – число ячеек. Из экспериментальных данных было установлено, что число ячеек равно 6. Требуется установить адекватность ячеечной модели эксперименту.

Результаты эксперимента и расчета по модели приведены в табл. 3.1.

Таблица 3.1 – Результаты эксперимента и расчета по модели

τ , мин	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
C^o , г/л	3	30	135	253	266	210	135	77	43	26
C^m , г/л	4,9	54	143	210	223	194	145	99	62	36
τ , мин	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
C^o , г/л	17	12	9	7	5	3	2	1,5	1	0

C^m , г/л	20	11	6	3	1,4	0,7	0,3	0,2	0,1	0,03
-------------	----	----	---	---	-----	-----	-----	-----	-----	------

Для оценки дисперсии воспроизводимости была поставлена отдельная серия опытов (табл. 3.2).

Таблица 3.2 – Серия опытов при постоянных условиях

Номер опыта	1	2	3	4	5	6
C_3 , г/л	25	18	22	29	35	23

Решение

Будем устанавливать адекватность, используя критерий Фишера. Составим F -отношение

$$F = \frac{S_{ад}^2}{S_{воспр}^2} \quad (3.11)$$

Найдем значение $S_{ад}^2$ и $S_{воспр}^2$:

$$S_{ад}^2 = \frac{\sum_{i=1}^{20} (c_i^3 - \bar{c})^2}{n - p} = \frac{5701,3}{20 - 1} = 300,1 \quad (3.12)$$

$$S_{воспр}^2 = \frac{\sum_{i=1}^6 (c_i^3 - \bar{c})^2}{N - 1} = 35,6 \quad (3.13)$$

$$\bar{c} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^6 c_j^3 = 25,3$$

где ; $(n - p)$ и $(N - 1)$ – число степеней свободы соответственно дисперсии адекватности и дисперсии воспроизводимости.

$$F = \frac{S_{ад}^2}{S_{воспр}^2} = \frac{300,1}{35,6} = 8,4 \quad (3.14)$$

F -отношение равно

Соответствующее табличное значение критерия Фишера для чисел степеней свободы 19 и 5 и уровня значимости $\alpha = 0,01$ составляем $F_{0,01}^{табл}(19, 5) = 9,5$.

Таким образом, $F < F^{табл}$

и ячеечная модель адекватна эксперименту.

Оценим целесообразность использования ячеечной модели для описания движения потока жидкости на ректификационной тарелке, сравнив дисперсию относительно среднего S_{cp}^2 и дисперсию адекватности $S_{ад}^2$.

Для этого составим F -отношение в виде

$$F = \frac{S_{cp}^2}{S_{ад}^2}, \text{ где } S_{cp}^2 = \frac{\sum_{i=1}^{20} (c_i^j - \bar{c})^2}{n-1} = 7837,5 \quad (3.15)$$

а \bar{c} определяется как средняя концентрация по всем 20 опытам, т.е.

$$\bar{c} = \frac{1}{20} \sum_{j=1}^{20} c_j^j = 60,8 \quad (3.16)$$

Найдем величину F -отношения

$$F = \frac{7837,5}{300,1} = 26,1 \quad (3.17)$$

Соответствующее табличное значение критерия Фишера для чисел степеней свободы 19 и 19 составляем $F_{0,01}^{табл}(19, 19) = 3,0$.

Так как $F > F^{табл}$, (3.18)

то ячеечную модель использовать целесообразно.

Вопросы для контроля

1. Дайте понятие адекватности математической модели
2. Как представляется общая мера несоответствия модели результатам эксперимента?

3. Каким образом рассчитывается дисперсия воспроизводимости?

4. Как оценивается адекватность моделей с помощью критерия Фишера?

5. Как оценивается целесообразность использования модели при отсутствии параллельных опытов?

Практическое занятие 4

Тема «МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ОПИСАНИЯ ТИПОВЫХ МОДЕЛЕЙ ГИДРОДИНАМИКИ»

4.1 Математическая модель аппарата идеального смешения (ИС)

Аппарат ИС представляется как аппарат с мешалкой, через который непрерывно проходит поток жидкости. Мощность мешалки такова, что поступающая жидкость мгновенно перемешивается с массой в аппарате, чем обеспечивается равенство параметров процесса (концентраций, температуры и т. д.) по всему объему аппарата и на выходе из него (рисунок 4.1).

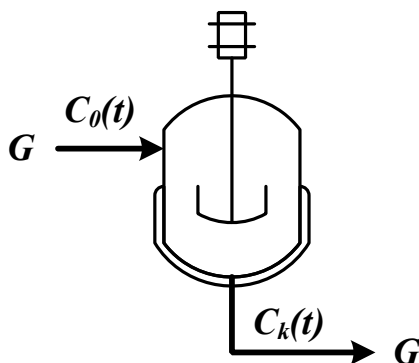


Рисунок 4.1 – Схема аппарата идеального смешения

Здесь G – объемный расход реакционной массы, $\text{м}^3/\text{ч}$; $C_0(t)$, $C_k(t)$ – входная и выходная концентрации, $\text{моль}/\text{м}^3$ или $\text{г}/\text{м}^3$; V – объем реактора, м^3 .

