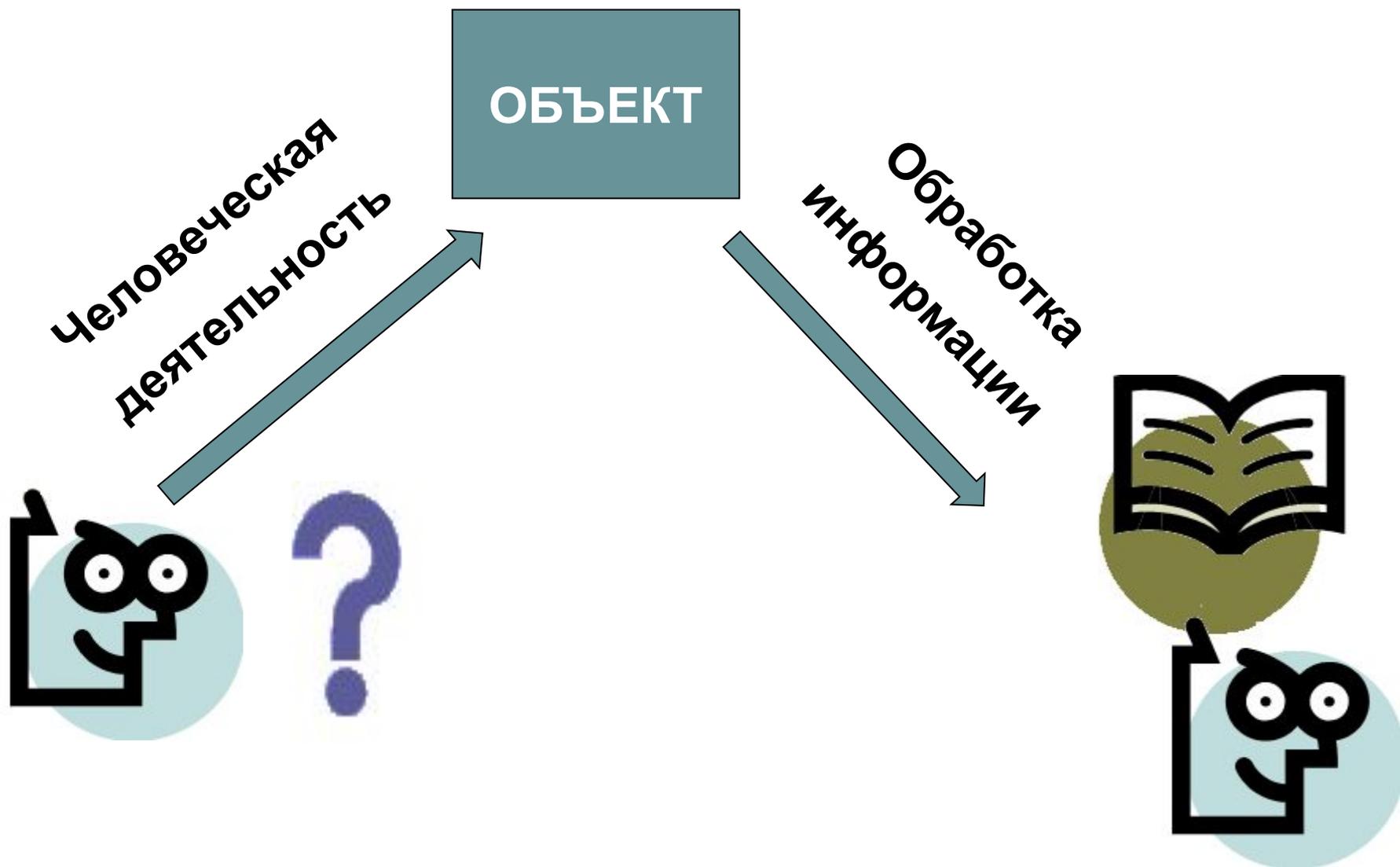


# Компьютерные методы и информационные технологии в технологии полимеров

## **Моделирование и модели. Основные понятия и определения**

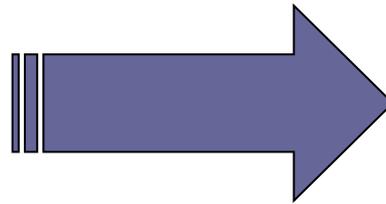
### Лекция 3

# МЕТОДОЛОГИЧЕСКАЯ ОСНОВА МОДЕЛИРОВАНИЯ

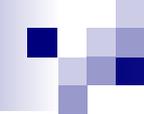


# МЕТОДОЛОГИЧЕСКАЯ ОСНОВА МОДЕЛИРОВАНИЯ

- **Опытные данные**
- **Наблюдения**
- **Догадки**



**Гипотеза**

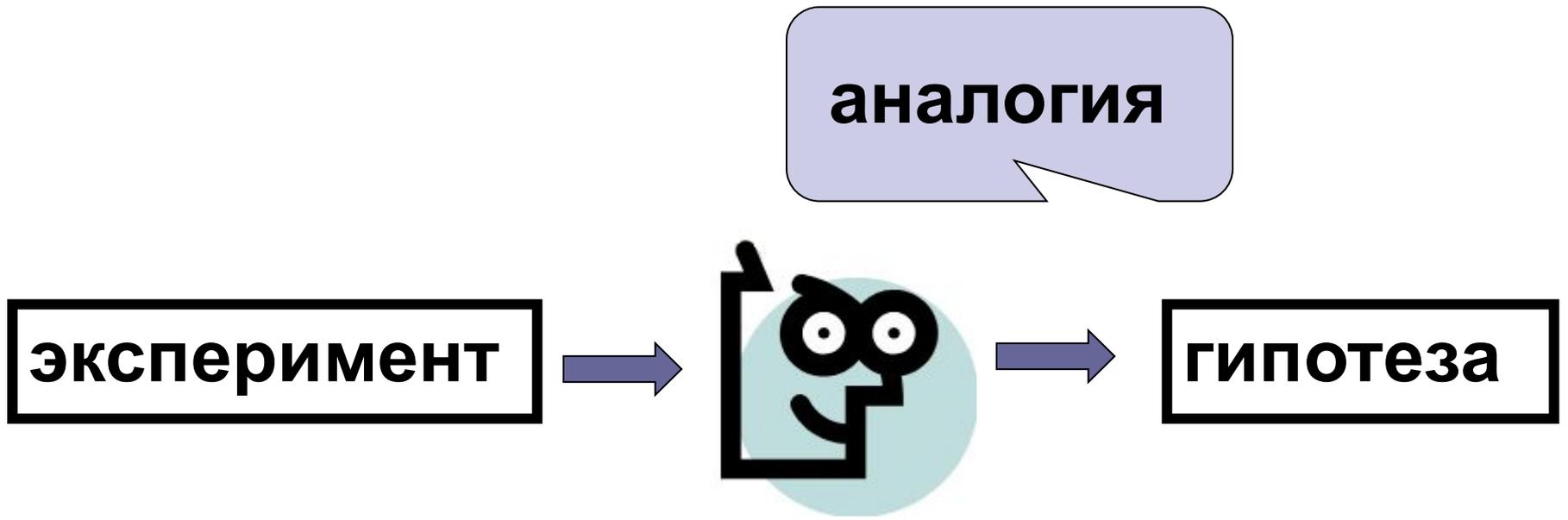


