

数学建模助力哈尔滨工业大学化工专业“新工科”建设

胡兴诚, 周欣*, 徐平*

哈尔滨工业大学化工与化学学院, 哈尔滨 150001

摘要: 在教育部“新工科”建设背景下, 如何提升学科融合再出新是教学改革的关键。以哈尔滨工业大学化工学院开展的“新工科”探索实验为例, 介绍数学建模与化工专业的融合对本科学生的科研能力带来的提升。并以2022年全国大学生数学建模竞赛的参赛实例, 阐述学科交叉融合的具体实施过程以及如何准备数学建模竞赛。

关键词: 数学建模; 化工; 新工科; 学科交叉融合

中图分类号: G64; O6

Mathematical Modeling Facilitates the Construction of “Emerging Engineering Education” in Chemical Engineering Major at Harbin Institute of Technology

Xingcheng Hu, Xin Zhou *, Ping Xu *

School of Chemistry and Chemical Engineering, Harbin Institute of Technology, Harbin 150001, China.

Abstract: Under the background of the Ministry of Education’s construction of “Emerging Engineering Education”, how to enhance interdisciplinary integration is the key to the teaching reform. Taking the “Emerging Engineering Education” exploration experiment as an example, we introduce the enhancement of undergraduate students’ scientific research ability by the integration of mathematical modeling with chemical engineering majors. We also take the China Undergraduate Mathematical Contest in Modeling (CUMCM) in 2022 as an example to elaborate the specific implementation process of interdisciplinary integration and how to prepare for the mathematical modeling competition.

Key Words: Mathematical modeling; Chemical engineering; Emerging engineering education; Interdisciplinary integration

1 “新工科”背景下推动学科交叉融合的重要性

高等工程教育在我国高等教育中占有重要的地位。深化工程教育改革、建设工程教育强国、加快工程教育改革创新, 对服务和支撑我国经济转型升级有重大意义^[1]。2017年2月, 教育部召开高等工程教育发展战略研讨会并深入探讨了“新工科”的内涵特征与建设路径, 针对新型工程领域科技人才的快速培养, 推出高校“新工科”教学改革计划。“新工科”教改要深刻把握三个要点: 新专业、专业的新要求、交叉融合再出新^[2]。与新专业相比, 传统工科专业需要在专业改革上增加深入的思考和实际的行动。哈尔滨工业大学(以下简称“哈工大”)化工学科成立于20世纪30年代, 具有悠久的历史和丰富的学术成果。为了满足未来产业需求, 加快培养新兴领域工程科技人才, 专业培养

收稿: 2023-03-08; 录用: 2023-04-10; 网络发表: 2023-05-10

通讯作者, Emails: zhoux@hit.edu.cn (周欣); pxu@hit.edu.cn (徐平)

基金资助: 哈尔滨工业大学教学改革项目(22024C); 哈尔滨工业大学虚拟仿真实实践教学项目(223312); 2022年黑龙江省规划办重点课题研究项目(220D0A)

模式的转型和升级是必要的。针对“新工科”背景下交叉融合再出新的要点,笔者以哈工大化工专业“新工科”建设为例,通过具体的案例介绍如何将数学建模与化工专业交叉融合,探索培养学生新机制及推进“新工科”发展的有效方法。

2 数学建模与化工学科的交叉融合再出新

数学建模是利用数学语言对实际问题予以定性或者定量描述的过程,是将复杂问题抽象化、简单化的过程。参加数学建模竞赛能拓展大学生的科研视野,培养创造精神及合作意识,极大地提升大学生的综合素质。同时,数学建模竞赛作为一座连通数学与其他多门学科的桥梁,其选题一般源自科学和工程技术、人文和社会科学等领域经适当简化处理后的实际问题,具有很强的灵活性与应用性。学生通过对竞赛问题的讨论和分析,搜集资料,提出经得起实践检验的新观点、新思路、新方案来解决问题,是培养大学生创新意识的重要途径^[3,4]。这类竞赛一般要求参赛者根据题目的要求,完成一篇涵盖模型的假设,模型的建立与求解,模型的分析与检验,模型的评价、改进和推广等内容的论文,参赛过程几乎模拟了科学研究的一般过程,可以促进大学生分析解决问题的能力 and 抽象化思维,对培养大学生知识的融会贯通能力、计算机软件的综合应用能力、专业论文的撰写能力、团队协作和交流能力有重要的意义。要想把化工专业学懂、学透,就必不可少需要掌握数学建模的知识,尤其是数学建模中涉及的极限思想、发散思想与类比思想的综合应用,对化学相关专业的学习大有益处^[5,6]。

