

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Локтионова Оксана Геннадьевна
Должность: проректор по учебной работе
Дата подписания: 20.02.2018 20:10:33
Уникальный программный ключ:
0b817ca911e6668abb13a5d426d39e5f1c11eabbf73e943df4a4851fda56d089

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреж-
дение высшего образования
«Юго-Западный государственный университет»
(ЮЗГУ)

Кафедра фундаментальной химии и химической технологии

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по учебной работе
О.Г. Локтионова
« 20 » 02 2018 г.



Основы моделирования химико-технологических процессов

Методические указания к практической и самостоятельной работе по дисциплинам «Моделирование химико-технологических процессов» и «Математические модели процессов и работа с ними» для студентов направлений 18.03.01 - Химическая технология

КУРСК 2018

УДК 004.94

Составители: С.Д. Пожидаева, А.М. Иванов

Рецензент

Кандидат химических наук, доцент *Н.А. Борщ*

Основы моделирования химико-технологических процессов: методические указания к практической и самостоятельной работе / Юго-Зап. гос. ун-т; сост.: С.Д. Пожидаева, А.М. Иванов. Курск, 2018. 28 с. 7 табл., 2 рис.

В методические указания включены работы для формирования у студентов представления о математических моделях химических взаимодействий и процессов различных уровней, а также о работе с такими моделями для решения научных и практических задач.

Методические указания к практической и самостоятельной работе по дисциплинам «Моделирование химико-технологических процессов» и «Математические модели процессов и работа с ними» для студентов направлений 18.03.01 - Химическая технология.

Методические указания соответствуют требованиям программы.

Текст печатается в авторской редакции

Подписано в печать *7.02.18*. Формат 64x18 1/16
Усл.печ.л. *14* Уч.-изд.л. *13* Тираж ~~100~~ экз. Заказ *614*. Бесплатно
Юго-Западный государственный университет.
305040, г. Курск, ул. 50 лет Октября, 94

СОДЕРЖАНИЕ

	стр
Введение	4
Практическая работа №1. Системы единиц	5
Практическая работа №2. Физические величины и единицы их измерения	7
Практическая работа №3. Практические аспекты физического моделирования	9
Практическая работа №4. Построение модели для математического моделирования	17
Задание для контрольной работы	23
Вопросы для самостоятельной работы	27
Библиографический список	28

Введение

Научной базой применения решений для всех этапов технологического процесса являются принципы и методы физического и математического моделирования. Моделирование, как метод научного исследования, появилось в связи с необходимостью решать такие задачи, которые по каким-либо причинам, например, в силу дороговизны, опасности или невозможности прямого эксперимента не могли быть решены непосредственно. Методы моделирования широко распространены на практике, когда речь идет о тиражировании производственных процессов и установок различной производительности, о замене одной среды на другую, сильно отличающуюся от первой по своим характеристикам и т.д. Цель моделирования в этом случае сводится к определению, может ли выбранная натура обеспечить требуемый результат протекания процесса и желаемый конечный результат или же нет. С другой стороны, модель может возникнуть в процессе соответствующей научной разработки (например, новой технологии), реализация которой в промышленности требует превращения модели в натуру, что также предполагает нахождение масштабных множителей методами теории подобия. Модельный эксперимент может быть направлен на определение работоспособности выбранной природы и предполагает получение результата о работоспособности модели и необходимости корректировки. Или же целью может быть получение функционального вида критериального уравнения (в виде степенной функции) и определение численных значений, входящих в уравнение коэффициентов, показателей степеней и границ применимости уравнения.

Физическое и математическое моделирование базируются на общих подходах, развиваемых на основе фундаментальных наук - математики, физики и химии.

В методических указаниях приводятся практические работы для закрепления теоретических знаний по дисциплинам «Основы моделирования» и «Математические модели процессов и работа с ними».

Практическая работа №1.

СИСТЕМЫ ЕДИНИЦ

Цель работы: познакомиться с системами единиц физических величин и пересчетами из одной в другую.

Система СГС. Система единиц физических величин СГС, в которой основными единицами являются сантиметр как единица длины, грамм как единица массы и секунда как единица времени, была установлена в 1881 г.

Система МКГСС. Применение килограмма как единицы веса, а в последующем как единицы силы вообще, привело в конце XIX века к формированию системы единиц физических величин с тремя основными единицами: метр - единица длины, килограмм-сила - единица силы и секунда - единица времени.

Система МКСА. Основы этой системы были предложены в 1901 г. итальянским ученым Джорджи. Основными единицами системы МКСА являются метр, килограмм, секунда и ампер.

1954 г. Генеральная конференция по мерам и весам установила шесть основных единиц (метр, килограмм, секунда, ампер, кельвин и свеча) практической системы единиц. Система, основанная на утвержденных в 1954 г. шести основных единицах, была названа Международной системой единиц, сокращенно СИ (SI - начальные буквы французского наименования *Systeme International*). Был утвержден перечень шести основных, двух дополнительных и первый список двадцати семи производных единиц, а также приставки для образования кратных и дольных единиц.

Основные единицы СИ с указанием сокращенных обозначений русскими и латинскими буквами приведены в таблице 1.

Таблица 1 – Физические величины и их обозначения

Величина	Единица измерения	обозначение единицы	
		русское	международное
Длина	метр	м	m
Масса	килограмм	кг	kg
Время	секунда	с	s
Сила электрического тока	ампер	А	A
Термодинамическая температура	кельвин	К	K
Сила света	кандела	кд	cd
Количество вещества	моль	моль	mol

Задание для самостоятельной работы

Используя соотношения между единицами (таблицы 2- 6), выполнить пересчет заданной преподавателем величины из одной системы в другую.

Таблица 2 –Пересчет «энергоучетных» физических величин. Энергия, тепло, работа

Единица измерения энергии	Эквивалентные единицы			
	кДж	ккал	кВт × ч	кГс × м
1 кДж	1	0,239	0,00278	102,0
1 ккал	4,19	1	0,00116	427
1 кВт × ч	3600	860	1	367200
1 кГс × м	0,00981	0,00234	$2,72 \times 10^{-6}$	1

Таблица 3 –Пересчет «энергоучетных» физических величин. Давление

	Па	бар	мм рт ст	мм вод ст	кгс/см ²	атм
1 Па	1	10^{-5}	$7,5 \cdot 10^{-3}$	0,102	$1,02 \cdot 10^{-5}$	$0,99 \cdot 10^{-5}$
1 бар	10^5	1	750,1	10200	1,02	0,987
1 мм рт ст	133	$13,33 \cdot 10^{-4}$	1	13,6	0,00136	0,001316
1 мм вод ст	9,81	$0,9806 \cdot 10^{-4}$	0,07355	1	0,0001	$9,68 \cdot 10^{-5}$
1 кгс/см ²	98100	0,9807	735,6	10 000	1	0,968
1 атм	101300	1,013	760	10330	1,033	1