**Как быстро проверить гипотезу?**



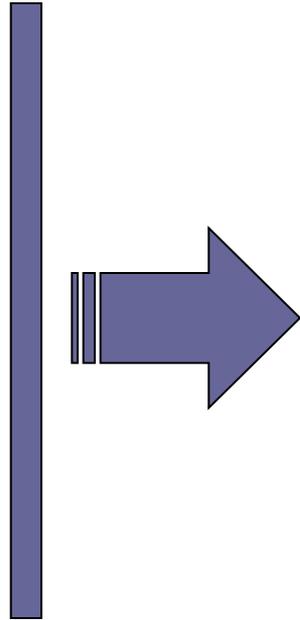
**Поставить специальный  
эксперимент!**

**АНАЛОГИЯ –**  
**суждение о каком-либо частном**  
**сходстве двух объектов**



## МЕТОДОЛОГИЧЕСКАЯ ОСНОВА МОДЕЛИРОВАНИЯ

- Гипотезы
- Аналогии



Удобные для  
исследования  
логические  
схемы –  
**МОДЕЛИ**

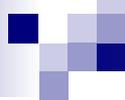
**МОДЕЛЬ** (лат.modulus –мера) – это объект - заместитель объекта – оригинала, обеспечивающий изучение некоторых свойств оригинала.