Время пребывания частиц в аппарате ИС неодинаково, так как мешалка может направить сразу к выходу некоторые частицы, другие же могут циркулировать в аппарате.

Уравнение материального баланса:

$$\frac{d(C_k(t)V)}{dt} = GC_0(t) - GC_k(t) \quad (4.1)$$

Начальные условия: $t=0$; $C_k(t) = C_0(t)$.

Для постоянного объема реактора ($V=\text{const}$) имеем:

$$V \frac{dC_k(t)}{dt} = G(C_0(t) - C_k(t)) \quad (4.2)$$

или

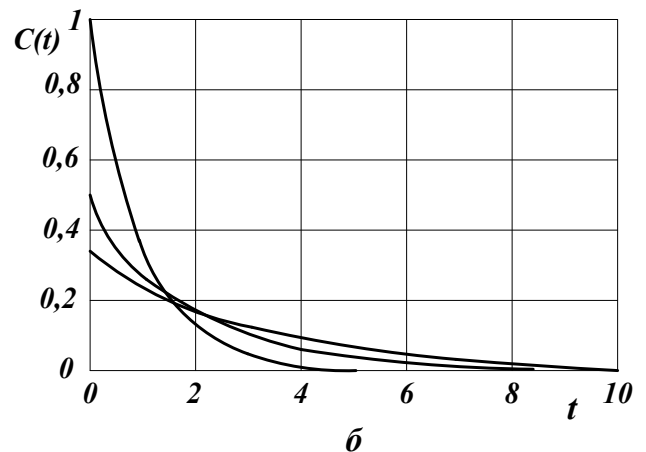
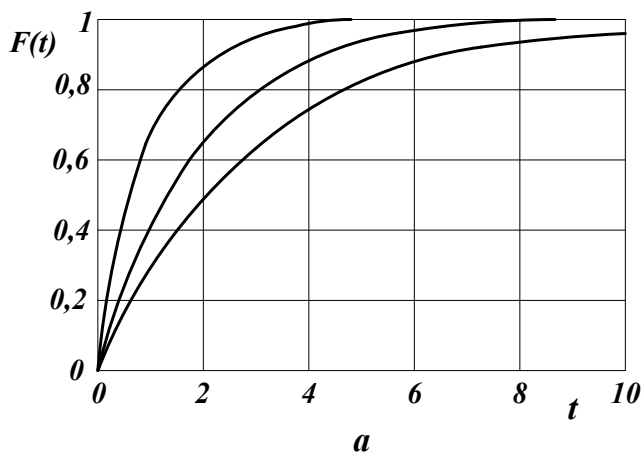
$$\frac{dC_k(t)}{dt} = \frac{1}{\bar{\tau}} (C_0(t) - C_k(t)) \quad (4.3)$$

Здесь $\bar{\tau} = \frac{V}{G}$ – среднее время пребывания частиц в аппарате идеального смешения. t – текущее время.

Кривая разгона реактора ИС или F-кривая (рисунок 4.2):

$$F(t) = C_k(t) = C_0(t) \left(1 - \exp\left(\frac{-t}{\bar{\tau}}\right) \right) \quad (4.4)$$

Здесь $C_0(t)$ – ступенчатое воздействие на входе в реактор; $C_k(t)$, $F(t)$ – концентрация на выходе из реактора.



a – F-кривые; b – С-кривые.

Рисунок 4.2 – Характеристики модели аппарата ИС

Более удобно для анализа и сравнения кривую разгона представлять в нормированном виде:

$$F_H(t) = \frac{C_k(t)}{C_0(t)} = 1 - \exp(-\theta) \quad (4.5)$$

где $\theta = \frac{t}{\bar{\tau}}$ – нормированное время.

Импульсная характеристика реактора ИС (С-кривая):

$$C(t) = C_k(t) = \frac{C_0(t)}{\bar{\tau}} \exp\left(-\frac{t}{\bar{\tau}}\right); \quad C_H(t) = \frac{C_k(t)}{C_0(t)} = \exp(-\theta) \quad (4.6)$$

4.2 Математическая модель аппарата идеального вытеснения (ИВ)

В аппарате ИВ принимается поршневое течение жидкости вдоль потока при равномерном распределении вещества в направлении перпендикулярном движению.

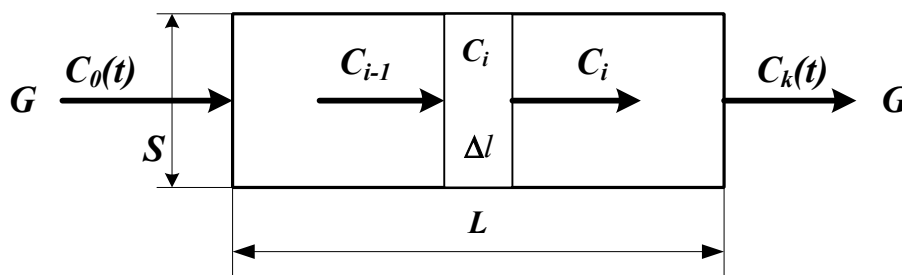


Рисунок 4.3 – Схема аппарата идеального вытеснения

Исходя из этого, все частицы в аппарате ИВ имеют одинаковую скорость, одинаковое время пребывания; концентрация вещества изменяется вдоль потока (рисунок 4.3).