Таблица 4 –Пересчет единиц длины

1 дюйм=	2,54 см	1 ярд=	0,9144 м	1 чейн=	20,117 м
1 мм=	0,03937 дюйма	1 дм=	0,3281 фута	1 метр=	1,094 ярда
1 фут=	0,3048 м	1 род=	5,0292 м	1 фурлонг=	201,17 м
1 см=	0,3937 дюйма	1 метр=	3,281 фута	1 декаметр=	10,94 ярда
1 миля=	1,6093 м	1 км=	0,6214 мили	1 морская миля=	1,8532 м

Таблица 5 –Пересчет единиц площади

1 дюйм ² =	6,4516 см ²	1 м ² =	1,550 дюйм ²	1 ар=	119,60 ярд ²
1 фут ² =	929,03 см ²	1 ярд ² =	0,8361 м ²	1 акр=	4046,9 м ²
1 гектар=	2,4711 акра	1 миля ² =	259,0 га	1 км ² =	0,3861 миля ²

Таблица 6 – Пересчет мер сыпучих тел и жидкостей

Британия		США	
1 пинта =	0,5506 л	1 пинта =	0,473 л
1 кварта =	1,136 л	1 кварта =	0,9463 л
1 галлон =	4,546 л	1 галлон =	3,785 л
1 пек =	9,092 л	1 пек =	8,809 л
1 бушель =	36,369 л	1 бушель =	35,24 л

Практическая работа №2

ФИЗИЧЕСКИЕ ВЕЛИЧИНЫ И ЕДИНИЦЫ ИХ ИЗМЕРЕНИЯ

Цель работы: ознакомление с терминами и методикой определения единиц измерения единиц некоторых параметров физических величин.

Размерность – производная от «размер», как и сама величина не зависит от выбора единиц измерения.

Формула размерности скорости равномерного движения:

$$\text{Dim } v = \text{LT}^{-1}.$$

Формула размерности ускорения:

$$\text{Dim } a = \text{LT}^{-2}.$$

Зная размерность ускорения, по определяющему уравнению силы $F=ma$, получаем $\text{Dim } F = \text{LMT}^{-2}$.

В формулах размерностей символы следуют в порядке: L, M, T, I, q, N, J.

Значение физической величины Q – оценка ее размера в виде некоторого числа, принятых для ее измерения единиц. Может быть выражено произведением числового значения величины (n) на выраженную для этой величины единицу [Q]:

$$Q = [Q] \cdot n.$$

Например, в формуле скорости равномерного движения $v = l/\tau$

$$\begin{aligned} v &= v_{\text{км/ч}} \cdot \text{км/ч} \\ l &= l_{\text{м}} \cdot \text{м} \\ \tau &= \tau_{\text{с}} \cdot \text{с} \\ v_{\text{км/ч}} \cdot \frac{\text{км}}{\text{ч}} &= \frac{l}{\tau} = \frac{l_{\text{м}} \cdot \text{м}}{\tau_{\text{с}} \cdot \text{с}} \\ v_{\text{км/ч}} &= \frac{l_{\text{м}} \cdot \text{м} \cdot \text{ч}}{\tau_{\text{с}} \cdot \text{с} \cdot \text{км}} \end{aligned}$$

Учитывая, что 1 ч = 3600 с, 1 км = 1000 м, получаем

$$v_{\text{км/ч}} = \frac{l_{\text{м}} \cdot \text{м} \cdot 3600 \text{ с}}{\tau_{\text{с}} \cdot \text{с} \cdot 1000 \text{ м}} = \frac{l_{\text{м}} \cdot 3,6}{\tau_{\text{с}}}$$

Если длину выразить в ярдах (1 ярд = 0,9144 м), время в секундах, скорость в миль/час (1 миля 852 м), то уравнение примет вид

$$v = v_{\frac{\text{миль}}{\text{ч}}} \cdot \frac{\text{миль}}{\text{час}}$$

$$l = l_{\text{ярд}} \cdot \text{ярд}$$

$$\tau = \tau_{\text{с}} \cdot \text{с}$$

$$\vartheta_{\frac{\text{миль}}{\text{ч}}} \cdot \frac{\text{миль}}{\text{час}} = \frac{l}{\tau} = \frac{l_{\text{ярд}} \cdot \text{ярд}}{\tau_{\text{с}} \cdot \text{с}}$$

$$\vartheta_{\frac{\text{миль}}{\text{ч}}} = \frac{l_{\text{ярд}} \cdot \text{ярд} \cdot \text{ч}}{\tau_{\text{с}} \cdot \text{с} \cdot \text{миль}} = \frac{l_{\text{ярд}} \cdot 0,9144 \text{ м} \cdot 3600 \text{ с}}{\tau_{\text{с}} \cdot \text{с} \cdot 852 \text{ м}} = \frac{l_{\text{ярд}} \cdot 3,86}{\tau_{\text{с}}}$$

Вид уравнений связи между числовыми значениями зависит от выбранных единиц

Пример выполнения задания

Определите плотность раствора ($\text{кг}/\text{м}^3$), если масса 1 дм^3 этого раствора равна 1115 г .

Решение. Формула, выражающая зависимость плотности от массы и объема

$$\rho = \frac{m_x}{V}$$

Размер плотности $\text{Dim } \rho = L M^{-3}$.

Значение величины плотности

$$\rho = \frac{1115 \cdot 10^{-3} \text{ кг}}{1 \cdot 10^{-3} \text{ м}^3} = 1115 \text{ кг}/\text{м}^3$$

Задание для самостоятельной работы

Для своего варианта, выданного преподавателем, определите значение физической величины и выведите для нее формулу размерности. Используйте расчетные формулы, отражающие физические законы.

Физические величины, имеющие специальные наименования, приведены в таблице 7.

Таблица 7 – Физические величины и единицы физических величин

Физическая величина		Единица физической величины	
наименование	размерность	наименование	обозначение
1	2	3	4
частота	T^{-1}	герц	Гц
сила, вес	$LM T^{-2}$	ньютон	Н
давление	$L^{-1} M T^{-2}$	паскаль	Па
механическое напряжение			
модуль упругости			
энергия	$L^2 M T^{-2}$	джоуль	Дж
работа			
количество теплоты	$L^2 M T^{-2}$	джоуль	Дж

Продолжение таблицы 7

1	2	3	4
мощность, поток энергии	L^2MT^{-3}	ватт	Вт
количество электричества	ТI	кулон	Кл
электрическое напряжение, электрический потенциал, разность электрических потенциалов, эдс	$L^2MT^{-3}I^{-2}$	вольт	В
электрическая емкость	$L^2M^{-1}T^4I^2$	фарад	Ф
электрическое сопротивление	$L^2MT^3I^{-2}$	ом	Ом
электрическая проводимость	$L^2M^{-1}T^3I^3$	сименс	См

Практическая работа №3

ПРАКТИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ФИЗИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Цель работы: 1. С помощью методов и приемов теории подобия и (или) анализа размерностей преобразовать исходные данные в обобщенное критериальное уравнение, выявив определяющие, определяемые и параметрические критерии.