# Модель нужна для того, чтобы:

- Понять, как устроен конкретный объект, какова его структура, основные свойства, законы развития и взаимодействие с окружающим миром;
- Научиться управлять объектом и определять оптимальные способы управления при заданных целях;
- Прогнозировать прямые или косвенные последствия воздействия на объект

Каждая модель характеризуется тремя **признаками**:

- принадлежностью к определенному классу задач;
- способом реализации (по форме представления и обработки информации);
- указанием класса объектов моделирования



# **Классификация моделей по принадлежности к определенному классу задач**

- **Дескриптивные модели**
- **Оптимизационные модели**
- **Многокритериальные модели**
  - **Игровые модели**

# Дескриптивные модели

description – описание

предназначены для описания различных процессов в разных отраслях знаний, но математическое описание их принадлежит к одному классу.

уравнение теплопроводности (закон Фурье)

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \cdot \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

уравнение электропроводности (закон Ома)

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \frac{1}{RC} \cdot \frac{\partial^2 U}{\partial x^2}$$

# Дескриптивные модели

Единство материального мира приводит к изоморфизму уравнений движения в самых различных областях физики, при изучении элементарных процессов в химической технологии и т.д.

Процесс	Дифференциальное уравнение
Поступательное движение	$m * (dv / dt) = F$ , где $m$ – масса, $F$ – сила
Вращательное движение	$J * (dw / dt) = M$ , где $J$ – момент энергии, $M$ – момент вращения
Теплообмен	$C_v * (dT / Dt) = Q_T$ , где $C_v$ – объемная теплоемкость, $T$ - температура

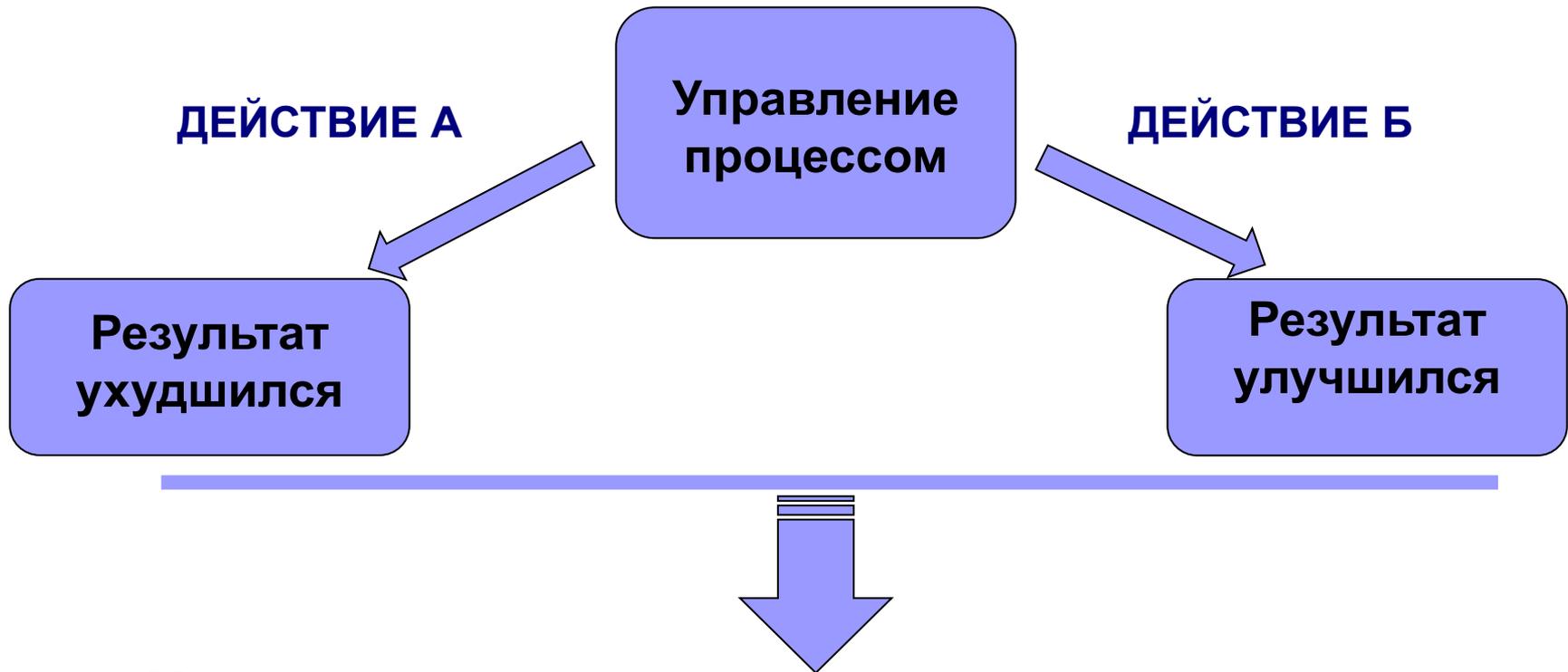
# **Дескриптивные модели**

**Сопоставление дифференциальных уравнений указывает на аналогичность и формальную однозначность математических описаний различных процессов.**