Здесь:

L – предельное значение координаты, м;

V – объем аппарата, м³;

G – объемный расход жидкости через аппарат, м³/ч;

S – сечение аппарата, м²;

C_{i-1}, C_i, C_{i+1} – концентрация трассера в $i-1, i, i+1$ сечениях аппарата.

Уравнение материального баланса аппарата ИВ:

$$\frac{\partial C(t,l)}{\partial t} = -u \frac{\partial C(t,l)}{\partial l} \quad (4.7)$$

где $C(t,l)$ – концентрация вещества, изменяющаяся по координате аппарата вдоль потока l и времени t ;

u – линейная скорость потока $u = \frac{G}{S}$.

Начальные условия: $t = 0; l \geq 0; C(l,0) = C_s(l)$.

Граничные условия: $l = 0; t \geq 0; C(0,t) = C_0(t)$.

Уравнения материального баланса аппарата ИВ могут быть записаны через время пребывания частиц в аппарате – τ_e (основной параметр модели):

$$\frac{\partial C(t,x)}{\partial t} = -\frac{1}{\tau_e} \frac{\partial C(t,x)}{\partial x} \quad (4.8)$$

где τ_e – время пребывания частиц в аппарате $\tau_e = \frac{V}{G} = \frac{SL}{G}$;

x – величина безразмерной координаты вдоль потока $x = \frac{l}{L}$;

$C_s(l)$ – значение концентрации по длине аппарата в начальный момент времени.

Для удобства математического описания используют безразмерное время, $\theta = t / \tau$.

Уравнение материального баланса имеет вид:

$$\frac{\partial C(\theta, x)}{\partial \theta} = - \frac{\partial C(\theta, x)}{\partial x} \quad (4.9)$$

Начальные и граничные условия:

$$x = 0; \theta \geq 0; C(x, 0) = C_0(\theta);$$

$$\theta = 0; x \geq 0; C(0, \theta) = C_0(x).$$

Для получения решений уравнений материального баланса задаются начальные и граничные условия, т.е. изменения концентраций по координате и времени.

2. Кривая разгона реактора ИВ (F-кривая) (рисунок 4.4):

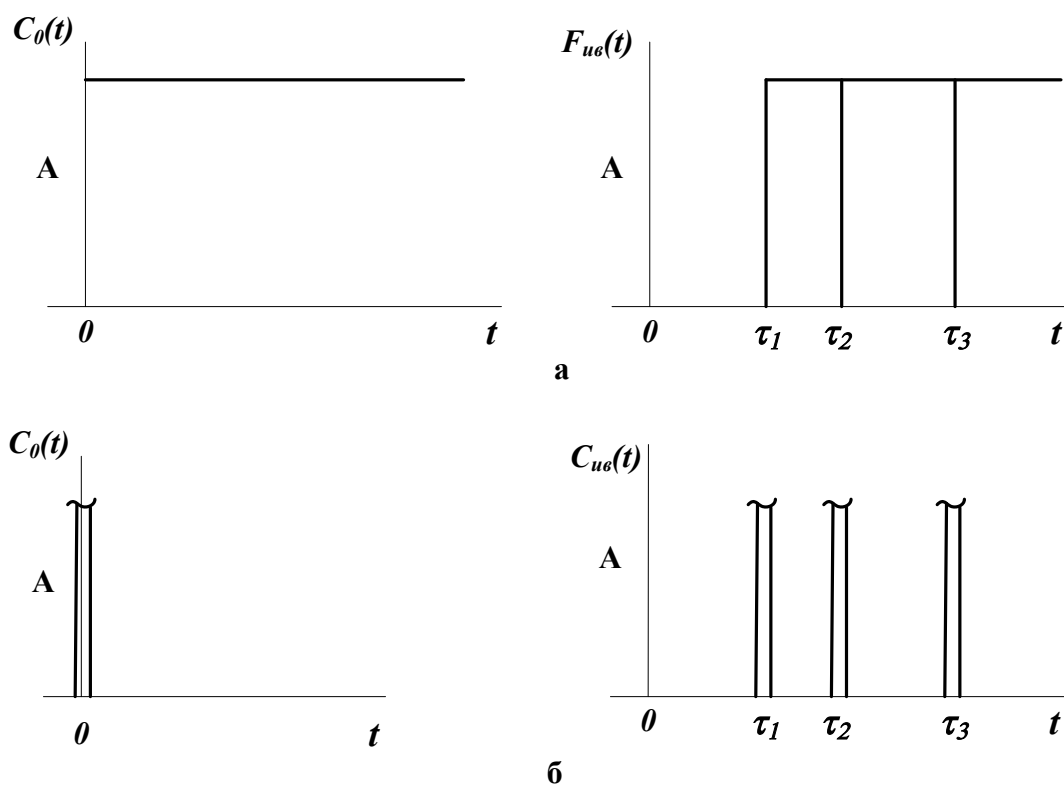
$$F_{ув}(t) = C_k(t) = C_0(t - \tau_v) \quad (4.10)$$

Уравнение кривой разгона представляет ступенчатую функцию с запаздывающим аргументом.