2. Провести выбор и обоснование модели для проведения эксперимента (указать требующие экспериментального определения величины и провести расчет численных значений масштабных множителей).

3. Предложить план проведения эксперимента и методику обработки его результатов.

4. На конкретном примере обосновать, как использовать результаты физического моделирования на натуральных объектах.

Физическое моделирование – один из наиболее распространенных методов теоретико-экспериментального решения многих технологических задач, в частности, нахождения количественных описаний сложных гидромеханических, тепловых массообменных и химических процессов в конкретных, а именно в подобных условиях их протекания, а также изменения масштабов проведения процесса, что имеет важное значение при переходе от лабораторных исследований к промышленному производству.

Теоретической основой физического моделирования является теория подобия, позволяющая преобразовать известные сведения о лежащих в основе того или иного явления физических законах в критериальные уравнения, сформулировать цели и задачи необходимого модельного эксперимента, выбрать модель для эксперимен-

та, рассчитать масштабные множители перехода от модели к натуре и наоборот. В отдельных случаях ряд из этих вопросов может быть выполнен и с помощью теории анализа размерностей, в основе которой лежит π -теорема.

Необходимой предпосылкой возможности проведения физического моделирования является знание основных физических законов, лежащих в основе рассматриваемого явления и кинетического описания в виде одного или системы дифференциальных уравнений любой степени сложности. При этом не важно, можем ли мы имеющимися в нашем распоряжении методами и средствами эту систему решить или же нет.

Если нам по каким-либо причинам полное кинетическое описание процесса неизвестно, нужно достоверно знать, по крайней мере, все без исключения основные факторы, существенно влияющие на скорость его протекания. В этом случае общий вид критериального уравнения может быть получен методами теории анализа размерностей.

Сущность физического моделирования состоит в том, чтобы теоретически предсказать обобщенное критериальное уравнение процесса, экспериментально определить характер функциональной зависимости между критериями подобия, численные значения входящих в критериальное уравнение параметров (коэффициентов, показателей степеней и др.), границы применимости критериального уравнения и условия перехода от модели к натуре.

Основные этапы физического моделирования:

1. Общая постановка задачи на моделирование.

Основания:

а) всякое дифференциальное уравнение (система уравнений) описывает обширный класс явлений с одинаковым механизмом осуществления процесса;

б) присоединений к этим уравнениям дополнительных условий однозначности выделяет из всего класса какое-то единичное явление;

в) трудности аналитического исследования явления можно обойти применением экспериментального метода, выделяя в пределах класса некоторую группу явлений, на каждое из которых можно распространить результаты единичного опыта.

При этом следует помнить, что обобщение результатов единичного опыта возможно потому, что каждое единичное явление имеет какие-то общие для всего данного класса свойства. Выделяя при экспериментальном изучении данного частного явления такие общие свойства, мы получаем возможность увязать частные результаты с общими закономерностями. Для этого надо найти такую форму обработки результатов опыта, которая бы соответствовала основным уравнениям рассматриваемого процесса. Методы научного обобщения результатов единичного опыта излагаются в теории подобия, использующей сильные стороны обеих методов исследования – аналитического и экспериментального.

Никогда нельзя забывать, что распространять результаты единичного опыта на все явления класса невозможно.

2. Получение общего вида критериального уравнения путем:

а) преобразования дифференциального уравнения или системы дифференциальных уравнений методами и приемами теории подобия;

б) использования методов и приемов теории анализа размерностей.

3. Упрощение обобщенного критериального уравнения путем оценки и учета вклада каждого из критериев подобия в конкретных условиях осуществления рассматриваемого явления. Например, обобщенное критериальное уравнение гидродинамики

$$Eu = f(No, Pr, Re, l/d_э)$$

при установившемся режиме движения жидкости превращается в

$$Eu = f(Pr, Re, l/d_э)$$

путем исключения критерия гомохронности No и т.д.

4. Выбор и обоснование модели; установление величин, которые необходимо замерять во время проведения эксперимента и с которыми оперировать при обработке экспериментальных данных.

Требующие экспериментального определения величины вытекают из критериев подобия, соответствующих рассматриваемому случаю того или иного явления. Но для постановки эксперимента знания только требующих измерения величин недостаточно. Нужны вполне определенные соображения и о масштабе, в каком должна быть выполнена модель или натура. Для пересчета полученных результатов модельных испытаний на натуру (например, промышленную установку и т.д.) необходимы масштабные коэффициенты

(масштабные множители или просто масштабы), выбор которых не произволен. Числовые значения масштабных множителей находят, исходя из теории подобия, принимая во внимание, что индикаторы подобия обязаны быть равными единице. Так, например, если для какого-либо явления имеем $Ne = \frac{Fr}{mW} = idem$, то индикатор подобия $\frac{K_f K_\tau}{K_m K_W} = 1$, где $K_f = \frac{F'}{F''}$, $K_\tau = \frac{\tau'}{\tau''}$, $K_m = \frac{m'}{m''}$ и $K_W = \frac{W'}{W''}$.

Пример выполнения задания

1. Предполагается, что механическая мешалка должна перемешивать жидкость высокой вязкости с одновременным созданием вертикальных потоков. Требуется построить модель для изучения этого процесса при условии, что параметры натурной и моделирующей жидкости (т.е. плотности и вязкости) заданы.

Решение. Из гидродинамики известно, что процесс перемешивания жидкости механическими мешалками сводится к явлению обтекания тел потоками жидкости. Обобщенное критериальное уравнение для такого случая имеет вид

Расчет масштабных множителей $K_N = f(Re_M, Fr_M, \Gamma_1, \Gamma_2, \dots)$, где K_N – критерий мощности, представляющий собой специфическую модификацию критерия Эйлера

$$K_N = Eu_M = \frac{\Delta P}{\rho(n d^2)} = \frac{N}{\rho n^3 d^5}, \text{ где}$$

где N – полезная мощность, сообщаемая жидкости мешалкой. Величина N пропорциональна произведению усилия на валу P и окружной скорости, т.е. $N \sim P(nd)$.

Очевидно, что условиями подобия рассматриваемых моделей и природы будут

$$Fr = \frac{W^2}{gl} = idem \text{ и } Re = \frac{wl\rho}{\mu} = idem \text{ или}$$

$$\frac{K_W^2}{K_g \cdot K_l} = 1 \quad \frac{K_g \cdot K_l}{K_W^2} = 1 \text{ (а)} \quad \text{и} \quad \frac{K_W K_l K_\rho}{K_\mu} = 1 \text{ (б)}$$

Примем жидкости модели и природы разными. Поскольку мы их знаем (а, следовательно, знаем их плотности и вязкости), масштабы плотности $K_\rho = \frac{\rho_M}{\rho_H}$ и вязкости $K_\mu = \frac{\mu_M}{\mu_H}$ следует считать заданными по условию (индексы «м» и «н» относятся к модели и натуре). Таким образом, задача сводится к определению остальных

масштабов, а именно:

Масштаба линейных размеров K_l :

умножая квадрат выражения (б) на (а), получаем

$$\frac{K_W^2 K_l^2 K_\rho^2}{K_\mu^2} \cdot \frac{K_g \cdot K_l}{K_W^2} = 1,$$

откуда $K_l = \sqrt[3]{\frac{K_\mu^2}{K_g \cdot K_\rho^2}}$.