**Это позволяет использовать в качестве модели устройства совершенно иной физической природы, нежели моделируемый объект – аналоговое моделирование.**

# Оптимизационные модели

предназначены для тех случаев, когда необходимо управлять процессом (принимать решения).



Целенаправленная деятельность предполагает нахождение такого значения  $u$ , при котором функция  $\Phi(u)$  имеет экстремальное значение.

# **Многокритериальные модели**

**предназначены для случаев с несколькими целями (имеется несколько целевых функций).**

**Для работы с такими моделями пользуются способом сведения двух или нескольких критериев к одному или методом последовательных уступок.**

# Многокритериальные модели

**ЗАДАЧА** : Разрабатывается новый полимерный композиционный материал, пригодность которого к переработке и эксплуатации оценивается по ряду показателей:

- Стойкость к подвулканизации при 130С, мин:  $y_1$  не менее 30
- Оптимальный режим вулканизации при 160 С, мин:  $14 \leq y_2 \leq 18$
- Стоимость вулканизирующей группы для 100 кг смеси, руб:  $y_3$  не более 1,47
- Условное напряжение при 300% удлинении, МПа :  $y_4 = 9,5 - 10,5$

Свойства многокомпонентной системы зависят от типа и содержания ингредиентов.

# Многокритериальные модели

**РЕШЕНИЕ:**

вариант 1: определить наилучшее сочетание концентраций ингредиентов многокомпонентной полимерной композиции, обеспечивающее экстремальное значение какого-либо показателя качества  $Y$ .



**!!!** Подобранная комбинация не обеспечит желаемые значения других показателей качества.

вариант 2: поскольку имеется несколько критериев, а значит, несколько целевых функций, решение задачи оптимизации по ряду показателей целесообразно свести к задаче по одному обобщенному показателю, в качестве которого, например, удобно использовать функцию желательности Харрингтона.