Импульсная характеристика (С-кривая) (рисунок 4.4):

$$C_{ув}(t) = \delta(t - \tau_v) \quad (4.11)$$

Уравнение импульсной характеристики представляет собой дельта-функцию с запаздывающим аргументом.



а – F-кривые; б – С-кривые, где τ_1, τ_2, τ_3 – время запаздывания

Рисунок 4.4 – Характеристики модели аппарата ИВ

4.3 Ячеечная модель (ЯМ)

Ячеечная модель описывает промежуточные состояния структуры гидродинамики потоков в реальных аппаратах между моделями аппаратов ИС и ИВ. ЯМ схематически представляет реальный аппарат, как некоторую последовательность n одинаковых ячеек ИС (рисунок 4.5). Гидродинамическая ячейечная модель содержит два параметра n – число ячеек; $\bar{\tau}$ – среднее время пребывания. Подбор этих параметров позволяет решать задачи параметрического синтеза (подстройки) гидродинамических моделей реальных аппаратов. Изменением n от 0 до ∞ можно описать все промежуточные состояния гидродинамики потоков между моделью ИС и ИВ.

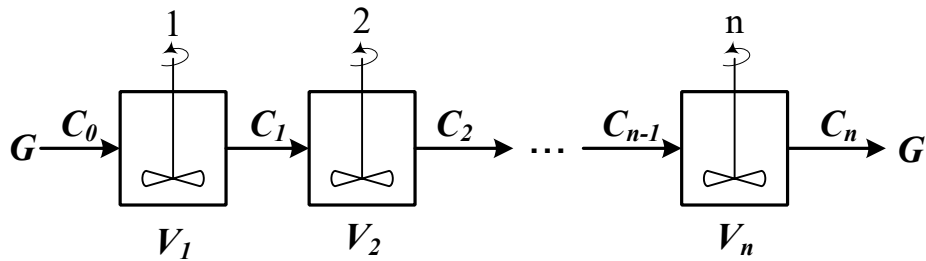


Рисунок 4.5 – Схема аппарата, описываемого ячеечной моделью
Уравнение материального баланса ЯМ:

$$\frac{dV_i C_i(t)}{dt} = GC_{i-1}(t) - GC_i(t), i = 1, 2, \dots, n. \quad (4.12)$$

Начальные условия: $t = 0, C_i(0) = C_0(t),$

где i – номер ячейки ЯМ;

V_i – объем i -й ячейки, м^3 ;

V – рабочий объем аппарата, м^3 ;

G – объемный расход жидкости, $\text{м}^3/\text{ч}$.

Уравнения материального баланса ЯМ могут быть записаны через время пребывания

$$\bar{\tau}_i \frac{dC_i(t)}{dt} = C_{i-1}(t) - C_i(t), i = 1, 2, \dots, n \quad (4.13)$$

где $\bar{\tau}_i$ – среднее время пребывания в i -й ячейке; $\bar{\tau}_A$ – среднее время

пребывания в аппарате $\bar{\tau}_A = \frac{V}{G}.$

2. Кривая разгона ЯМ (F-кривая). Кривые разгона ЯМ могут быть получены решением системы уравнений (4.12) при задании начальных условий по концентрации в виде ступенчатой функции.

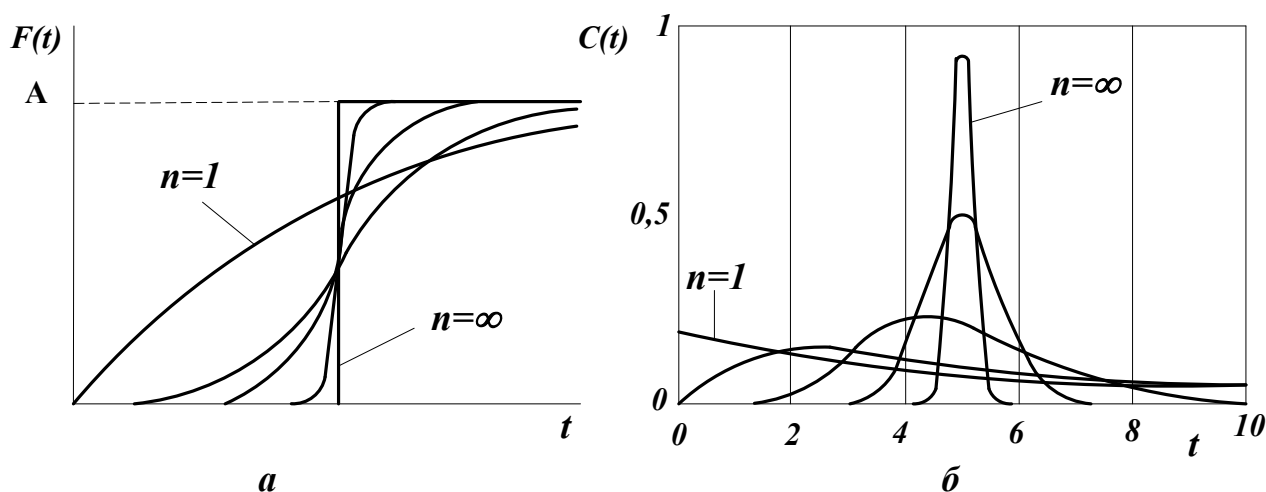
Примеры F-кривых для заданного $\bar{\tau}_A$ при различных n показаны на рисунке 4.6а.