掌握一定数学建模的基础,有利于深化对化学专业理论知识的消化和应用理解。在物理化学课程中学习吸附热力学相关的内容时,会涉及根据吸附等温线曲线判断吸附类型(Langmuir吸附、Freundlich吸附、Temkin吸附等),从而推测吸附的机理(化学吸附、物理吸附)。然而,在实际的科研工作中,由吸附热力学的实验得到的往往是非连续的数据点。比如,寻找具有高稳定性、动力学快、安全性高且成本低的储氢材料是氢氧火箭发动机研发的重点问题。而在测试不同材料吸附氢及储存氢的过程中,吸附曲线的绘制是不可避免的,要想绘制出吸附曲线并预测其吸附性质,必须对数据进行拟合。拟合算法就是一种重要的数学模型,其核心思想是建立一系列数学关系明确、形式简洁的曲线,从而对原本复杂的问题予以简化的描述,但是并不要求拟合曲线经过每一个样本点,只需保证误差足够小即可。如Sun等^[7]在研究KOH改性的生物质碳吸附剂对重金属 Cd^{2+} 的吸附时,对于不同吸附剂浓度下的平衡吸附量数据分别进行了Langmuir拟合与Freundlich拟合,而要想判断吸附类型,则需要考察拟合曲线的 R^2 值。 R^2 值越高,说明拟合效果越好,从而推测该吸附的吸附机理。可见,即使是教材结论的最基本应用也会涉及线性拟合这种数学建模最常使用的手段,而线性拟合是机器学习的一种基本预测模型。

掌握一定数学建模的基础,有利于运用数学思想解决化工与化学的问题。例如,C4烯烃作为一种重要的化工原料被广泛应用于化工产品及医药生产。2021年全国大学生数学建模竞赛B题以乙醇耦合制备C4烯烃为背景,要求通过对催化剂组合(即:Co负载量、Co/SiO₂和羟基磷灰石(HAP)装料比、乙醇浓度的组合)进行设计,结合温度对C4烯烃的选择性与收率的影响,探索乙醇耦合制备C4烯烃的最佳工艺条件。该类型实验通常出现在本科毕业论文中,因其考虑的变量较多,学生通常需要2-3个月的时间才能完成相关实验,通过有限的的数据得到定性的结论。但是这种结论主观性比较强且没有充实的数据,其结论往往不能横向或纵向推广,借鉴意义不大。但是如果利用数学建模手段,建立机器学习模型,我们可在大量实验结果基础上,得出C4烯烃选择性、乙醇转化率分别与温度、Co/SiO₂和HAP的装料比、Co负载量以及乙醇进料浓度等因素的定量关系。这些定量数据要比单纯通过少数实验结果总结出的定性结论更可靠,其结论也更容易向其他反应进行扩展。又例如,数学建模可用于描述精馏塔中进料热状态、回流比、操作压力等参数对能耗的影响,明确各变量的权重,从而优化化工生产设计。在优化设计过程中,通常需要考虑以下步骤:(1)建立热平衡、传质平衡数学模型;(2)以能耗、生产效率为目标函数对变量进行多元回归分析;(3)计算各变量的

敏感度指数, 确定权重; (4) 对目标函数求解优化; (5) 实验与验证。Li等^[8]提出了采用多元遗传算法对萃取精馏分离乙酸乙酯/乙醇/丁酮共沸混合物工艺的经济成本和气体排放指数进行了优化, 并以操作压力和夹带剂流量作为变量。其优化改进结果与原工艺相比, 气体排放成本和运行成本分别降低了20.94%和10.06%, 火用效率提高了8.16%, 并通过比较系统中不同控制结构在扰动作用下的能量消耗, 发现CS2结构能耗低于CS1结构。由此可见, 合理利用数学建模, 可以在一定程度上指导化工、化学实验中的数据分析, 为科研提供一种新的思路。

综上所述, 数学建模是一种将数学方法与技巧应用于解决复杂的实际问题的过程。对于化工专业的学生而言, 通过学习数学建模可以帮助理解、分析和优化化工生产过程、培养创新和工程实践能力、提高学术研究的技能水平以及促进跨学科知识的交叉应用。