# Многокритериальные модели

## Обобщенный функция желательности Харрингтона

$\varepsilon_i$  – частные критерии эффективности,

$k$  – число критериев

$$\mathcal{E} = \left( \prod_{i=1}^k \varepsilon_i \right)^{\frac{1}{k}}$$

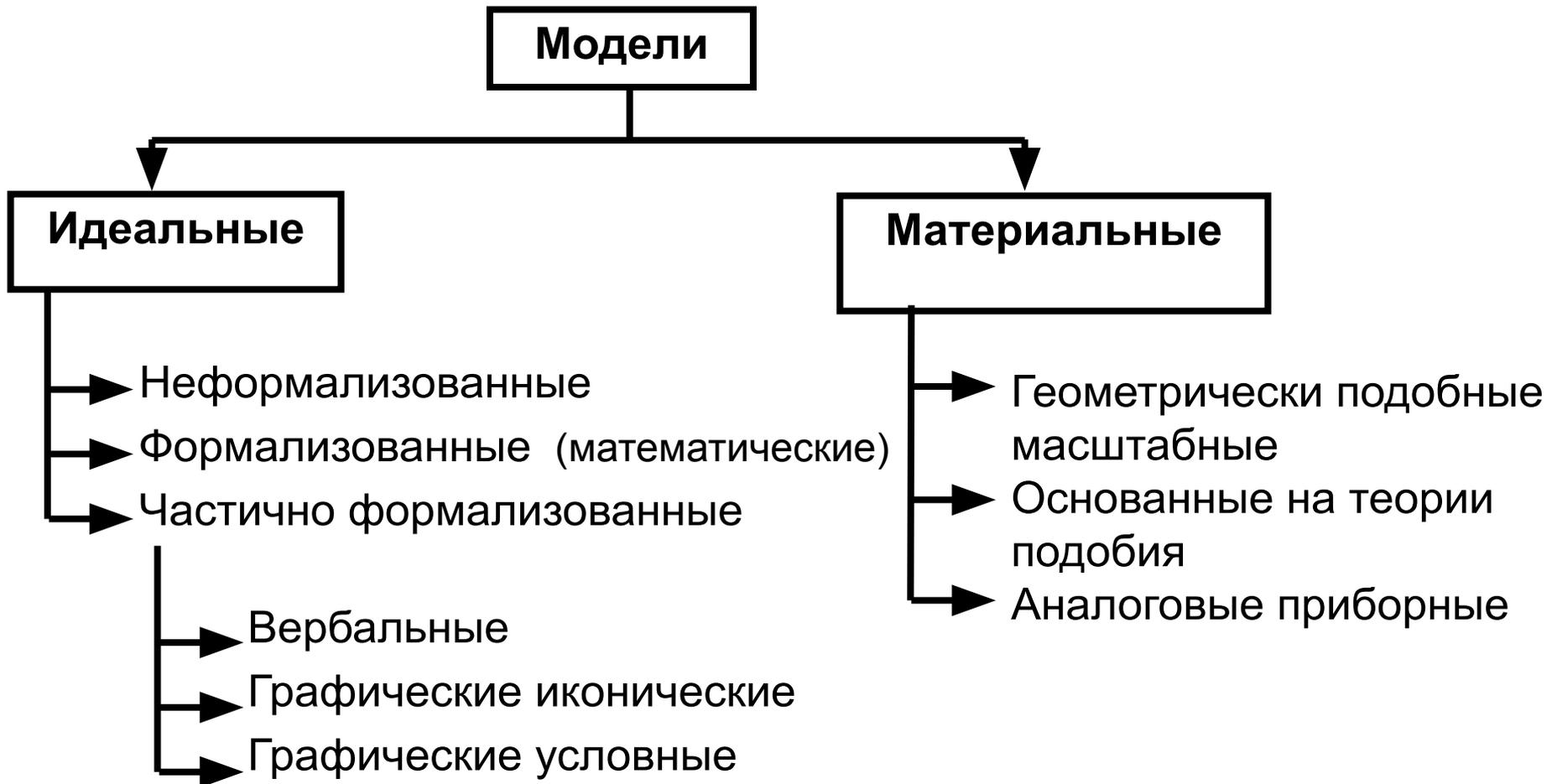
# Игровые модели

предназначены для  
конфликтных ситуаций,

т.е. для случаев, когда есть  
силы, противодействующие  
принимающему решение  
лицу, или когда интересы  
участников не совпадают.



# Классификация моделей по форме представления и обработке информации



# Классификация моделей по форме представления и обработке информации

## ИДЕАЛЬНЫЕ МОДЕЛИ

Неформализованные модели – это система представлений об объекте- оригинале, возникающая в сознании человека в процессе познания (модель атома Резерфорда, модель молекулы Бутлерова)

К формализованным моделям относятся математические - это приближенное описание какого-либо явления или процесса внешнего мира, выраженное с помощью математической СИМВОЛИКИ.

# Классификация моделей по форме представления и обработке информации

## ИДЕАЛЬНЫЕ МОДЕЛИ

К частично формализованным моделям относятся:

1. вербальные –это описание свойств и характеристик оригинала на некотором естественном языке (текстовые материалы проектной документации, словесное описание результатов технического эксперимента);
2. графические иконические –черты, свойства и характеристики оригинала, реально или хотя бы теоретически доступные непосредственно зрительному восприятию (художественная графика, технологические карты);
3. графические условные –данные наблюдений и экспериментальных исследований в виде графиков, диаграмм, схем

# Классификация моделей по форме представления и обработке информации

## МАТЕРИАЛЬНЫЕ МОДЕЛИ

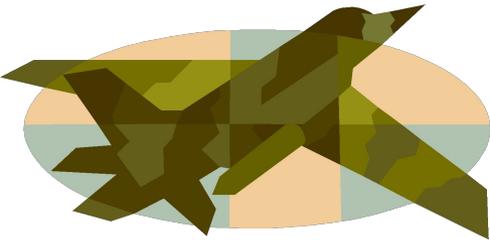
### Геометрически подобные масштабные модели

воспроизводят пространственно-геометрические характеристики оригинала без учета свойств (макеты зданий и сооружений, учебные муляжи).



