

A. M. Вайнберг

Математическое моделирование  
процессов переноса.  
Решение нелинейных краевых задач

וינברג אלכסנדר מרדכי

הגדית תהליכי מעבר באמצעות מחשב.  
פורה של בעיות שפה לא-ליניאריות.

Moscow - Jerusalem  
ISBN 965-555-273-X

A. M. Bahnheper  
Использование нелинейного метода

$$A = \begin{pmatrix} C_1 & B_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ A_2 & C_2 & B_2 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & A_3 & C_3 & B_3 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & A_{n-1} & C_{n-1} \\ & & & & & & B_{n-1} \\ & & & & & & C_n \end{pmatrix}$$

Moscow - Jerusalem,

ISBN 965-555-273-X

**А. М. Вайнберг**

Математическое моделирование  
процессов переноса.  
Решение нелинейных краевых  
задач.

**Weinberg A.M. (Vainberg A.M.).**

Computer-aided simulation of transfer processes.  
Solving of a nonlinear boundary-value problems.

**וינברג אלכסנדר מורדכי**

הדמיית תהליכי מעבר באמצעות מחשב.  
פתרון של בעיות שפה לא-LINIAROT.

Москва-Иерусалим, 2009 г.  
Moscow-Jerusalaem, 2009 year.

## **АННОТАЦИЯ.**

Эта книга посвящена некоторым вопросам методов математического моделирования (МММ), а именно созданию эффективных и быстро сходящихся методов решения **нелинейных** начально-краевых задач тепло – и массопереноса для нестационарных одномерных задач или для двумерных стационарных задач. Автором разработан и используется один из алгоритмов решения нелинейных задач с применением метода Ньютона-Канторовича совместно с методом сеток и методом «прогонки», названный нами методом НКС.

Важно отметить, что методу Ньютона-Канторовича сопоставлено вычисление дифференциала Фреше, что облегчает понимание и применение этой модификации метода Ньютона-Канторовича к краевым и начально-краевым нелинейным задачам уравнений математической физики.

Рассмотрены математические модели сложных реальных тепло- и массообменных процессов химической технологии, приводящие к нелинейным краевым задачам и получены их решения численными методами.

В этом ряду рассматриваются также нелинейные задачи, связанные с вопросами кристаллизации из расплавов. Они известны в математике как задачи с подвижной границей или просто задачи Стефана. Эти задачи, в частности, возникают при моделировании процесса получения гранулированных минеральных удобрений из расплавов и получению стекла из плавящейся шихты.

В настоящее время появилась новая область знаний «синергетика» [153], которая рассматривает нелинейные краевые задачи и связанные с ними новые эффекты. Эта новая область знаний выходит даже за пределы математики и физики и смыкается с такими областями

знаний, как экономика, психология, социология, философия и медицина.

В нашей книге не рассматриваются детально вопросы сходимости, устойчивости и точности предлагаемых аппроксимационных схем – эти вопросы подробно рассматриваются в ряде доступных для русскоязычных читателей специальных монографий:

Р. Рихтмайера и К. Мортона [87], А.А. Самарского [92], С.К. Годунова и В.С. Рябенького [94, 99] и др.

На основе созданного на разных языках программирования программного пакета «КНУТ» проведены расчёты разнообразных линейных и нелинейных задач, показавшие высокую эффективность предложенного подхода даже для уравнений Навье-Стокса.

Показано, что применяемый подход годится также для нелинейных краевых задач с разрывными начальными условиями. Представляет интерес, насколько можно расширить класс нелинейных задач, решаемых методом NKS.

Книга может быть полезна студентам старших курсов и аспирантам, изучающим элементы курса «Прикладная математика» и курса «Математическое моделирование процессов и аппаратов».

Специально для таких читателей монография снабжена предметным указателем по использованным химическим и математическим терминам. Кроме того, в приложении имеется CD – ROM с элементами использованных программ и сайтом автора по системе DELPHI – который назван «My DELPHI».

