

**Емченко Е. А. к. т. н., доцент кафедры ОИД**

## ОСНОВНЫЕ ПРИНЦИПЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Моделирование в научных исследованиях стало применяться еще в глубокой древности и постепенно захватывало все новые области научных знаний: техническое конструирование, строительство и архитектуру, астрономию, физику, химию, биологию и, наконец, общественные науки. Большие успехи и признание практически во всех отраслях современной науки принес моделированию XX век.

Модель — это такой материальный или мысленно представляемый объект, который в процессе исследования замещает объект-оригинал так, что его непосредственное изучение дает новые знания об объекте-оригинале.

Под моделированием понимается триединый процесс построения, изучения и применения моделей. Моделирование тесно связано с такими категориями, как абстракция, аналогия, гипотеза и др. Модель выступает как своеобразный инструмент познания, который исследователь ставит между собой и объектом и с помощью которого изучает интересующий его объект. Особенность метода моделирования определяет формы использования абстракций, аналогий, гипотез, других категорий и методов познания.

Необходимость использования метода моделирования определяется тем, что многие объекты (или проблемы, относящиеся к этим объектам) непосредственно исследовать или вовсе невозможно, или же это исследование требует много времени и средств.

В процессе изучения свойств объекта при моделировании модель выступает как самостоятельный объект исследования. Одной из форм такого исследования является проведение "модельных" экспериментов, при которых сознательно изменяются условия функционирования модели и систематизируются данные о ее "поведении". Конечным результатом этого этапа является множество знаний о модели.

В процессе применения моделей осуществляется перенос знаний с модели на оригинал — формирование множества знаний об объекте. Этот процесс переноса знаний проводится по определенным правилам. Знания о модели должны быть скорректированы с учетом тех свойств объекта-оригинала, которые не нашли отражения или были изменены при построении модели. Мы можем с достаточным основанием переносить какой-либо результат с модели на оригинал, если этот результат связан с признаками сходства оригинала и модели.

Если же определенный результат модельного исследования связан с отличием модели от оригинала, то этот результат переносить неправомерно.

Существуют по крайней мере две точки зрения на результаты моделирования. Одна отталкивается от того, что при синтезе модели в нее закладываются такие связи, соотношения, которые уже известны исследователю (естественно, что неизвестные заложить в модель нельзя). Поэтому из модели нельзя получить новых знаний об объекте. В этом случае модель может выступать только как расчетный объект, на котором можно проводить численные эксперименты, в том числе в таких ситуациях, в которых сам объект или не существовал, или не существует. Вторая точка зрения на результаты моделирования исходит из того, что при конструировании в модель закладываются известные сведения (связи, соотношения) об элементах объекта, но они в соответствии со спецификой сложной системы могут в совокупности проявить качественно новые свойства, не присущие отдельным элементам. В этом случае математическое моделирование способно дать новые, до сих пор неизвестные знания об объекте. Второй подход к результатам моделирования более оптимистичен по сравнению с первым, он не ограничивает мысль исследователя, не сковывает его какими-то рамками, сохраняет надежду на новые знания, на научный и практический прогресс, наполняет процесс моделирования более глубоким смыслом.

Моделирование — не единственный источник знаний об объекте. Процесс моделирования "погружен" в более общий процесс познания. Это обстоятельство учитывается не только непосредственно при построении модели, но и при завершении моделирования, когда происходит объединение и обобщение результатов исследования, получаемых на основе многообразных средств познания.

Моделирование — циклический процесс. Это означает, что за первым трехуровневым циклом может последовать второй, третий и т.д. При этом знания об исследуемом объекте расширяются и уточняются, а исходная модель постепенно совершенствуется. Недостатки, обнаруженные после первого цикла моделирования, обусловленные малым знанием объекта и ошибками в построении модели, можно исправить в последующих циклах.

Можно выделить несколько этапов, присущих процессу моделирования в любой сфере:

1. Постановка проблемы и ее качественный анализ.
2. Построение математической модели.
3. Математический анализ модели.
4. Подготовка исходной информации.
5. Численное решение.
6. Анализ численных результатов и их применение.

Если невозможно в короткий срок разработать новые алгоритмы и программы, исходную постановку задачи и модель упрощают: снимают и объединяют условия, уменьшают число учитываемых факторов, нелинейные соотношения заменяют линейными т.д.

### **Литература:**

1. Кафаров В.В. Математическое моделирование основных процессов химических производств / Кафаров В.В., Глебов М.Б. — М.: Высш. шк., 1991. — 400с.
2. Закгейм А.Ю. Введение в моделирование химико-технологических процессов. — М.: Химия, 1982. — 286с.