Масштаба скоростей K_W :

делением (а) на (б), получаем

$$\frac{K_g \cdot K_l}{K_W^2} \cdot \frac{K_W K_l K_\rho}{K_\mu} = \frac{K_g \cdot K_l}{K_W^2} \cdot \frac{K_\mu}{K_W K_l K_\rho} = 1,$$

откуда $K_W = \sqrt[3]{\frac{K_\mu \cdot K_g}{K_\rho}}$.

Масштаба времени K_τ :

$$K_\tau = \frac{K_l}{K_W} = \sqrt[3]{\frac{K_\mu}{K_\rho \cdot K_g^2}}$$

Масштаба усилий K_p :

поскольку усилие расходуется на преодоление давления, испытываемого лопатками мешалки, то условие подобия будет $Ne = idem$

или $\frac{K_p K_l}{K_m K_W^2} = 1$. Следовательно, $K_p = \frac{K_m K_W^2}{K_l} = K_\rho K_W^2 K_l^2$ (в), где

$K_m = K_\rho K_l^3$. Подставляя в уравнение (в) найденные ранее значения K_l и K_W , получаем

$$K_p = \frac{K_\mu^2}{K_\rho}.$$

Масштаб мощности K_N :

$$K_N = K_p \cdot K_W = \left(\frac{K_\mu^2}{K_\rho}\right) \cdot \left(\frac{K_\mu \cdot K_g}{K_\rho}\right)^{1/3}.$$

Вывод: чтобы модель и натура были подобны сразу по критериям Прандтля и Рейнольдса, следует выбрать масштабы для основных величин (длины, времени и силы) по полученным выше формулам. Моделирование должно производиться жидкостью, сильно отличающейся от природы (плотности и вязкости должны отличаться).

2. Необходимо раскрыть функциональную зависимость типа $Eu = f(Re, \Gamma)$, если опытным путем определяется потеря давления в

трубопроводе между двумя его сечениями. В первой серии опытов примем, что сечения одни и те же, т.е. $\Gamma = \text{const}$. Допустим, что физические свойства сред (плотность ρ и вязкость μ) неизменны во всем объеме рассматриваемой системы, т.е. не являются функциями геометрического положения выделенного элементарного объема. Но сами жидкости, например, капельные (вода, масло, керосин, уайт-спирит, ацетон и др.), можно варьировать по усмотрению исследователя. Произвольно можно варьировать и скорости движения жидкостей в одном из указанных сечений трубопровода. Проведя ряд серий экспериментов, можно получить следующие зависимости (в явном или неявном виде)

$$\begin{aligned} \text{А. } \Delta P &= f(\text{природа жидкости}) \text{ при } W_1 = \text{const} \\ & \quad W_2 = \text{const} \\ & \quad \dots \\ & \quad W_n = \text{const}. \end{aligned}$$

На базе этих зависимостей можно найти:

1) $\Delta P = f(\mu)$, т.е. жидкости подобраны с практически одинаковой плотностью, но разной вязкостью;

2) $\Delta P = f(\rho)$, т.е. жидкости подобраны с практически одинаковой вязкостью, но разной плотностью и т.д.;

Б. $\Delta P = f(W)$ для нескольких разных по природе и физическим характеристикам жидкостей и т.д.

Из полученных вариантов следует выбрать подобные (подобными будут лишь те, где все переменные подобраны таким образом, что величина критерия Re будет одинаковой, независимо от природы жидкости, скорости ее движения, диаметра трубопровода). Рассчитывая для этих вариантов значения критерия Эйлера, убедитесь, что получается одна и та же величина, как это следует из теории подобия. После второго следует построить зависимость $Eu = f(Re)$ при $\Gamma = \text{const}$ (рисунок 1) и определить ее аналитический вид $Eu = BRe^m$, где $B = A\Gamma^n$, а также численные значения B и m . Проведя эту операцию несколько раз для разных значений геометрического критерия Γ ($\Gamma_1, \Gamma_2, \dots, \Gamma$), проделав соответствующий эксперимент, получают зависимость $Eu = f(\Gamma)$ (рисунок 2) и таким образом расшифровывают структуру величины B (определяют численные значения A и n). В итоге получаем конкретный вид критериального уравнения $Eu = ARe^m\Gamma^n$.

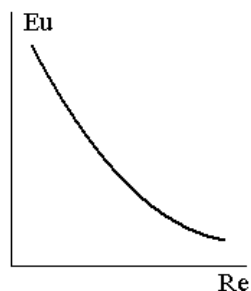


Рисунок 1 - Зависимость $Eu=f(Re)$ при $\Gamma = \text{const}$

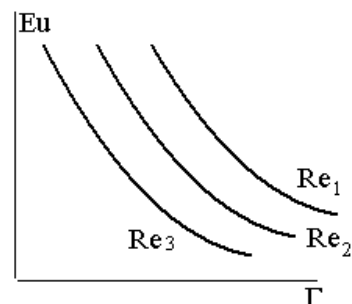


Рисунок 2 - Зависимость $Eu=f(\Gamma)$

Задание для самостоятельной работы

1. Используя методы и приемы теории анализа размерностей, определить общий вид критериального уравнения, если известно, что:

1.1. При противоточной экстракции имеет место истечение одной жидкости в среду другой. Исследование этого явления показали, что диаметр капли d сильно зависит от диаметра отверстия d_0 , удельного веса жидкости, образующей каплю (дисперсной среды) γ_d , удельного веса жидкости, в которую происходит истечение γ_c , а также от поверхностного натяжения σ на границе фаз сплошной и дисперсной сред, т.е.

$$d = f(d_0, \gamma_d, \gamma_c, \sigma).$$

1.2. В процессах пневматического размешивания жидких сред газом имеет место истечение газа в жидкую среду. Установлено, что диаметр газового пузырька зависит от диаметра подающего отверстия d_0 , удельного веса газа γ_d (дисперсной среды) и жидкости γ_c (сплошной среды), а также поверхностного натяжения жидкости σ_c , т.е.

$$d = f(d_0, \gamma_d, \gamma_c, \sigma_c).$$

1.3. В процессе противоточной экстракции относительная скорость движения капли $W = W_d + W_c$ (W_d и W_c - соответственно скорости движения капли и сплошной среды относительно аппарата), зависит от следующих величин: γ_d и γ_c - удельные вес диспергированной и сплошной среды; μ_d и μ_c - вязкости капли и среды; d и D - диаметров капли и реакционного аппарата; g - ускорения силы тяжести, τ - времени

$W = f(\gamma_d, \gamma_c, \mu_d, \mu_c, d, D, g)$ (для установившегося режима) и $W = f(\gamma_d, \gamma_c, \mu_d, \mu_c, d, D, g, \tau)$ (для неустановившегося режима).