## THE ABSTRACT.

This book is about methods of mathematical modeling (MMM). The author analyzed the area of efficient and quickly convergent methods to solve nonlinear initial-boundary value heat and mass transfer problems used to solve non-stationary univariate problems or two-dimensional stationary problems as well. The author developed and used an algorithm to solve the nonlinear problems that he called the NKS method. This algorithm is based on the Newton-Kantorovich method, the method of the nets and a "shuttle" or a "sweep" method.

It is important to note that Newton-Kantorovich method is used with comparison to calculation of the Freshe differential that relieves understanding and applying of this Newton-Kantorovich method modification to an initial-boundary value nonlinear problem of the mathematical physics equations.

In this book the author analyzed mathematical models of complex real heat and mass transfer processes of chemical technology using nonlinear boundary-value problems and received their solutions by numerical methods.

In this book the author analyzed nonlinear problems, connected to processes of crystallizations.

In Applied Mathematics such problems called problems with a rolling border or simply Stefan problems. These problems are used in mathematical.

At present appeared the new area of expertise "sinergetica", which considers the nonlinear problems and connected with them new effects. This new area of expertise leaves for limits mathematicians even and

physicists and closes with such area of expertise, as economy, psychology, sociology, philosophia and medicine.

In this book the author does not analyzed details of convergence, stability and accuracy of proposed methods of approximation. This information in Russian could be found in the following monographs:

R. Rihtmayer and K. Morton [87], A.A. Samarsky [92], S.K. Godunov and V.S. Ryabenikogo [94, 99].

The developed numerical methods were implemented in the software package called "KNUT". That package demonstrated high efficiency in solving a variety of linear and nonlinear problems including the Navier–Stokes equations.

The author demonstrated that developed numerical methods could be used to solve singularly perturbed boundary value problems. Further research could be conducted to apply the NKS method to solving other types of nonlinear problems.

This book could be used by students studying "Applied mathematics" and "Mathematical modeling of the chemical engineering processes". To keep in mind such students the author included the technical and mathematical terminology glossary that has definitions of terms used in this book.

The elements of program code in DELPHI and author's website information are included on the CD that accompanies this book.

---

---

---

---



А.М. Вайнберг, май 1965 г.  
Конец 4-го курса мехмата МГУ

## Предисловие.

Характерной чертой современного этапа развития химической промышленности является создание новых производств наряду с увеличением единичной мощности агрегатов, их оптимизацией и интенсификацией. Для решения этой задачи широко применяются методы математического моделирования (МММ).

Базой для развития МММ в химической промышленности стали теоретические и экспериментальные исследования гидродинамики, тепло и массообмена, кинетики химических реакций и агрегатных превращений, исследования физико -

химических свойств наряду с бурным развитием вычислительной (дигитальной) и аналого – цифровой техники и совершенствованием методов и новых средств программирования.

Сочетание этих факторов позволило создать комплексы алгоритмов и программ для расчёта и оптимизации на ЭВМ ряда типовых процессов химической технологии.

Ещё в середине 20-го века многим физикам казалось, что все вопросы теплофизики уже понятны и нет более проблем на макроуровне.

Марком Ефремовичем Ивановым в его кандидатской диссертации было доказано, что процесс теплообмена в плёночных аппаратах обязательно должен учитывать и массоперенос.

Но, как всегда это бывает, неожиданно было обнаружено, что нелинейность мира серьёзно влияет на процессы переноса. Этими вопросами очень серьёзно начали заниматься только в конце прошлого века в одном из самых закрытых институтов СССР - в Институте прикладной математики им. М.В. Келдыша.

Эти новые явления – «Режимы с обострениями» стали главной составной частью новой области науки-«синергетики». Основу последней заложил член. кор. РАН С.П. Курдюмов.

