

**Федеральное агентство по образованию
Государственное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Казанский государственный технологический
университет»**

А.В. Клинов, А.Г. Мухаметзянова

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ**

Учебное пособие

**Казань
2009**

УДК 66.011+51.74+519.2
ББК 35:22.1

Математическое моделирование химико-технологических процессов: учебное пособие / А.В. Клинов, А.Г. Мухаметзянова. – Казань: Изд-во Казан. гос. технол. ун-та, 2009. – 144 с.

ISBN 978-5-7882-0774-2

Изложена теория математического моделирования химико-технологических процессов, рассмотрены типовые математические модели, применяющиеся при описании химико-технологических процессов, этапы их построения. Подробно разбираются методы и модели для определения физико-химических свойств газовых и жидких смесей.

Предназначено для студентов четвертых курсов, обучающихся по специальности 240802 – «Основные процессы химических производств и химическая кибернетика», а также осваивающих другие инженерные специальности. Может использоваться аспирантами и преподавателями технических вузов, научными работниками.

Подготовлено на кафедре «Процессы и аппараты химической технологии».

Печатается по решению редакционно-издательского совета Казанского государственного технологического университета.

Рецензенты: д-р техн. наук, проф. А.Г. Лаптев
д-р техн. наук, проф. Р.И. Ибяттов

© Клинов А.В., Мухаметзянова А.Г., 2009

© Казанский государственный
технологический
университет, 2009

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение	5
1. Основные понятия и принципы моделирования	6
2. Эмпирический метод построения математических моделей	10
2.1. Формулирование цели, выбор факторов и переменных состояния объекта исследования, виды уравнений регрессии	12
2.2. Планирование и проведение экспериментов	16
2.3. Статистическая обработка результатов и поиск наилучшей формы аппроксимации полученных данных	18
3. Теоретический метод построения математических моделей	29
3.1. Теоретические основы	30
3.1.1. Законы сохранения	30
3.1.2. Законы термодинамики и термодинамического равновесия	34
3.1.3. Законы переноса и химической кинетики	51
3.2. Исчерпывающее описание процессов химической технологии и типовые модели структуры потока	55
3.2.1. Импульсный ввод индикатора для определения параметров типовых и комбинированных моделей структуры потоков	62
3.2.2. Моделирование теплообменных процессов	76
3.2.3. Моделирование массообменных процессов	84
3.2.4. Математические модели химических реакторов	99
3.2.5. Влияние структуры потоков на протекание химических реакций	102
3.2.6. Влияние переноса массы на протекание химической реакции и селективность	109
4. Методы и модели определения физико-химических свойств газовых и жидких смесей	115
4.1. Уравнения состояния	115
4.2. Расчет термодинамических свойств на основе избыточных функций	121
4.3. Молекулярно–статистические методы описания	126

макросвойств газов и жидкостей	
Заключение	142
Библиографический список	143