### Основанные на теории подобия модели

воспроизводят с масштабированием в пространстве и времени свойства и характеристики оригинала той же природы, что и модель (гидродинамические модели судов, модели летательных аппаратов).



Аналоговые приборные модели воспроизводят исследуемые свойства и характеристики объекта-оригинала в моделирующем объекте другой природы на основе некоторой системы прямых аналогий.

# Классификация моделей с указанием класса объектов моделирования

Математические модели, описывающие химико – технологические процессы

Динамические модели

Статистические модели

Модели с распределенными параметрами

Модели с сосредоточенными параметрами

Сущность модели

Параметры процесса изменяются во времени

Параметры процесса не меняются во времени

Параметры процесса изменяются и во времени и в пространстве

Параметры процесса, переменные во времени, постоянны в пространстве

# Динамические модели

## Математическое описание

Производные по времени; часто строят в виде передаточных функций, связывающий входные и выходные переменных

## Иллюстрирующий

## пример

**Аппарат полного смешения в неустановившемся режиме:**

1) уравнение материального баланса:

$$dC_A / dt = v/V(C_{A0} - C_A) - k^* C_A * C_B$$

$$dC_B / dt = v/V(C_{B0} - C_B) - k^* C_A * C_B$$

начальные условия

$$C_A = C_{A0}, C_B = C_{B0} \text{ при } t=0$$

# Статические модели

## Математическое описание

алгебраические уравнения;  
дифуравнения с распределенными параметрами

## Иллюстрирующий

## пример

**Аппарат полного смешения** объемом  $V$  в устойчивом режиме работы, в который подаются реагенты А и В в количестве  $v_A$ ,  $v_B$  (причем  $v_A + v_B = v$ )

Уравнение материального баланса:

$$v^*(CA_0 - CA) = V^* k^* CA^* CB$$

$$v^*(CB_0 - CB) = V^* k^* CA^* CB,$$

$k$  – константа реакции

# Модели с распределенными параметрами

## Математическое описание

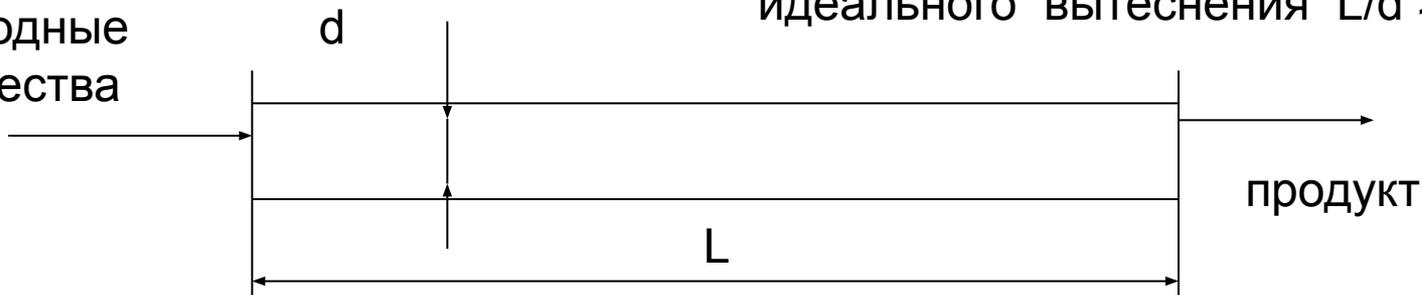
дифуравнения в частных производных;  
обыкновенные дифуравнения в случае стационарных процессов с одной пространственной переменной

## Иллюстрирующий

## пример

Аппарат, реализующий модель идеального вытеснения  $L/d > 50$

Исходные  
вещества



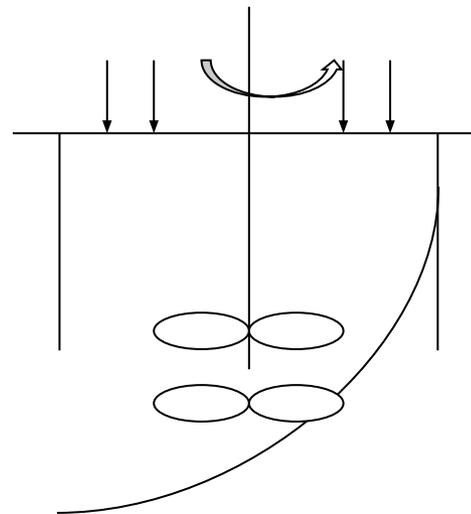
# Модели с сосредоточенными параметрами

## Математическое описание

алгебраические уравнения;  
дифуравнения 1-го порядка для нестационарных процессов