Эта книга была задумана с целью помочь специалистам в области математического моделирования процессов нелинейного тепло - и массопереноса. Затем стало ясно, что она может оказаться полезной и для студентов и аспирантов, изучающих элементы курсов «Прикладная математика» и «Математическое моделирование

процессов и аппаратов химической промышленности».

Поэтому был добавлен обширный предметный указатель использованных в книге химических и математических терминов.

Решение нелинейных задач математической физики – область, довольно плохо изученная.

Достаточно часто нелинейные начально-краевые задачи решаются с помощью метода «Пикара». Этот метод очень стар и является, как правило, медленно сходящимся.

Мало того, что этот метод медленно сходится, он часто бывает не сходящимся, так как последующие итерации не являются сжимающими операторами.

Кроме того, наиболее часто после применения к нелинейной задаче метода сеток нелинейность задачи сводится только к нелинейности алгебраической системы уравнений и эта нелинейность разрешается с помощь метода Ньютона-Рафсона (совершенно ошибочно принимаемым за метод Ньютона-Канторовича).

В данной книге методично упор делается на применении более мощного метода второго порядка сходимости – метода Ньютона-Канторовича в сочетании с методом «сеток», названый нами методом «НКС».

Показано, что применяемый подход годится также для нелинейных краевых задач с разрывными начальными условиями.

К сожалению, сам автор метода Ньютона - Канторовича, Л.В. Канторович, не отметил (или не заметил), что его метод фактически опирается на вычисление дифференциала Фреше нелинейного функционала, порождаемого нелинейными задачами.

Он также не отметил, что при этом вычисление приближённого обратного оператора может быть найдено численно, например с помощью упрощённого метода Гаусса, который в современной литературе имеет название метод «прогонки» или метод «факторизации» [143].

При этом, несомненно очень велик вклад лауреата Нобелевской премии 1975 года Л.В. Канторовича в создании пути для решения нелинейных задач математической физики.

Применяемый для решения нелинейных задач метод дискретизации линеаризованного уравнения приводит к системе линейных алгебраических уравнений с трёхдиагональной матрицей. Такая система решается упрощённым методом исключения Гаусса.

Важно ещё отметить, что метод исключения для решения системы с  $N$  неизвестными требует для решения системы линейных уравнений  $N^3$  операций (где  $N$  – размер матрицы), а метод прогонки для трёхдиагональной матрицы требует только  $K^* N$  операций (где  $K$  – некоторое натуральное число).

Рассматриваемый в монографии алгоритм, основан на вычислении дифференциала Фреше нелинейного оператора, порождённого нелинейными начально-краевыми задачами для нелинейных уравнений математической физики. Этот подход более точно соответствуют духу идей решения нелинейных краевых задач методом «Ньютона-Канторовича» и, в конечном счёте, позволяет надеяться на более высокую (квадратичную), а в некоторых случаях даже на монотонную и квадратичную сходимость.

А главное, наши объяснения и примеры прологают простой путь применения метода Ньютона - Канторовича, что практически полностью отсутствует в работах знаменитого математика, автора этого метода, Л. В. Канторовича, который значительно опередил «компьютерный век», создав свой метод и давший практический эффект только в век компьютеров.

Эффективность предложенного автором подхода демонстрируется на решении большого количества разнообразных нелинейных задач для уравнений параболического типа.

Впервые представленный здесь алгоритм был предложен на конференции по математическому моделированию в Академгородке в 1973 г., а положительный результат был обнародован впервые на подобном же симпозиуме в 1975 г. в Академгородке под Новосибирском [84].

Затем был решён большой круг нелинейных задач процессов переноса. Например, сорбция окислов азота на мелкопористых сорбентах. В таких процессах, где коэффициент диффузии менялся нелинейно на несколько порядков.

Было решено уравнение Бюргерса, являющееся одной из разновидностей уравнений Навье – Стокса, и ряд других нелинейных и тестовых примеров, имеющих также и точное аналитическое решение.