1.4. При истечении из отверстий жидкости с повышенной вязкостью (нефти, мазута, глицерина и др.) имеет место следующая зависимость $f(P, d, \rho, \nu, g, \sigma, V, \tau)=0$,

где d – диаметр отверстия, через которое происходит истечение жидкости; ρ – плотность жидкости; ν – кинематическая вязкость жидкости; g – ускорение силы тяжести; σ – поверхностное натяжение жидкости; V – объемный расход жидкости; τ – время; $(P/\gamma+H)$ – действующий напор; т.к. оба члена имеют одну и ту же размерность, то в качестве переменной выбрано P .

1.5 Установлено, что гидродинамический характер процесса экстракции жидкости жидкостью (для простоты предполагается движение жидкости без массообмена) обуславливается следующими факторами: G_C и G_d – весовые скорости движения тяжелой (сплошной) и легкой (диспергированной) жидкостей (в $\text{кг}/\text{м}^2 \cdot \text{с}$); γ_d , γ_C γ_d и γ_C – удельные вес диспергированной и сплошной среды (в $\text{кг}/\text{м}^3$); μ_d и μ_C – коэффициенты абсолютной вязкости этих жидкостей (в $\text{кг} \cdot \text{с} / \text{м}^2$); σ_d , σ_C – поверхностное натяжение жидкостей в ($\text{кг}/\text{м}$); d и D – диаметры капли и аппарата, м; g – ускорение силы тяжести; τ – время в с (при неустановившемся режиме).

1.6. Тепловой и гидродинамический характер конденсации пара при барботаже его через жидкость определяются следующими параметрами: W – скорость истечения пара из сопла; ν – кинематическая вязкость жидкости; c – теплоемкость жидкости; λ – коэффициент теплопроводности жидкости; r – скрытая теплота конденсации пара; σ – поверхностное натяжение жидкости (в случае разрыва струи); Δt – разность температур между средней температурой жидкости в области циркуляционных потоков и ее температурой кипения при заданных условиях; d и D – диаметры сопла и аппарата; H – высота циркуляционного потока; $\gamma_{\text{п}}$ – удельные вес пара; ρ – плотность жидкости; τ – время прохождения пара через резервуар; ΔP – разность давлений пара в сопле и жидкости в резервуаре.

В зависимости от полноты конденсации пара будет находиться количества тепла, отдаваемое им жидкости. С этой точки зрения характеристикой процесса будет тепловое напряжение, выражаемое количеством тепла q , воспринимаемым единицей объема жидкости в единицу времени.

1.7. Опыты по перемешиванию различных жидкостей пропел-

лерными мешалками показали, что затрачиваемая мешалкой мощность N зависит от вязкости жидкости μ , ее плотности ρ ; числа оборотов мешалки n и диаметра мешалки d , т.е.

$$N = f(\mu, \rho, n, d).$$

1.8. Величину силы сопротивления, действующей на тело заданной формы, движущееся с некоторой скоростью в вязкой жидкости, имеющей свободную поверхность, определяют следующие величины: W_T – скорость движения тела; ρ – плотность жидкости; ν – кинематическая вязкость жидкости; l – некоторый характерный размер; g – ускорение свободного падения, т.е.

$$F = f(l, W_T, g, \nu, \rho).$$

Практическая работа №4

ПОСТРОЕНИЕ МОДЕЛИ ДЛЯ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Цель работы: освоить принципы построения математической модели и выполнить эту операцию на конкретном примере.

Математическое моделирование – это метод научного исследования, базирующийся на изучении процессов на математических моделях.

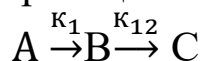
С помощью законов природы зависимости величин, выражающие отдельные факторы изучаемого явления, формулируются в виде уравнений – как правило дифференциальных, а также интегральных, интегро-дифференциальных, алгебраических и др. Получающаяся система уравнений вместе с известными данными, необходимыми для ее решения (начальные условия, граничные условия, значения коэффициентов уравнений и т.п.), называются математической моделью явления (процесса).

Одно из основных положений материалистического мировоззрения заключается в том, что всякое явление природы неисчерпаемо в своей сложности. Поэтому учесть все без исключения факторы в одном исследовании невозможно. Задача исследователя, прежде всего, выделить факторы, наиболее существенные с точки зрения стоящей перед ним задачи, а несущественными пренебречь. При этом, строя математическую модель, исследователь должен подумать, а поддадутся ли решению полученные им уравнения, нельзя ли их

упростить, опустив тот или иной член, и т.д. При этом следует помнить, что всякое такое упрощение равносильно некоторому допущению о характере изучаемого явления. Таким образом, упрощая математическую модель явления, исследователь очерчивает границы ее применимости. Выводы, полученные из такой модели, нельзя распространять за эти границы. Забыв об этом, можно прийти к абсурду.

Следовательно, математическая модель должна быть достаточно простой в математическом отношении, чтобы ее можно было бы подробно исследовать имеющимися средствами. С другой стороны, в результате этих упрощений она должна встретить «рациональное зерно», существо проблемы. Поэтому построение математической модели – это своего рода искусство, где тесно переплетаются и знание теории, и опыт, и интуиция.

Рассмотрим построение математической модели на конкретном примере последовательной реакции первого порядка типа:



Для простоты примем, что обе реакции элементарны, что дает возможность выражения для скоростей их протекания записать в соответствии с законом действующих масс.

В данной системе три компонента А, В, С. Следовательно можно записать три кинетических уравнения:

$$\begin{aligned} \frac{d[A]}{d\tau} &= -\kappa_1[A] \\ \frac{d[B]}{d\tau} &= \kappa_1[A] - \kappa_2[B] \\ \frac{d[C]}{d\tau} &= \kappa_2[B] \end{aligned}$$

Из них линейно независимых два; концентрацию конечного продукта С в любой момент времени по ходу процесса можно определить из уравнения материального баланса:

$$\frac{d[A]}{d\tau} + \frac{d[B]}{d\tau} + \frac{d[C]}{d\tau} = 0$$

Записанные выше уравнения составлены из размерных величин (концентрация, скорость, время, константа скорости). Для математической модели это неудобно. Поэтому записанную выше систему уравнений следует выполнить в безразмерных переменных. Например,

$$\alpha = \frac{([A]_0 - [A])}{[A]_0} \quad \alpha_1 = \frac{[B]}{[A]_0} \quad \alpha_2 = \frac{[C]}{[A]_0} \quad \tau = k_1 \cdot t \quad \frac{k_2}{k_1} = \gamma.$$

Проводя несложные преобразования, получаем

	Граничные условия	Начальные условия
$\frac{d\alpha}{d\tau} = 1 - \alpha$	$\alpha - /0-1/$	$\tau = 0$
	$\alpha_1 - /0-1/$	$\alpha = 0$
$-\frac{d\alpha_1}{d\tau} = 1 - \alpha - \gamma\alpha_1$	$\alpha_2 - /0-1/$	$\alpha_1 = 0$
	$\tau - /0-\infty/$	$\alpha_2 = 0$
$\alpha_2 = \alpha - \alpha_1$	γ - любое положительное число (целое или дробное)	

Данная система уравнений в совокупности с начальными и граничными условиями и представляет собой искомую математическую модель рассматриваемой последовательности реакции первого порядка.