## Иллюстрирующий пример

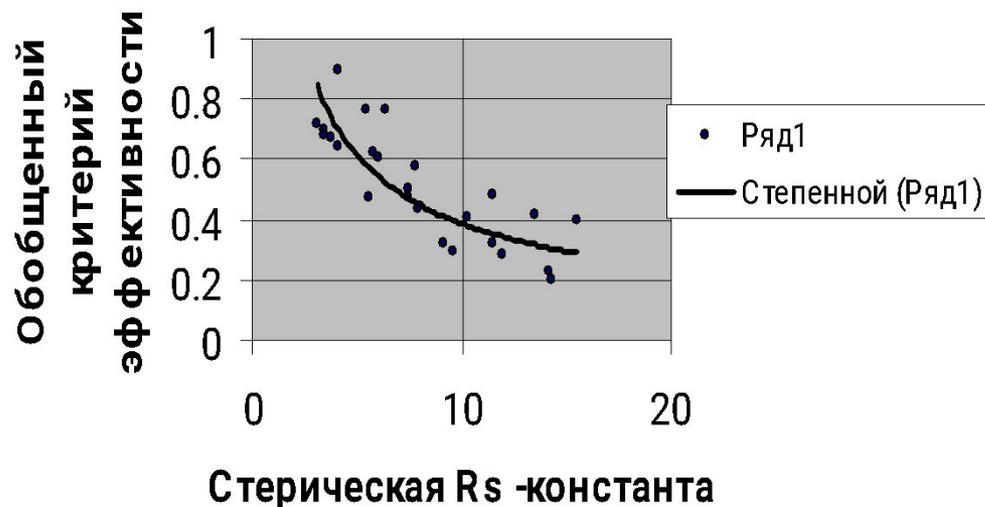
Аппарат с перемешиванием потока. Скорость мешалки такова, что концентрация во всех точках аппарата одинакова



# МОДЕЛИРОВАНИЕ

- это метод изучения объектов, при котором вместо оригинала исследование проводят на модели, а результаты количественно распространяются на оригинал.

Корреляционное поле



Однофакторная модель прогноза стабилизирующей активности фосфорорганических соединений

$$\mathcal{E} = 0.9775 \cdot e^{-0.0877 \cdot R_s}$$

**Моделирование**

```
graph TD; A[Моделирование] --> B[Идеальное]; A --> C[Материальное]; B --> D[Интуитивное]; B --> E[Имитационное]; B --> F[Математическое]; C --> G[Физическое]; C --> H[Аналоговое];
```

**Идеальное**

**Материальное**

**Интуитивное**

**Имитационное**

**Математическое**

**Физическое**

**Аналоговое**

# Математическое моделирование

- **Достоинства** - модель представляет собой формализованную запись тех или иных законов природы, управляющих работой системы; - математические описания строги и изящны.
- **Недостатки** - не всегда удается построить модель для сложной системы ввиду множества связей между элементами системы, большого числа параметров и нелинейных ограничений; - для построенных моделей не всегда существует корректный способ исследования.

**Математическое моделирование должно рассматриваться совокупностью трех аспектов:**

- 1. Смысловой аспект** – физическое описание природы моделируемого объекта;
- 2. Аналитический аспект** – математическое описание процесса в виде системы уравнений, отражающей протекающие в объекте явления и функциональные связи между ними;
- 3. Вычислительный аспект** – метод и алгоритм решения системы уравнений математического описания, реализованного как моделирующая программа на языке программирования

# Физическое описание природы объекта

- Выделяют "элементарные" процессы, протекающие в объекте моделирования, которые подлежат отражению в модели;
- Формулируют основные допущения, принимаемые при описании.

Обычно при математическом моделировании объектов химической технологии принимаются во внимание следующие "элементарные" процессы:

1. Движение потоков фаз;
2. Массообмен между фазами;
3. Теплопередача ;
4. Изменение агрегатного состояния (испарение, конденсация, растворение);
5. Химические превращения

# Этапы математического моделирования



# ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ МОДЕЛИРОВАНИЯ

1. **Формулировка задачи, выбор параметров процесса**
2. **Определение цели и критериев эффективности процесса**

**Формулирование задачи:** исследовать влияние вида галоидного алкила и типа растворителя на процесс радикальной полимеризации.