Сложный характер протекания процессов химической технологии как в гомогенных, так и в гетерогенных системах, обусловленный взаимовлиянием конвективного переноса, тепло – и массопередачи, химического и агрегатного превращения затрудняет их экспериментальное изучение, вследствие чего такие численные

исследования часто проводятся только методами математического моделирования.

Математические модели таких процессов сводятся обычно к системам нелинейных начально-краевых задач, а их решение на ЭВМ позволяет изучить механизм протекания процесса, произвести расчёт и оптимизацию аппарата.

Название монографии может кого – то ввести в заблуждение, поэтому сразу необходимо оговориться, что под словом перенос в этой монографии понимается перенос тепла и вещества, а вопросами, связанными с магнитной гидродинамикой, акустикой, электромагнетизмом, диффузией нейтронов и упругими колебаниями мы в этой монографии не занимаемся.

В то же время автору было - бы интересно решить подобные проблемы, чтобы доказать, что метод НКС эффективно работает и в этих сложных случаях.

Однако мы имеем возможность отослать интересующихся этими вопросами читателей к очень интересной монографии известных американских специалистов [87], а также и к учебнику [89].

Тех, кто не имеет возможности ознакомиться с этими книгами, мы с удовольствием отправляем к достаточно популярной в России книге академика А.А. Самарского [92] и ряду других его книг, написанных им совместно с соавторами, и, прежде всего, к совместным его работам с академиком С.П. Курдюмовым.

Метод математического моделирования (МММ) состоит из ряда этапов:

- 1) построения математической модели;
- 2) разработки алгоритма её решения,

- 3) кодировки (разработки программы для ЭВМ или РС);
- 4) обработки и сравнения результатов расчета процесса и внесения, если необходимо, поправок в математическую модель;
- 5) расчёта и оптимизации аппарата.

Обычно, для проведения расчёта используют наиболее простую модель, позволяющую изучить поставленную проблему.

Допустим, что изучается плёночный тепломассоперенос. Предположим, что при этом отсутствует разрыв плёнки (из-за химической реакции, или по каким-либо другим причинам). Будем искать наиболее простую математическую модель для описания такого процесса. Такой моделью для стационарных процессов тепло - и массообмена в плёнке жидкости при двухфазном течении сред является одномерная диффузионная модель с эффективным коэффициентом диффузии. Однако её определение постулирует постоянство коэффициента продольной дисперсии вещества, коэффициента массопередачи и константы скорости химической реакции по высоте аппарата.

Исследования показали, что эти ограничения в общем случае очень существенны и поэтому подобные одномерные математические модели неприемлемы.

Но даже, если допустить, что такую модель можно использовать с переменными вышеперечисленными характеристиками, то, как показали исследования проф. химфака МГУ М.С. Сафонова, в плёнке жидкости коэффициент дисперсии должен быть

отрицательным. А это противоречит возможности использования подобной модели.

Ввиду этого необходимо разумное обобщение одномерной диффузионной модели, а, скорее всего, просто переход к двумерной модели.

И именно подобная двумерная турбулентная (точнее волновая) стационарная модель переноса впервые рассмотрена в 3-ей главе монографии.

В тех случаях, когда одна из фаз является дисперсной и в ней сосредоточено основное сопротивление тепломассопереносу, требуется привлечение более сложных моделей.

Нестационарное движение частиц дисперсной фазы в грануляционных аппаратах обуславливает изменение коэффициентов тепло - и массоотдачи во времени; изменяются также коэффициенты температуропроводности и диффузии дисперсных структур и физико-химические свойства твёрдой фазы.

До последнего времени отсутствовал строгий расчёт подобных процессов, особенно при изменении агрегатного состояния дисперсной фазы [задачи стефановского типа, т.е. задачи с подвижной (динамической) границей].