3. Импульсная характеристика ЯМ (С-кривая). Для импульсной характеристики ЯМ имеется аналитическое решение уравнения:

$$C_{\text{ям}}(\theta) = C_H(\theta) = \frac{C_k(\theta)}{C_0(\theta)} = \frac{n^{\theta n - 1}}{(n-1)!} \exp(-n\theta), \quad (4.14)$$

$$C_{\text{ям}}(t) = C_{\text{ям}}(\theta)C_0(t) / \bar{\tau}_A.$$

Примеры С-кривых ЯМ для различных значениях n представлены на рисунке 4.6б.



а – F-кривые; б – С-кривые.

Рисунок 4.6 – Характеристики ЯМ

4.4 Однопараметрическая диффузионная модель (ОДМ)

ОДМ относится к типовым моделям гидродинамики потоков реальных аппаратов. ОДМ также описывает промежуточные состояния структуры гидродинамики между моделями ИС и ИВ.

Основой ОДМ является модель ИВ, осложненная обратным перемешиванием, следующим формальному закону диффузии (рисунок 3.13). Обратное перемешивание в реальных аппаратах может быть вызвано молекулярной диффузией, турбулентными пульсациями, пристеночными эффектами в ламинарном потоке, конвективным перемешиванием.

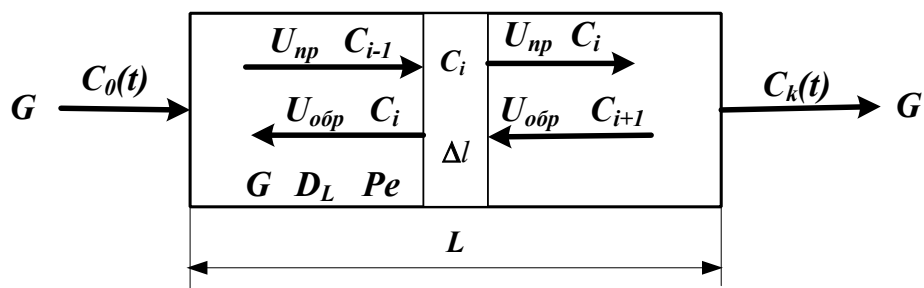


Рисунок 4.7 – Схема аппарата, имеющего однопараметрическую диффузионную модель

Здесь:

L – предельное значение координаты, м;

V – объем аппарата, м³;

G – объемный расход жидкости через аппарат, м³/ч;

S – сечение аппарата, м²;

C_{i-1}, C_i, C_{i+1} – концентрация трассера в $i-1, i, i+1$ сечениях аппарата.

$U_{np}, U_{обр}, U$ – прямая, обратная и средняя скорость потока, м/ч;

$$U = U_{np} - U_{обр}.$$

Для описания совокупного влияния этих факторов, выражающееся в отставании одних частиц от других, в ОДМ используется коэффициент продольной диффузии D_L или критерий Пекле Pe . При получении ОДМ принимается, что концентрация вещества непрерывно изменяется вдоль координаты и постоянна в сечении аппарата.

$$Pe = \frac{LU}{D_L} \quad D_L = \lim_{\Delta l \rightarrow 0} U_{обр} \Delta l \quad (4.15)$$

1. Уравнение материального баланса ОДМ.

Уравнение ОДМ с учетом коэффициента продольной диффузии имеет вид:

$$\frac{\partial C(t,l)}{\partial t} = -U \frac{\partial C(t,l)}{\partial l} + D_L \frac{\partial^2 C(t,l)}{\partial l^2}. \quad (4.16)$$

Граничные условия:

$$l = 0; t \geq 0; \frac{D_L}{U} \frac{\partial C(t,l)}{\partial l} = C(t,l) - C_0(t),$$

$$l = L; t \geq 0; \frac{dC(t,l)}{dl} = 0.$$

Начальные условия:

$$t = 0; l \geq 0,$$

$$C(t,l) = C_S(l).$$

Уравнения ОДМ с учетом критерия Пекле и среднего времени пребывания:

$$\bar{\tau} \frac{\partial C(t,l)}{\partial t} = -L \frac{\partial C(t,l)}{\partial l} + \frac{D_L L}{U} \frac{\partial^2 C(t,l)}{\partial l^2}, \quad (4.17)$$

$$Pe = \frac{UL}{D_L}$$

или с учетом того, что

$$\bar{\tau} \frac{\partial C(t,l)}{\partial t} = -L \frac{\partial C(t,l)}{\partial l} + \frac{L^2}{Pe} \frac{\partial^2 C}{\partial l^2}. \quad (4.18)$$

Уравнение ОДМ может быть записано в безразмерных координатах

$$\frac{\partial C(\theta, x)}{\partial \theta} = - \frac{\partial C(\theta, x)}{\partial x} + \frac{1}{Pe} \frac{\partial^2 C(\theta, x)}{\partial x^2}. \quad (4.19)$$