3 哈工大化工与化学学院在数学建模与化工专业融合中的探索

利用数学建模手段解决问题需要大量的实验数据。但是普通的实验得不到如此多的实验数据, 因此开展教改实验, 是化工专业实现数学建模与化学交叉融合的工作重点。在传统的本科生有机化学实验中, 如重结晶提纯苯甲酸和樟脑、阿司匹林的合成、环己酮的制备等实验, 甚至研究生在做一些合成催化剂的高级实验时, 其合成条件及产物都是有明确结论的。在实践教学过程中, 大多数实验局限于验证功能, 没有给予学生发挥主观能动性的机会, 这样的实验只能促进实验技能的提升, 和真正的科研相差甚远, 从而难以实现创新能力和工程实践能力的培养。

改进实验, 可以尝试让一个年级的学生同时做一个实验, 通过改变初始条件获得实验变量和产率以及效率的关系, 然后通过数学建模的知识, 提出合理的假设, 建立适当的数学模型予以描述, 利用机器学习方法进行拟合, 从而预测哪些特征变量可以对实验结果以及材料性质有明显的作用, 得到新的实验描述符, 让学生从“知道如何做一个实验”变为“知道如何做真正的实验”。

当然, 在分析实验结果之前, 学生需要提前学习和数学建模有关的知识。哈工大化工与化学学院为了支持学生利用数学建模手段解决科学问题, 在本科阶段开设了“化学中的机器学习”课程和“机器学习虚拟仿真”实验, 这些课程以Python语言为基础, 向学生介绍了当今最流行的机器学习基础知识和应用, 通过代码实现数学分析, 以及通过数据为实验结果提供预测和定量结论。而在利用数学建模得到相应结论后, 引导学生运用经典理论对求解结果进行合理的解释, 从而加强后续的分析能力。例如: 在化工生产设计优化中建立的传质平衡模型, 后续要利用质量守恒原理和传质动力学理论进行相应的解释和验证。另外, 学院还在每年7月份暑期组织对数学建模感兴趣的同学成立建模小组, 帮助学生了解数学建模竞赛的全过程, 让同学们了解数学建模并知道如何用数学建模知识应用在化工基础实验中。实验改革过程不是一朝一夕能完成的, 需要学院从大局出发, 整合学院教学资源, 才能让学生在进入科研工作之前掌握真正的本领。

4 从竞赛参赛实例分析学科交叉融合的具体实施

工欲善其事, 必先利其器。化学实验是化工专业学生的必备专业技能, 但是在得到数据之后如何建立合理的数学模型则需要进行专业的培训以及参加竞赛才可以得到相应能力的锻炼。数学建模竞赛是一种非常好的以赛代练掌握数学建模手段的方法, 下面作者以带队参加2022年全国数学建模竞赛为例介绍如何参加比赛以及赛前需要做哪些准备和需要什么样的知识储备。

全国大学生数学建模竞赛采取通讯竞赛方式, 在竞赛题目发布后, 需在76小时内向竞赛组委会提交一份包含问题分析、模型假设、模型的建立与求解、模型的分析与检验、模型的改进与推广等板块的论文作为评阅依据。整个竞赛可以分为赛前准备阶段、竞赛答题阶段、赛后总结阶段。下面笔者将结合2022年全国大学生数学建模竞赛的参赛实例阐述数学建模如何与化工交叉融合。

4.1 赛前准备阶段

团队在赛前需要进行充分的沟通与交流, 相互了解彼此的优势, 以尽快明确分工, 例如队长A负

责数学建模、队员B负责计算机编程、队员C负责论文写作。在确定各自分工后,就需要展开关于数学建模理论、数学建模软件和论文写作技巧的学习。

数学基础是化工专业的基石,在化工实践探索中涉及的各种工艺计算和数据处理,例如各种热量、物料衡算、动力学模拟、扩散传质机制的模拟等都离不开数学基础,因此数学基础对化工起着重要支撑作用,这在以往文献中也有报道^[9,10]。参加数学建模竞赛通常需要学生掌握的数学基础主要包括:微积分、线性代数以及概率论和数理统计。数学建模理论主要包括评价类模型如层次分析法、TOPSIS法等;预测类模型包括如时间序列分析、灰色预测、拟合算法等;分类模型包括如Logistic回归、Fischer判别分析等;此外还有方程模型、规划模型、运筹类模型等等。在“互联网+”和大数据时代下,团队可充分利用在线优质教育资源展开学习,例如:大学生慕课、bilibili网站等。在利用数学建模对问题进行求解时,可以从以下几个方面来评价所选方法的合理性,包括模型的可靠性、精度、简易程度以及可扩展性,以确保所建立的模型能够准确描述所要解决的实际问题,并且易于实现和使用。