Составленную модель нужно решать и исследовать полученные решения. Выбор метода решения определяется тем, насколько сложной является математическая модель. Здесь возможны варианты:

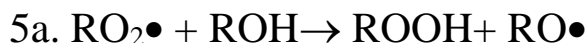
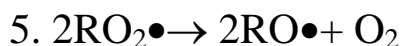
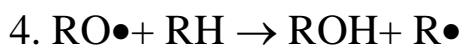
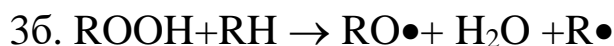
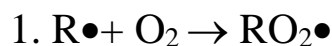
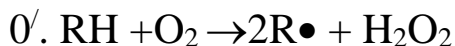
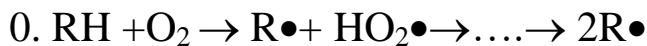
1. Классическое моделирование, т.е. решение методами и приемами классической математики. Выполняется интегрирование дифференциальных уравнений или систем дифференциальных уравнений при заданных начальных, граничных и прочих условиях. После получения решения проводится анализ (определение экстремальных состояний, точек перегиба и др.) и формулировка выводов.

2. Электронное моделирование, т.е. решение дифференциальных и иных уравнений на ЭВМ непрерывного действия, т.е. электронных моделях. Основано на электронном подобию, реализуемом в аналоговых машинах. В сравнении с классическим его возможности шире. Небольшая стоимость машин, малые габариты, простота в обращении и т.д. – все это достоинства данного метода. Тем не менее, возможности его ограничены и для решения особо сложных задач он не пригоден.

3. Вычислительный эксперимент – это решение дифференциальных уравнений или систем дифференциальных уравнений на ЭВМ с помощью приближенных методов решения. Развитие методов вычислительной математики в совокупности с ростом возможностей ЭВМ делает этот метод наиболее прогрессивным, позволяющим решать наиболее сложные задачи.

Задание для самостоятельной работы

1. Построить математическую модель процесса жидкофазного окисления изопрропилбензола молекулярным кислородом, используя приводимые ниже сведения о механизме данного гомогенного гетерофазного процесса (RH- изопрропилбензол)



а также следующие допущения:

А. Режим протекания процесса кинетический (концентрация кислорода в жидкой фазе обеспечивает практически 100%-нок превращение всех радикалов $\text{R}\bullet$ в $\text{RO}_2\bullet$); в первом приближении можно считать $[\text{O}_2] = \text{const}$). Варианты:

1. Начальная реакционная смесь содержит только и растворенный в нем кислород. $[\text{ROOH}]_0 = 0$. Пренебречь:

а) ни одной из записанных в схеме механизма реакций нельзя;

б) реакциями 0', 3, 3а, 3б, 4, 4а, 5 и 5а;

в) реакциями 3а и 3б;

г) реакциями 4а, 5 и 5а;

д) реакциями 3 и 3б;

е) реакциями 3 и 3 а;

ж) реакциями 0, 5 и 5а;

з) реакциями 3а, 3б, 5а.

2. Начальная реакционная смесь содержит RH, растворенный в нем кислород и небольшие количества ROOH. Пренебречь:

а) реакциями 0, 0', 3а, 3б;

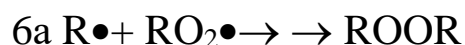
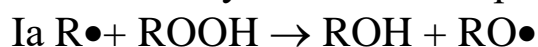
б) реакциями 0, 3, 3б;

- в) реакциями 0, 0', 3, 3а;
- г) реакциями 0, 0', 3а, 3б, 4а, 5 и 5а;
- д) реакциями 0, 0', 3, 3а, 4а, 5 и 5а;
- е) реакциями 0, 0';
- ж) реакциями 0, 0', 4а, 5а;
- з) реакциями 0, 0', 5а;
- и) реакцией 5а.

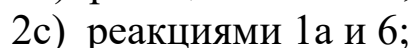
3. Начальная реакционная смесь содержит RH , растворенный в нем кислород и соизмеримое RH количество $ROOH$; реакции 0 и 0' существенной роли не играют. Дополнительно пренебречь:

- а) реакциями 3а, 3б;
- б) реакциями 3, 3б;
- в) реакциями 3, 3а;
- г) реакциями 3а, 3б, 4а, 5 и 5а;
- д) реакциями 3, 3б, 4а, 5 и 5а;
- е) реакциями 3, 3а, 4а, 5 и 5а;
- ж) реакциями 4а, 5 и 5а;
- з) реакциями 4а и 5а;
- и) реакцией 5а.
- к) ни одной из реакций нельзя.

Б. Режим протекания окислительного процесса диффузионный или переходной (концентрация кислорода в любой момент времени определяется соотношением скоростей массопередачи O_2 из газовой фазы в жидкую и химического расходования в жидкой фазе по реакции I; приведенную в условии схему механизма окислительного процесса следует дополнить реакциями:



Рассмотреть варианты А1, А2, А3, допустив возможность дополнительно пренебречь:

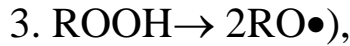


Примечания:

1. Считать возможным скорость любой из приведенных в

схеме механизма реакций (включая и 1а, ба и бб) записывать в соответствии с законом действия масс;

2. В случае многостадийных реакций со схематической записью промежуточных стадий (реакции типа 0, 0', 3) считать продуктами вещества, записанные в схеме последними (например, для реакции 3



а полученное формализованное стехиометрическое уравнение положить в основу для составления выражений для скорости протекания той или иной стадии (например, $W_3 = k_3[\text{ROOH}]$ и соответственно для этой стадии

$$-\frac{d[\text{ROOH}]}{dt} = W_3 \text{ и } \frac{d[\text{RO}\bullet]}{dt} = 2W_3).$$

3. Кинетические уравнения для несодержащих в своем составе R промежуточных продуктов (например, $\text{HO}_2\bullet$, $\text{HO}\bullet$, H_2O_2), превращения которых в схеме механизма полностью или частично опущены, не составлять и в математическую модель, соответственно, не включать.

4. При переводе размерных величин (концентрации, время, константы скорости и др.) в безразмерные выбор последних рекомендуется проводить следующим образом:

- степень превращения RH (конверсия RH): $\alpha = \frac{([\text{RH}]_0 - [\text{RH}])}{[\text{RH}]_0}$

- степень превращения RH в любой продукт, содержащий в своем составе R $\alpha_i = \frac{[\text{продукт}]}{[\text{RH}]_0}$;

- безразмерное время τ имеет следующую структуру

$$\tau = tk_0[\text{RH}]_0^{n_0-1}$$

где k_0 – константа скорости выбранной базовой реакции (обычно это обязательная, иногда лимитирующая, стадия всех предполагаемых вариантов; для вариантов п.А такой стадией является реакция 2, а для вариантов п.Б – либо реакция 1, либо 2); базовая реакция выбирается составляющим математическую модель процесса, исходя из знаний в области механизма и кинетических закономерностей его протекания, опыта и интуиции; n_0 – общий порядок выбранной базовой реакции.