Граничные условия:

$$x = 0; \theta \geq 0; \frac{1}{Pe} \frac{dC(\theta, x)}{dx} = C(\theta, x) - C_0(\theta),$$

$$x = 1; \theta \geq 0; \frac{dC(\theta, x)}{dx} = 0.$$

Начальные условия:

$$\theta = 0; C(0, x) = C_S(x).$$

ОДМ является также как и ЯМ промежуточной моделью между моделями ИС и ИВ: при $Pe \rightarrow \infty$ или $D_L \rightarrow 0$ ОДМ переходит в модель ИВ; при $Pe \rightarrow 0$ или $D_L \rightarrow \infty$ – модель ИС. Для реальных аппаратов зачастую можно принять модель ИВ при $Pe \geq 100$.

Критерий Pe для практических расчетов изменяется в диапазоне $0,01 \div 10^2$.

2. Пример кривых разгона ОДМ для различных значений Pe приведен на рисунке 4.8. F-кривые подтверждают, что ОДМ является промежуточной моделью.

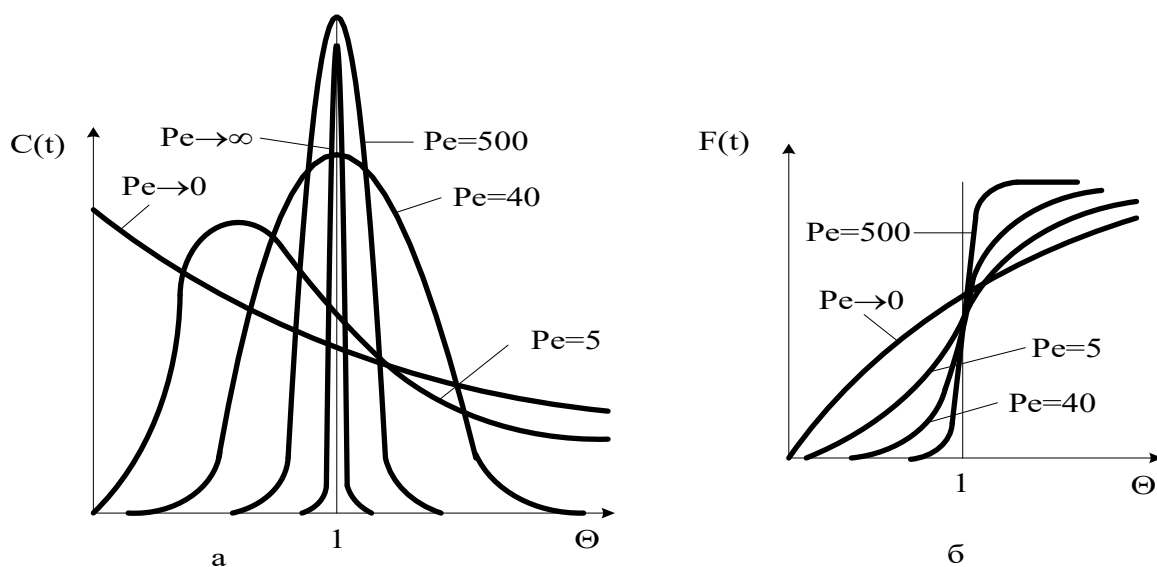
Пример импульсных характеристик ОДМ приведен на рис. 4.8. С-кривые также подтверждают промежуточный характер модели.

Для $Pe \geq 100$, т. е. для режимов близких к ИВ, получено аналитическое выражение импульсной характеристики

$$C_{одм}(\theta) = \frac{C_K(\theta)}{C_0(\theta)} = \frac{1}{2\sqrt{\pi\left(\frac{D_L}{UL}\right)}} \exp\left[-\frac{(1-\theta^2)^2}{4\frac{D_L}{UL}}\right], \quad (4.20)$$

или через Pe

$$C_{одм}(\theta) = \frac{C_K(\theta)}{C_0(\theta)} = \frac{1}{2\sqrt{\pi/Pe}} \exp\left[-\frac{(1-\theta)^2}{4/Pe}\right]. \quad (4.21)$$



а – С-кривые; б – F-кривые.

Рисунок 3.14 – Характеристики однопараметрической диффузионной модели

4.5 Вопросы для контроля

1. Приведите уравнение материального баланса реактора идеального смешения.
2. Как меняется время пребывания частиц в аппарате идеального смешения.
3. Приведите кривую разгона реактора ИС или F-кривую при ступенчатом воздействии на входе в реактор.
4. Приведите уравнение материального баланса реактора идеального вытеснения.
5. Приведите кривую разгона реактора ИВ или F-кривую при ступенчатом воздействии на входе в реактор.
6. Какое состояние структуры гидродинамики потоков описывает ячеечная модель?
7. Приведите кривую разгона реального реактора, описываемую ячеечной моделью, или F-кривую при ступенчатом воздействии на входе в реактор.

8. Что является основой однопараметрической диффузионной модели?

9. Приведите кривую разгона реального реактора, описываемую однопараметрической диффузионной моделью, или F-кривую при ступенчатом воздействии на входе в реактор.