在数学模型建立之后,就需要借助现代计算机技术对模型进行求解,因而学习使用数学及相关的计算机软件,培养计算机软件的综合应用能力是必不可少的。例如:常用的编译类软件:Python、C++、Java等;求解多元线性回归、聚类算法、时间序列分析等模型时常用的统计分析类软件:Stata、SPSS、SAS等;求解微分方程、灰色关联分析等模型时常用的数值计算类软件:Mathematica、Matlab、Mathtool等;求解线性规划、非线性规划等模型常用的数值规划类软件:Lindo、Lingo等。另外,在论文写作的过程中,涉及到数据的可视化操作时,除了采用Python、Matlab等编程软件进行图像绘制,还可能用到专业的绘图软件如Origin、Visio等。值得注意的是,在教研工作中,需要让学生明确各类软件的局限性,合理选择软件进行求解。比如,SPSS软件作为一种常用的统计分析工具,在解决化工生产问题中存在其局限性。例如:面对大规模的数据分析问题,需要对数据的准确性和完整性进行评估,如果不对数据进行预处理,使数据存在缺失或误差,会影响最终求解结果的准确性。

关于论文写作技巧主要是学习文献检索方法、明确写作格式、积累写作模板。数学建模竞赛的论文即答卷,是竞赛评定成绩的唯一依据,是竞赛活动成果的集中表现。因此,竞赛论文写作是对专业论文撰写能力的考验,可促进大学生文献检索及综述能力的发展^[11]。面对复杂的实际问题,参赛队伍仅有76小时的时间作答,因此前期需要进行大量的文献检索,参考已有研究从而为问题的解决提供思路 and 方向。在竞赛过程中,不仅要会熟练地检索中文数据库如CNKI、万方等,而且要学会检索英文数据库如Web of Science、Elsevier Science、EI工程索引等,并对文献进行整理、综述,提炼出可以对本项研究起到支撑作用的要点。此外,由于文字表述清晰程度以及写作格式都将纳入阅卷评分的范围,所以赛前关于竞赛论文撰写的培训也潜移默化地增强了科研论文的写作规范意识。因此,竞赛论文写作,是科技论文写作不可多得的前期训练,能使得撰写专业论文的能力得到有效提升。

4.2 竞赛答题阶段

赛题公布后,队长首先组织队员针对每道题目进行问题的初步分析,以及相应的资料查询,讨论解题思路,综合评估每道题目的难度和解决方案的可行性,最终选择了C题——古代玻璃制品的成分分析与鉴别。题目的背景是基于古代玻璃制品的化学成分分析与类型鉴别,要求团队根据已提供的文物分类信息和相应的主要化学成分所占百分比,分析不同类型的文物表面化学成分分布的规律以及对未知类型的文物进行鉴定。该题目属于考古学领域的文物化学成分分析与鉴定的问题,与化学专业息息相关,为化工与化学专业的学生提供了广阔的创新空间。

例如,问题一要求对这些玻璃文物的表面是否风化与其玻璃类型(高钾、铅钡)、纹饰(A, B, C)和颜色(蓝绿、浅蓝等9种颜色)的关系进行分析,由于因变量和自变量均为无序定性变量,因此考虑使用 χ^2 检验。根据因变量、自变量类别的个数、样本容量以及期望频数格子分布等因素,通过Python计算 χ^2 检验统计量的过程值可知,对于建立表面风化-纹饰、表面风化-颜色相关性分析的 χ^2 检验应采

用Pearson卡方值，而对于建立表面风化-玻璃类型相关性分析的 χ^2 检验应采用Yates校正卡方值，计算得出三者对应的 p 值分别为0.083888、0.50665、0.011328，说明纹饰和颜色对于文物表面是否风化没有显著性影响，而玻璃类型对于文物表面是否风化存在显著性影响，即文物表面的风化情况对于不同玻璃类型有显著差异性。通过绘制表面风化与玻璃类型的交叉图，如图1所示，可知铅钡玻璃中表面风化的比例为70%，高钾玻璃中表面风化比例为33.3%，前者明显高于后者，也定量说明了与高钾型相比，铅钡型玻璃更容易发生表面风化。