Приведено также обобщение задачи Стефана на объекты с шаровой симметрией, у которых термическая усадочная раковина расположена в центре шара.

Решение теоретических и практических вопросов расчёта указанных процессов и стали одним из предметов исследования данной монографии.

Хорошо известно, что уравнения Навье - Стокса наиболее полно и точно описывают гидро - и аэродинамическую обстановку. Но в аппаратах

химической промышленности эта система практически не применяется из-за сложности её решения.

Можно ли обойтись без учёта уравнений Навье - Стокса?

Наши практические расчёты позволяют в большинстве случаев утвердительно ответить на этот вопрос.

Один из моих бывших соавторов, мой дипломник В.К. Конторович, выполнил в 1990 г. расчёт уравнений Навье - Стокса. Расчёт был проведен в одном из простейших случаев, когда известно аналитическое решение нелинейного уравнения Бюргерса.

Здесь были получены очень интересные результаты, приведенные в Приложении В.

Сопоставление результатов расчёта системы Навье - Стокса с аналитическим решением позволяет сделать определённо положительный вывод в пользу метода НКС.

Расположение материала по главам дано в порядке возрастания сложности математических моделей: от уравнений с переменными коэффициентами переноса - к уравнениям с нелинейной их зависимостью; от задач для обыкновенных дифференциальных уравнений к задачам для уравнений в частных производных.

Автор прошел путь от новичка до специалиста по решению нелинейных краевых задач. Он решил поделиться своим опытом с теми, кто встал на этот трудный путь, и теми, кто уже идёт по нему.

В данной монографии мы рассматриваем только детерминированные математические модели.

В конце монографии приведен лишь частичный список источников, а также литературы для дальнейшего более подробного ознакомления с темой.

Достаточно подробный обзор нелинейных уравнений математической физики рассмотрен в работах А.Д. Полянина с соавторами [148-149].

Более полное знакомство с англоязычными публикациями на эту тему можно получить, используя интернет, вводя, например, в строке поиска следующее предложение:

«Solving of a nonlinear boundary - value problems»

или

«Decision of a nonlinear boundary - value problems»

или

«Solution of a nonlinear boundary - value problems».

Такой поиск позволяет разыскать даже кандидатские работы по этой тематике практически во всех областях знаний.

Ссылки в библиографии на источники, имеющие после порядкового номера ещё и символ е – указывают на английский вариант статьи или книги.

Более общий подход к математическому моделированию (с применением статистических методов) имеется в книгах А. Б. Пиуновского [117-117-е].

Автор будет благодарен за полезные замечания и советы, которые можно отправить на E-mail :

[vam20@yandex.ru](mailto:vam20@yandex.ru) (основной)  
[vam20007@gmail.com](mailto:vam20007@gmail.com)

## **Посвящение.**

*Посвящаю этот труд своей жене Л.Е Черкасской и своим детям:*

*Георгию, Михаилу и Леониду Вайнбергам в надежде, что они простят меня когда-нибудь за недоданные часы общения между нами. Ибо любое научное дерзание захватывает сильнее самой азартной игры.*

*A.M. Вайнберг*

## **Благодарности.**

Вот я и дошёл до самой приятной для меня странички монографии - страничке благодарностей.

Автор с удовольствием благодарит всех нижеперечисленных.

Хочется высказать слова благодарности бывшим сотрудникам лаборатории математического моделирования процессов химической технологии московского государственного НИИП института ГИАП и, прежде всего, моему бывшему начальнику лаб.24, к.т.н. В. И. Мукосею.

Он хорошо понимал, что важно не только решение поставленной задачи, но и научный рост сотрудников в виде публикации результатов и поиска необходимой научной литературы в библиотеке.

Также хочу поблагодарить А.Я. Раскина, помогшего мне в тяжёлые минуты раздумий над решением первой нелинейной краевой задачи для системы двух нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений четвёртого порядка, с которой я столкнулся в самом начале работы.