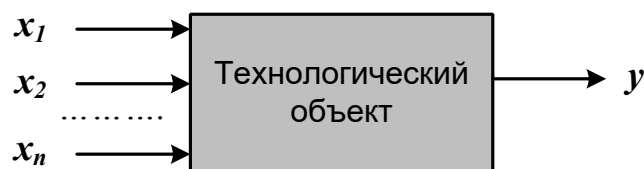
Практическое занятие 5

Тема «СОСТАВЛЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНО- СТАТИСТИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ»

8.1 Основные понятия и определения

В тех случаях, когда информации о рассматриваемом процессе недостаточно или процесс настолько сложен, что невозможно составить его детерминированную модель, прибегают к экспериментально-статистическим методам.

При этом процесс рассматривают как «черный ящик» (рис. 8.1).



x_1, x_2, \dots, x_n – факторы (независимые переменные);

y – функция отклика.

Рисунок 8.1 – Представление процесса, как «черного ящика»

Математической моделью является функция отклика, которую определяют по результатам экспериментов, в ходе которых меняют значения x_i и определяют y :

$$y = \varphi(x_1, x_2, \dots, x_n), \quad (5.1)$$

Различают пассивный и активный эксперимент.

Пассивный эксперимент – это поочередное варьирование каждой из переменных, а также сбор исходного статистического материала в режиме нормальной эксплуатации на промышленном объекте. Используются методы классического регрессионного и корреляционного анализа.

Активный эксперимент ставится по заранее составленному плану (планирование эксперимента) и предусматривает изменение всех параметров одновременно.

Для описания процесса наиболее часто используют уравнение регрессии второго порядка, которое для трех факторов запишется следующим образом:

$$y = \theta_0 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2 + \theta_3 x_3 + \theta_{12} x_1 x_2 + \theta_{13} x_1 x_3 + \theta_{23} x_2 x_3 + \theta_{11} x_1^2 + \theta_{22} x_2^2 + \theta_{33} x_3^2. \quad (5.2)$$

Коэффициент θ_0 называют свободным членом уравнения регрессии; коэффициенты θ_j – линейными эффектами; коэффициенты θ_{jj} – квадратичными эффектами; коэффициенты θ_{ij} – эффектами взаимодействия.

Коэффициенты уравнения (8.2) определяются методом наименьших квадратов из условия:

$$\Phi = \sum_{i=1}^N (y_i^y - y_i)^2 = \min \quad (5.3)$$

Здесь N – объем выборки. Разность между объемом выборки N и числом связей l , наложенных на эту выборку, называется числом степеней свободы выборки f :

$$f = N - 1.$$

При отыскании уравнения регрессии l равно числу определяемых коэффициентов.

Вид уравнения регрессии выбирается путем экспериментального подбора.

Пример

Определить зависимость растворимости тиосульфата натрия (y) от температуры (x). Объем выборки $N = 9$. Экспериментальные данные приведены в табл. 1.

Таблица 1 – Растворимость тиосульфата натрия при различных температурах

$x, ^\circ\text{C}$	0	10	20	30	40	50	60	70	80
$y, \%$	33,5	37,0	41,2	46,1	50,0	52,0	56,3	64,3	69,9

Решение

Растворимость тиосульфата натрия опишем линейным уравнением $y = b_0 + b_1 x_1$. Коэффициенты b_0 и b_1 определим соответственно по формулам (8.2) и (8.3):

$$b_1 = 0,44; \quad b_0 = 32,6.$$

Выборочный коэффициент корреляции:

$$r^* = 0,99.$$

Величина коэффициента корреляции очень близка к единице; следовательно, зависимость между x и y является практически линейной и имеет вид:

$$y = 32,6 + 0,44x.$$

После того, как уравнение регрессии найдено, необходимо провести статистический анализ результатов. Этот анализ состоит в следующем: проверяется значимость всех коэффициентов регрессии в сравнении с ошибкой воспроизводимости и устанавливается адекватность уравнения. Такое исследование называется регрессионным анализом.

При проведении регрессионного анализа примем следующие допущения:

Входной параметр x изменяется с пренебрежимо малой ошибкой.

Результаты наблюдений y_1, y_2, \dots, y_N над выходной величиной представляют собой независимые нормально распределенные случайные величины.

При проведении эксперимента с объемом выборки N при условии, что каждый опыт повторен m раз, выборочные дисперсии $S_1^2, S_2^2, \dots, S_N^2$ должны быть однородны.

При одинаковом числе параллельных опытов, проверка однородности дисперсий сводится к следующему:

Определяется среднее из результатов параллельных опытов

$$\bar{y}_i = \frac{\sum_{u=1}^m y_{iu}}{m}, \quad i=1, 2, \dots, N. \quad (5.4)$$

Определяются выборочные дисперсии

$$S_i^2 = \frac{\sum_{u=1}^m (y_{iu} - \bar{y}_i)^2}{m-1}, \quad i=1, 2, \dots, N. \quad (5.5)$$

Определяется сумма дисперсий

$$\sum_{i=1}^N S_i^2. \quad (5.6)$$

Составляется отношение

$$G_{max} = \frac{S_{max}^2}{\sum_{i=1}^N S_i^2}, \quad (5.7)$$

где S_{max}^2 – максимальное значение выборочной дисперсии.