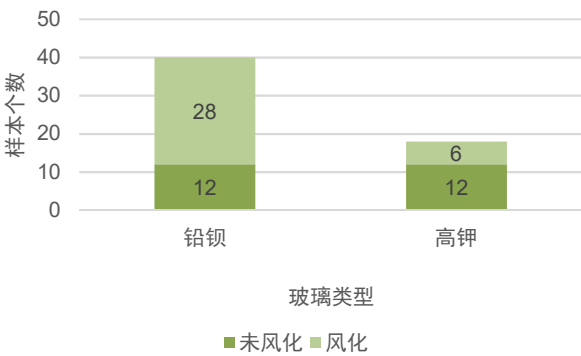


图1 表面风化与玻璃类型的交叉图

又例如，问题二要求依据附件数据分析高钾玻璃、铅钡玻璃的分类规律，对于每个类别选择合适的化学成分对其进行亚类划分，根据“物以类聚”的基本思想，可建立系统聚类模型，其流程是：采用组间平均连接法，使用欧式平方距离测量样本之间的距离，绘制出相应的聚类谱系图，但是根据谱系图直接确定聚类数量具有一定的主观性，会使得模型解释力下降，因此可根据肘部法则，计算各个类畸变程度之和，进而求出所有类的畸变程度(即聚合系数 J)，并通过聚合系数折线图可大致估计出最优的聚类类别数，依此对模型进行优化。

在求解模型时，利用SPSS软件对高钾型玻璃建立系统聚类模型，其生成聚类谱系如图2所示。从谱系图红线标注的位置可以看出，若类间平均距离越小，各个样本的独立性越强，其越难进行分类，

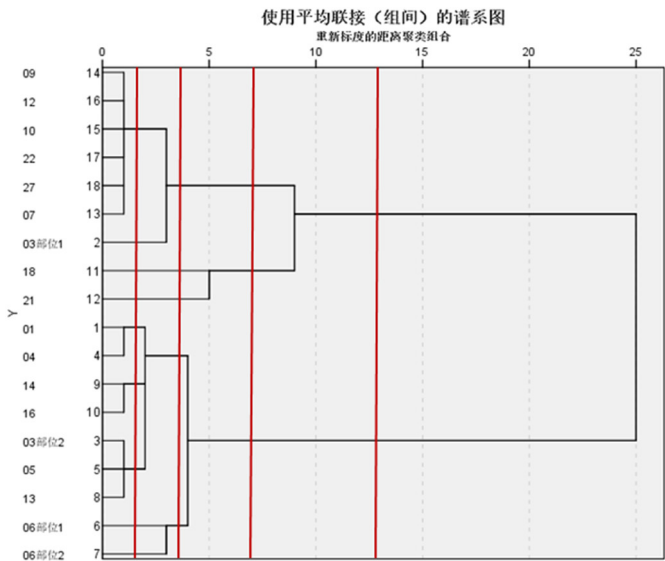


图2 聚类谱系图

电子版为彩图

故聚类类别个数越多；相反，若类间平均距离越大，则涵盖样本数越多，其聚类类别个数越少。显然，距离过大或过小都不是期望得到的结果，且人为选定距离进行类别划分存在一定主观性，会使得聚类模型解释力下降，因此我们将SPSS软件中计算得到的各类聚合系数 J 值进行数据处理后，绘制出聚合系数折线图，如图3所示。

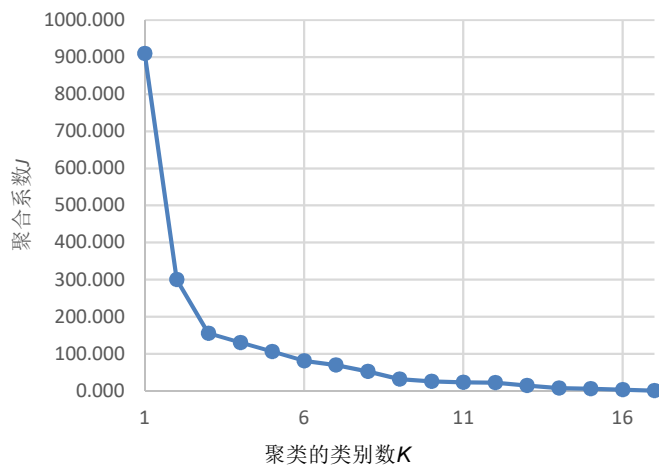


图3 聚合系数折线图

从图3中可以看出， K 值从1到3时，畸变程度变化最大。超过3以后，畸变程度变化显著降低，折线的下降趋势趋向平缓，因此可认为肘部就是 $K = 3$ ，故可将高钾玻璃的亚分类的类别数设定为3，其划分结果如表1所示。

