

## МУЛЬТИМАСШТАБНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КАК ОСНОВА РЕСУРСО- И ЭНЕРГОСБЕРЕЖЕНИЯ В ХИМИЧЕСКОЙ ПРОМЫШЛЕННОСТИ

Меньшутина Н.В.

*Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева,  
125480, Москва, Героев Панфиловцев, д. 20  
e-mail: chemcom@muctr.ru*

Развитие цифровых технологий для химической промышленности – это условие сохранения конкурентоспособности российских химических предприятий на мировом уровне. Цифровые технологии развивают основные цели и подходы кибернетики химико-технологических процессов, такие как математическое моделирование и системный анализ, основы которых развивались под руководством академика В.В. Кафарова<sup>1</sup> в конце 20 века. Системный анализ позволяет рассмотреть процессы на разном масштабе: 1 – наноуровень (химическое взаимодействие, структура материала); 2 – микроуровень (исследование диффузии тепло- и массообменных процессов и явлений); 3 – макроуровень (моделирование отдельных аппаратов, технологических схем и работы предприятия в целом). Каждый уровень требует соответствующих подходов мультимасштабного моделирования, позволяя оптимизировать процессы на каждом уровне, что приводит к ресурсо- и энергосбережению в целом.

На примере производства инновационного материала аэрогеля<sup>2</sup>, который называют «твердым дымом» и который используют как композиционный материал в ракето-, самолетостроении, для теплоизоляции в Арктике, показано использование мультимасштабного моделирования. Показана взаимосвязь моделей на основе молекулярной динамики, компьютерных клеточно-автоматных моделей, механики гетерогенных сред, а также макроподходов к проектированию технологических схем, предприятий, автоматизации, логистики, экологии, ресурсосбережения.

### Литература

1. Мешалкин В. П. Экспертные системы в химической технологии. М.: Химия, 1995. – 368 с.
2. Меньшутина Н.В., Матасов А.В. Современные информационные системы хранения, обработки экспериментальных данных для предприятий химической и смежных отраслей. М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2011. – 308 с.

*Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках базовой части Государственного задания №10.4658.2017/ВУ.*