К. Красноборова, моего однокурсника по мех-мату МГУ, к.ф.м.н., который обратил внимание автора на то, что

кроме математики существует и вычислительная математика.

Вычислительная математика позволяет приближённо решать самые сложные нелинейные задачи, не имеющие аналитического решения.

Автор не может обойти словами благодарности Н.В Мануйлову, которая помогла автору в блиц освоении языка «PASCAL» и создании первоначальной копии пакета программ «КНУТ» на языке «PASCAL» вместо аналогичного пакета автора на языке PL / 1.

А также Ю. Наумова, который в критическую минуту поддержал автора, рискуя своим продвижением по административной лестнице; пусть земля ему будет пухом.

Благодарю также Н. Бирюкову за полезные минутные мысли по математическому моделированию процессов химической технологии, высказанные в 1970 г. и моего бывшего дипломника и соавтора из МИЭМ, москвича, выпускника МИХМа, кандидата экономических наук, В. К. Конторовича за всемерную поддержку в процессе подготовки книги.

Не могу не вспомнить добрым словом бывших сотрудников Вычислительного Центра ГИАП В. Борзова за попытки помочь в автоматизации процесса расчётов с помощью пакета «КНУТ» а также внимание к программе на языке PL / 1 со стороны Л. В. Сазоновой, которая в 80-90 -ые годы прошлого века обеспечивала правильный порядок и стабильность работы первой в СССР, официально купленной в США вычислительной машины – IBM - 370 / 148.

Наконец, особую благодарность выражая бывшему сотруднику, руководителю сектора лаб.24, к.т.н. Ю.А. Соколинскому, который дал мне собственное определение методов математического моделирования и поддержал идею публикации этой монографии.

Мне оказал большую услугу проф. Тель - Авивского университета Э. Кит, переведя на иврит название этой монографии.

Автор также благодарит своего друга, бывшего сотрудника лаб. 24 М. Иванова за уточнение перевода на английский язык некоторых элементов книги.

А.М. Вайнберг

# ОГЛАВЛЕНИЕ.

Заглавие, аннотация и фотография автора . . . . .	1
The Abstracts (аннотация на английском языке) . . . . .	4
Предисловие автора . . . . .	6
Посвящение и благодарности . . . . .	16
Оглавление . . . . .	19
Contents (оглавление на английском языке ) . . . . .	22
<b>Часть 1. Основные положения математического моделирования . . . . .</b>	<b>28</b>
1.1. Общая характеристика проблем переноса; стационарные и нестационарные процессы. . . . .	28
1.2. Классификация некоторых математических моделей	
1.3. Линейные и нелинейные краевые задачи переноса .	
1.4. Методологические и математич. аспекты моделирования . . . . .	35
1.5. Регулярные методы решения нелинейных краевых задач и метод НКС. . . . .	37
1.6. Алгоритмы решения краевых задач и их программная реализация . . . . .	39
<b>Часть 2. Математическое моделирование и решение     нелинейных краевых задач . . . . .</b>	<b>43</b>
2.1. Метод математического моделирования (МММ) – - определение Ю.А. Соколинского . . . . .	43
2.2. Метод Ньютона - Рафсона для поиска корней нелинейных скалярных уравнений . . . . .	46
2.3. Метод Ньютона-Канторовича – определение А.Вайнберга. Метод квазилинеаризации Беллмана- - Калабы для решения нелинейных операторных уравнений . . . . .	49
2.4. Решение нелинейных краевых задач для систем уравнений в частных производных методом НКС. .53	
2.5. Решение нелинейных краевых задач для систем	