Коэффициенты кинетических уравнений в безразмерных переменных γ_i имеют следующую структуру

$$\gamma_i = \frac{k_i}{k_0} \cdot [RH]_0^{n_i - n_0}$$

где n_i – порядок i -той реакции с константой скорости k_i .

5. Недостающие сведения о граничных и начальных условиях указываются и обосновываются составляющим математическую модель процессом.

Задание для контрольной работы

1. По исходным данным выбрать модель для физического моделирования и найти масштабные коэффициенты для пересчета природы на модель или наоборот:

1.1. При истечении через трубу, расположенную в нижней части резервуара, жидкость кроме движения вниз, получает вращательное движение. В результате сложения движений при определенном уровне жидкости в резервуаре образуется воронка и засасывается воздух, что во многих случаях крайне нежелательно из-за воздушных пробок, образующихся в потоке. Явление можно моделировать приближенно, рассматривая начало засоса воздуха в зависимости от высоты уровня жидкости над днищем. Поскольку влиянием поверхностного натяжения в резервуаре большого диаметра и сил инерции из-за малой скорости опускания жидкости в сравнении с влиянием вязкости и веса жидкости можно пренебречь, на модели целесообразно изучить действие только последних двух факторов.

В натуре имеется резервуар диаметром $D_H = 2$ м, наполненный нефтью. Необходимо построить модель и с ее помощью определить наименьшую высоту уровня жидкости H_H над выпускной трубой резервуара, гарантирующую отсутствие засоса воздуха. Известны вязкость нефти при 20° $\mu_H = 0,65$ пуаза и удельный вес нефти $\gamma_H = 880$ кг/м³. Требуется найти масштабы пересчета результатов моделирования и масштаб модели для следующих вариантов:

- А) моделирование водой;
- Б) моделирование уайт-спиритом;
- В) моделирование ацетоном;
- Г) моделирование бензолом;

Д) моделирование с помощью жидкости, состав которой следует подобрать (для моделирования используется готовый аппарат; поэтому величина K_1 известна).

1.2. На модели исследуется теплообмен при турбулентном ре-

жиме в трубчатом кожухотрубном теплообменнике. В натуре жидкость будет протекать внутри трубок $d_n = 50$ мм. Требуется определить масштабы модели. Жидкость модели и натуре одна и та же.

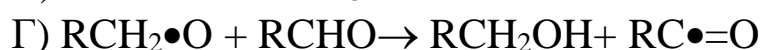
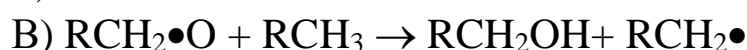
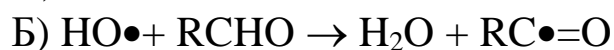
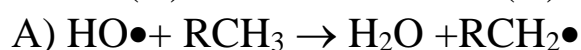
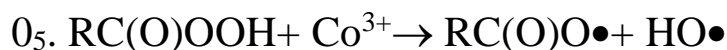
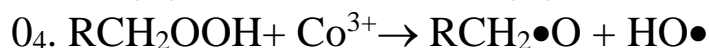
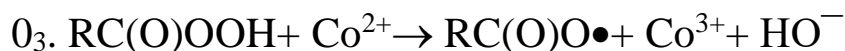
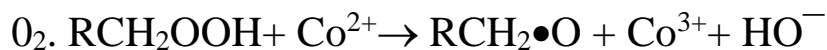
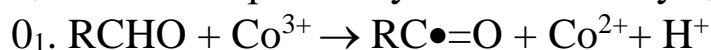
1.3. Лопатки мешалки при движении в жидкости будут преодолевать, помимо лобового давления, вязкостными силы, а при известных условиях и действие силы тяжести. Так, при малых числах оборотов лопастные мешалки встречают основное сопротивление со стороны вязкостных сил. При увеличении оборотов и появлении воронки начинает существенно влиять сила тяжести. Пропеллерные, винтовые и другие типы мешалок, создающие вертикальные потоки, моделируются с учетом сил тяжести.

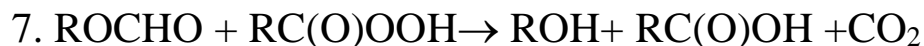
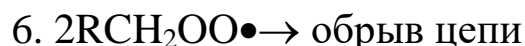
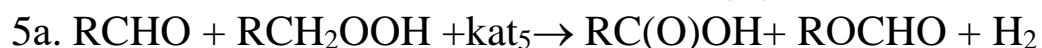
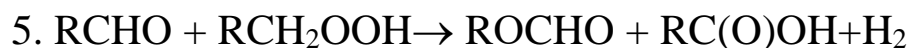
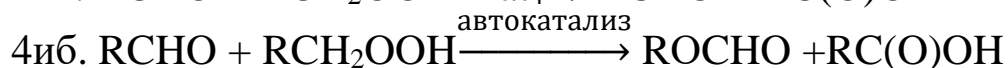
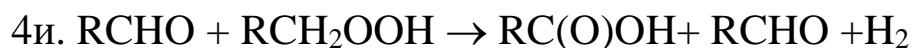
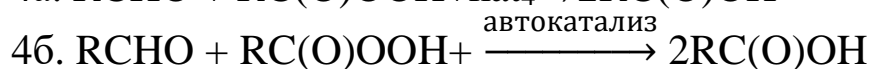
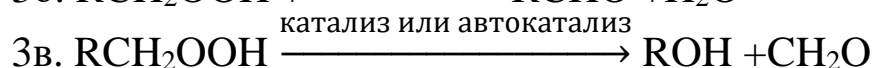
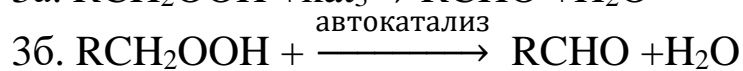
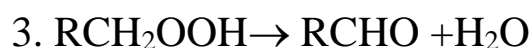
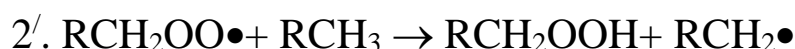
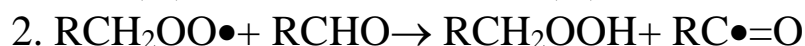
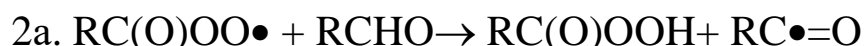
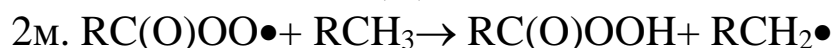
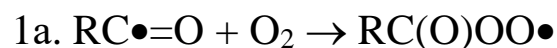
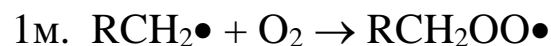
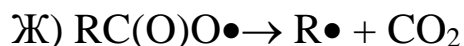
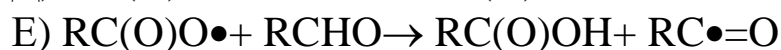
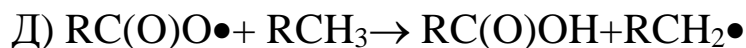
Вариант А. Испытанию подлежит модель мешалки, перемешивающей в натуре жидкость удельного веса $\gamma_n = 2000$ кг/м³. Размеры лопатки мешалки в натуре $b_n \times h_n = 0,5 \times 0,05$ м, скорость вращения мешалки $n_n = 10$ об/мин. Коэффициент абсолютной вязкости $\mu_n = 10$ сантипуаз при 20°C. Верхний край мешалки расположен на глубине $H_n = 1$ м от уровня жидкости в неподвижном состоянии.