结合各采样点处化学成分含量的描述性统计结果和该点是否发生风化，可归纳出亚类划分的方法如表2所示。

表1 高钾玻璃亚类划分

高钾玻璃	文物采样点
类别1	03部位1， 07， 09， 10， 12， 22， 27
类别2	18， 21
类别3	01， 03部位2， 04， 05， 06部位1， 06部位2， 13， 14， 16

表2 高钾玻璃亚类划分依据

高钾玻璃	是否风化	SiO ₂ 含量	K ₂ O, CaO, Al ₂ O ₃ 含量	CuO, Fe ₂ O ₃ 含量
类别1	风化	高	低	很低
类别2	未风化	较低	较高	低
类别3	未风化	低	高	低

因此，利用相同的策略也可以解决铅钡型玻璃的亚类划分问题。

4.3 赛后总结阶段

由于比赛时间紧凑，参赛者的能力也有限，在答题过程中难免会出现考虑不周全的情况，比如有的团队理解题意不足，没有抓住和解决主要矛盾，导致捡芝麻丢西瓜；有的团队对于某个子问题建立的模型不够准确，导致求解结果误差大，牵一发而动全身；有的团队由于时间匆忙，求解模型之后没有对模型进行灵敏度分析和稳定性检验，顾头而不顾尾；有的团队甚至没有按时完成赛题，

寥寥数笔就草草收尾。因此团队在赛后应该积极开展针对竞赛全过程的复盘与反思,阅读当届优秀获奖论文并与自己队伍的参赛作品进行对比,找差距、找短板,这样积累了比赛经验,更有益于下次参加数学建模竞赛时的发挥与表现,类似的竞赛还有美国大学生数学建模竞赛(MCM/ICM)、“深圳杯”数学建模竞赛、东三省数学建模竞赛等。本次比赛,作者带的队伍获得了两项全国数学建模竞赛黑龙江省赛区一等奖。参加比赛的过程是紧张的,但是比赛为学生打开了一扇门,让他们知道了如何从纷杂的实验现象中看到事物的本质,不仅培养了学生的科研素质,也为撰写科研论文及规划科研路线提供了非常好的实践机会。同时,在比赛后,几名组员在各自专业实验或实践中体现了超出普通学生的科研能力,在工程实践创新、知识融会贯通、计算机软件综合应用、专业论文撰写以及团队交流与协作等方面都得到了提高。这说明,适当的数学建模竞赛培训以及竞赛对化工专业“新工科”建设是非常有利的,这种学科之间的交叉融合也为哈工大在学校新百年培养更多的学术大师以及工业巨匠奠定了基础。

5 结语

通过数学建模与化工学科的交叉融合,让化工与化学专业的学生掌握一定数学建模的基础,有利于深化对化学专业理论的知识消化和应用理解,同时有利于运用数学思想解决化工与化学的问题。通过开展活跃的教改实验,可以让学生从“知道如何做一个实验”变为“知道如何做真正的实验”,并且通过参加数学建模竞赛“以赛代练”,从而培养学生的工程实践能力和创新能力,对“新工科”教学改革有重要的指导意义。

参 考 文 献

- [1] 朱宝忠,孙运兰,陈海飞,于海龙,刘恩海,陈九玉. 创新创业理论与实践, **2022**, 5 (23), 76.
- [2] 马陆亨. 中国高等教育, **2022**, No. 12, 9.
- [3] 张泽旺,睦平,谢雯瑜. 实验室科学, **2016**, 19 (2), 232.
- [4] 吴小涛,周春燕,朱婧巍,易凡茹,吴育联. 黄冈师范学院学报, **2021**, 41 (3), 109.
- [5] 王欣彦,王立鹏. 科技创新导报, **2011**, No. 16, 172.
- [6] 翟忠源,陈立辉,朱佳真,李红海. 山东化工, **2022**, 51 (1), 190.
- [7] Sun, K.; Tang, J.; Gong, Y.; Zhang, H. *Environ. Sci. Pollut. Res.* **2015**, 22 (21), 16640.
- [8] Li, C.; Zhong, L.; Wang, Y.; Sun, D.; Li, Y.; Cui, P.; Shan, B.; Zhu, Z.; Li, X. *J. Clean. Prod.* **2022**, 379, 134848.
- [9] 李慧芳,张爱华,成春春,马磊,付华,焉海波. 广州化工, **2020**, 48 (8), 164.
- [10] 赵俊梅,李晓鸿,郭雷,欧以满,何叶. 山东化工, **2016**, 45 (22), 142.
- [11] 王义康. 教育探索, **2021**, No. 5, 45.