Если дисперсии однородны, то

$$G_{max} < G_p(N, m-1), \quad (5.8)$$

где $G_p(N, m-1)$ – табулированное значение критерия Кохрена при уровне значимости p .

Если выборочные дисперсии однородны, рассчитывается дисперсия воспроизводимости

$$S_{воспр}^2 = \frac{\sum_{i=1}^N S_i^2}{N_f}. \quad (5.9)$$

Число степеней свободы f этой дисперсии равно

$$f = N(m-1).$$

Дисперсия воспроизводимости необходима для оценки значимости коэффициентов уравнения регрессии. Оценка значимости коэффициентов проводится по критерию Стьюдента

$$t_j = \frac{|b_i|}{S_{bj}},$$

где b_i – i -й коэффициент уравнения регрессии;

S_{bj} – среднее квадратичное отклонение i -го коэффициента.

Если t_j больше $t_p(f)$ для выбранного уровня значимости p и числа степеней свободы f , то коэффициент b_i значимо отличается от нуля и учитывается в уравнении регрессии.

Незначимые коэффициенты приравниваются к нулю и из уравнения регрессии исключаются.

Оставшиеся коэффициенты пересчитываются заново.

Адекватность уравнения проверяется по критерию Фишера

$$F = \frac{S_{ад}^2}{S_{воспр}^2}, \quad (5.10)$$

где $S_{воспр}^2$ – дисперсия воспроизводится; $S_{ад}^2$ – дисперсия адекватности

$$S_{ад}^2 = \frac{m \sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y}_i)^2}{N - e}. \quad (5.11)$$

Если

$$F < F_{таб}(f_1, f_2),$$

то уравнение адекватно.

При отсутствии параллельных опытов и дисперсии воспроизводимости качество аппроксимации можно оценить принятым уравнением, сравним $S_{осм}^2$ и дисперсию относительно среднего S_y^2

$$S_y^2 = \frac{\sum_{i=1}^N (y_i^2 - \bar{y})^2}{N - 1}; \quad S_{осм}^2 = \frac{\sum_{i=1}^N (y_i^2 - \bar{y}_i)^2}{N - e}. \quad (5.12)$$

По критерию Фишера

$$F = \frac{S_y^2}{S_{ост}^2} \quad (5.13)$$

В этом случае критерий Фишера показывает, во сколько раз уменьшается рассеяние относительно полученного уравнения регрессии по сравнению с рассеянием относительно среднего. Чем больше значение F превышает табличное $F_{таб}(f_1, f_2)$ для выбранного уровня значимости p и чисел степеней свободы $f_1 = N-1$ и $f_2 = N-e$, тем эффективнее уравнение регрессии.

Вопросы для контроля

- В каких случаях используют экспериментально-статистический метод составления математической модели?
- Чем отличается активный эксперимент от пассивного?
- Каким образом определяют вид уравнения регрессии?
- Как определяют коэффициенты уравнения регрессии?
- Какие коэффициенты уравнения считаются значимыми?
- Как проверяется адекватность уравнения регрессии с использованием дисперсии воспроизводимости и дисперсии адекватности?
- Каким образом можно оценить качество аппроксимации принятым уравнением при отсутствии параллельных опытов?

РЕКОМЕНДУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Белов, П. С. Математическое моделирование технологических процессов Электронный ресурс : Учебное пособие (конспект лекций) / П. С. Белов. - Егорьевск : Егорьевский технологический институт (филиал) Московского государственного технологического университета «СТАНКИН», 2016. - 121 с. - Книга находится в премиум-версии ЭБС IPR BOOKS. - ISBN 978-5-904330-02-6.

2. Бочкарев, В. В. Оптимизация химико-технологических процессов Электронный ресурс : Учебное пособие / В. В. Бочкарев. - Томск : Томский политехнический университет, 2014. - 264 с. - Книга находится в премиум-версии ЭБС IPR BOOKS. - ISBN 978-5-4387-0420-1.

3. Гартман, Т. Н. Основы компьютерного моделирования химико-технологических процессов : учеб. пособие / Т. Н. Гартман, Д. В. Клушин. – М. : Академкнига, 2008. – 416 с.: ил.

4. Кафаров В.В. Методы кибернетики в химии и химической технологии: 4-е изд., перераб., доп. Учебник для вузов. – М.: Химия, 1985. – 448 с.

5. Кафаров В.В., Глебов М.Б. Математическое моделирование основных процессов химических производств: Учеб. пособие для вузов. – М.: Высш. шк., 1991. – 400 с.

6. Справочник азотчика: Физико-химические свойства газов и жидкостей. Производство технологических газов. Синтез аммиака. – М.: Химия, 1986. – 512 с.

7. Структурно-параметрический синтез математических моделей гидродинамики: Учебн. пособие/ Чистякова Т.Б., Гольцева Л.В. – СПб.: Изд-во СПбГТИ(ТУ), 2002. – 48 с.

8. Френкс Р. Математическое моделирование химической технологии. – М.: Химия, 1971. – 273 с.