Требуется построить модель для изучения процесса на воде ($\mu_n = 1$ сантипуаз) и найти масштабные множители для пересчета натуре на модель. Принять $K_1 = 4$.

Вариант Б. Мешалка варианта А работает в условиях, создающих вертикальные потоки жидкости и воронку. Необходимо рассчитать масштабы модели и переходные масштабные коэффициенты для расчета натуре.

2. Построить математическую модель процесса жидкофазного окисления п-ксилола (RCH₃- п-ксилол), используя приводимую ниже схему механизма процесса и указания о возможных путях ее упрощения в конкретных условиях ее осуществления:





биторов



цепного окисления молеку-

лярным

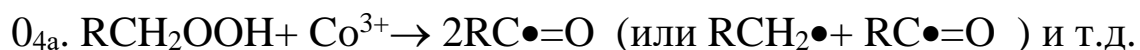
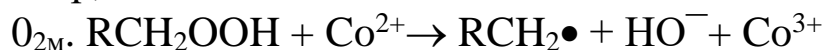


кислородом

В углеводородных средах при небольших концентрациях Со-катализатора основная масса его находится в виде соединений трехвалентного кобальта.

Обычно окисление п-ксилола протекает при очень малых текущих концентрациях перекисных соединений (как первичного гидропероксида, так и перкислоты). Нередки случаи, когда лимитирующей стадией зарождения цепей является реакция 0₁. Это во многом зависит от начального содержания альдегида в реакционной смеси и от природы аниона кобальтового катализатора.

Радикалы HO•, RCH₂•O, RC(O)O•, R• в сравнении с пероксильными радикалами намного более реакционноспособны в отрыве H-атомов от RCH₃ и от RCHO. Из этого следует, что их текущие концентрации будут малы и в первом приближении можно считать стационарными. Это позволяет исключить из самостоятельного рассмотрения реакции «а-и», проводя их учет путем формализации записи правых частей стехиометрических уравнений реакций 0₂-0₅, например,



Реакции пероксильного радикала RCH₂OO• с альдегидом и углеводородом следует учитывать лишь в отдельных случаях, в частности, когда температура окисления не менее 130°, а концентрация альдегида более 0,5 моль/л.

Автокатализ гетеролитического окисления альдегида перкислотой весьма малоэффективен, а катализатора как основного направления (т.е. в кислоту), та и побочного (толилформиат и кислоту) присутствует в системе далеко не всегда, а если и присутствует, то может быть и малоэффективным. При этом следует иметь в виду, что катализатором основного и побочного направления данной реакции является одно и то же химическое соединение.

Катализатором реакции 5 может быть катализатор реакции 4. При этом эффективность реакций 4 и 5 одним и тем же соединением может различаться довольно сильно. Катализаторами указанных реакций обычно являются некоторые соединения трехвалентного кобальта и одноосновных карбоновых и минеральных кислот.

Превращение первичного гидропероксида в альдегид по реакциям 3 играет существенную роль в закономерностях процесса только при наличии эффективного катализа.

Образование ингибитора фенола по реакции 3 существенно лишь при наличии эффективного катализа. Образование же ингибитора-фенола по реакциям 7 следует учитывать как в отсутствие, так и в присутствии катализа; при этом катализаторами данной реакции могут быть соединения трехвалентного кобальта.

Окисление ингибитора-фенола перкислотой эффективно лишь при наличии катализа. По мере накопления кислот каталитическая эффективность соединений трехвалентного кобальта падает.

При переходе от кинетического режима протекания процесса к диффузионному учесть рекомендации, приведенные в задаче №1.

Выбор безразмерных переменных проводить в соответствии с рекомендациями, описанными в приложении к задаче №1.

Вопросы для самостоятельной работы

1. Сущность физического моделирования, его основные этапы и роль в решении технологических и исследовательских задач.

2. Теория подобия как теоретическая основа физического моделирования.

3. Способ задания условий однозначности в теории подобия.

4. Основные теоремы теории подобия.

5. Приложения основных теорем теории подобия к решению конкретных задач физического моделирования.

6. Получение критериальных уравнений методами и приемами теории подобия.

7. Критерии подобия. Общность и различия с другими безразмерными параметрами.

8. Индикаторы подобия и их роль в определении масштабных коэффициентов при переходе от природы к модели и наоборот.

9. Теория анализа размерностей в физическом моделировании

10, Основные задачи, решаемые с помощью теории анализа размерностей.

11. Границы применимости теории анализа размерностей.

12. Получение критериальных уравнений методами и приемами теории анализа размерностей.

13. Основные принципы построения модели для физического моделирования.

14. Роль и задачи эксперимента в физическом моделировании.

15. Математическое моделирование и его этапы.

16. На чем базируется математическое моделирование?
17. Понятие о математическом подобии.
18. Классификация математического моделирования по методам решения математических моделей.
19. Вычислительный эксперимент и основные его этапы.
20. Понятие о классическом и электронном моделировании.
21. Преимущества и недостатки математического моделирования как метода исследования.
22. Диалектическое единство математического моделирования и натурального эксперимента.
23. Роль математического моделирования в решении современных задач и подготовке молодых специалистов.
24. Математическая модель как основа математического моделирования.
25. Границы применимости математической модели и их учет в интерпретации результатов выполненного математического моделирования.
26. Основные принципы построения математических моделей.
27. Математическая модель в безразмерных переменных.

Библиографический список

1. Математические модели химических реакций: учебник /Марков Ю.Г., Маркова И.В. М.: Лань. 2014. -192 с.
2. Математическое моделирование химических процессов: учебное пособие /Гумеров Ас. М. М.: Лань. 2014. -176 с.
3. Примеры и задачи по курсу «Математическое моделирование химико-технологических процессов»/ Самойлов Н.А. - М.:Лань, 2013. -176 с.
4. Моделирование систем: учебное пособие / И.А. Елизаров, Ю.Ф. Мартемьянов, А.Г. Схиртладзе, А.А. Третьяков. - Тамбов: Изд-во ФГБОУ ВПО "ТГТУ", 2011. - 96 с