**Выбор параметров процесса:** X1 -вид галоидного алкила; X2 –тип растворителя

**Определение цели :** оценка влияния X1 и X2 на выход полимера

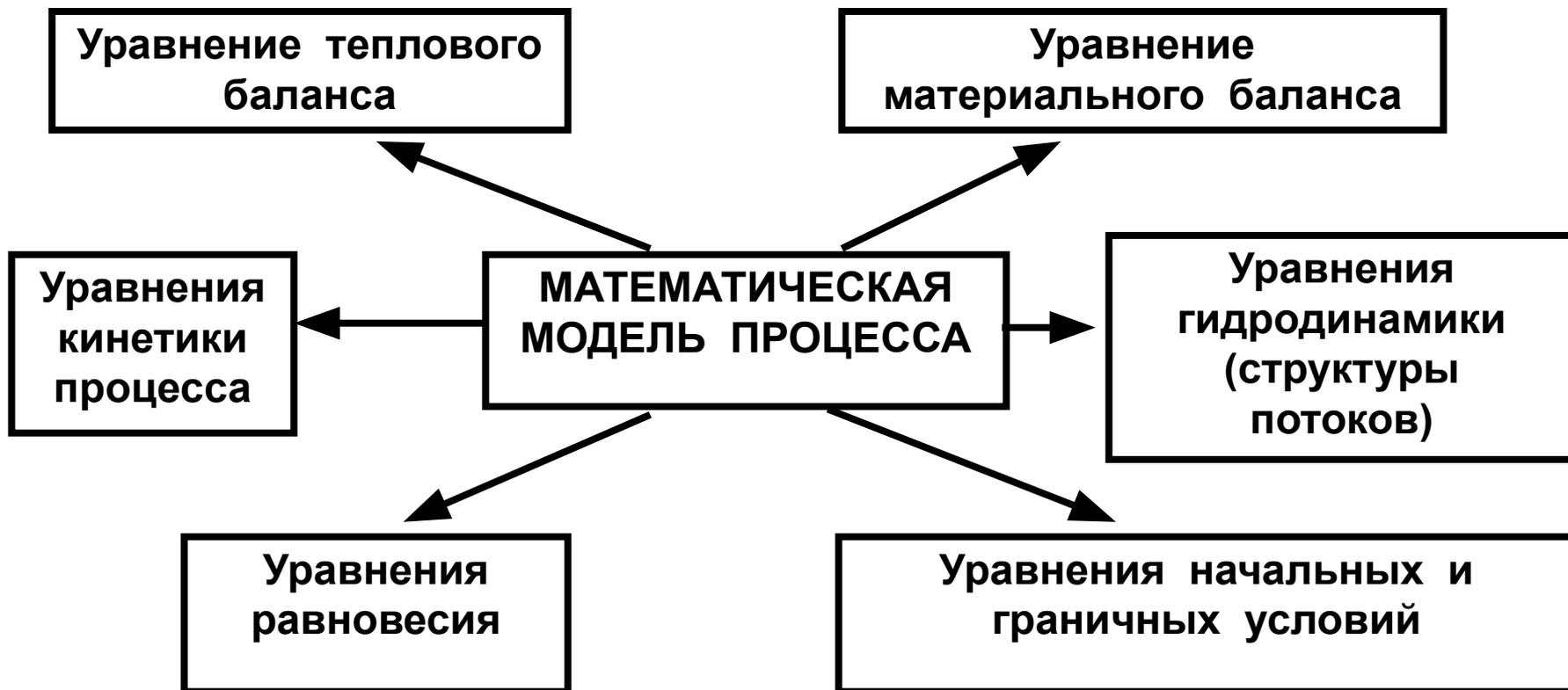
**Определение критерия эффективности процесса :** Y –выход полимера (%)

# Составление математического описания

1. предварительно выделяют основные явления и элементы в объекте
2. устанавливают связи между ними
3. для каждого выделенного элемента записывают уравнение (или систему уравнений), отражающее его функционирование
4. в математическое описание включают уравнения связи между различными выделенными явлениями.

# Составление математического описания

При составлении МО общим приемом является блочный принцип, согласно которому составлению МО предшествует анализ отдельных "элементарных" процессов, протекающих в объекте моделирования.



# Составление математического описания

Методы  
моделирования

Аналитические  
методы

Экспериментальны  
е  
методы

Экспериментально  
–  
аналитические  
методы