обыкновенных дифференциальных уравнений . . . . .	56
<b>Часть 3. Нелинейные двухточечные краевые задачи для обыкновенных дифференциальных уравнений и систем уравнений. Плёночные выпарные аппараты . . . . .</b>	<b>60</b>
3.1. Краевые нелинейные двухточечные задачи . . . . .	60
3.2. Плёночные аппараты в химической промышленности	
3.3. Противоточные скрубберы МЭА очистки от CO <sub>2</sub> .	64
3.4. Одномерные модели плёночных аппаратов с эффективной диффузией . . . . .	70
3.5. Триумф и крах одномерных моделей с эффективной диффузией для плёночных аппаратов. . . . .	74
3.6. Моделирование плёночных выпарных аппаратов.	77
<b>Часть 4. Нелинейные краевые задачи для уравнений и систем уравнений в частных производных. . . . .</b>	<b>87</b>
4.0. Вместо введения . . . . .	87
4.1. Задача Стефана (краткий обзор) . . . . .	95
4.2. Нелинейные краевые задачи для процессов с фазовыми превращениями при непрерывной кристаллизации в аппаратах фильтрного типа . . . . .	97
4.3. Тепло - и массообмен при грануляции из расплавов минеральных удобрений в грануляционных башнях. .	
4.4. Обобщение задачи Стефана . . . . .	117
4.5. Решение нелинейных краевых задач для уравнений параболического типа методом НКС. . . . .	121
4.6. Сорбция окислов азота на мелкопористом гранулированном силикагеле . . . . .	128
4.7. Решение уравнения Бюргерса . . . . .	136

4.8. Постановка обратных задач для нестационарных процессов теплопереноса (Расчёт кипящего слоя) . . . . .	134
4.9. Программирование алгоритмов и практическое использование языков программирования . . . . .	137
4.10. Применение языков « С » , « Pascal » , «Фортран» и «Basic» в операционной системе DOS для моделирования процессов переноса. . . . .	139
4.10.1.Применение визуальных языков программирования в операционной системе Windows : Delphi, Visual Basic. . . . .	139
4.10.2. Обзор программных средств и разработка программных пакетов . . . . .	140
4.11. Тактика создания тестов для проверки алгоритмов решения нелинейных задач и анализ результатов; коррекция постановки задач . . . . .	141
<b>Часть 5. Приложения . . . . .</b>	<b>146</b>
Приложение А. Назначение пакета- программ «КНУТ» . . . . .	
Приложение Б. Тексты программы «КНУТ» на различных языках . . . . .	
Б.1 Фрагменты - программы КНУТ на языке «С» . . . . .	154
Б.2 Фрагменты - программы КНУТ на языке «Pascal»..	157
Б.3 Фрагменты - программы КНУТ на языке «PL / 1»..	159
Б.4 Фрагменты - программы КНУТ на языке «Delphi» .	160
Приложение В. Таблицы, блок-схемы и рисунки с результатами расчётов различных задач. . . . .	164
Приложение Г. Подробности некоторых вычислений (вычисление дифференциала Фреше и аппроксимация краевых условий). . . . .	171
Список литературы . . . . .	177
Предметный указатель. . . . .	189
Список обозначений . . . . .	197
Послесловие . . . . .	204
<b>Часть 6. CD – ROM с фрагментами программ и сайтом по системе Delphi автора монографии . . . . .</b>	<b>207</b>

## CONTENS

The Abstracts . . . . .	4
Foreword of authors . . . . .	6
Initiation and thanks . . . . .	16

<b>Chapter 1.</b> Fundamental decree of computer-aided simulation and solving nonlinear boundary-value problems . . . . .	28
---	----

1.1. Computer-aided simulation transfer processes . . . . .	28
1.2. Method Newton-Rafson for search roots of function ones variable . . . . .	
1.3. The Newton - Kantorovich method and quasilinearization method of Bellman- Colab's for solving nonlinear operation equations by of Method NKS . . . . .	
1.4. Solving nonlinear boundary-value problems for system differential equations . . . . .	35
1.5. Methdological and matematich. aspects of modeling . .	37
1.6. Algorithms of the decision of the boundary-value problems and their programme realization . . . . .	39

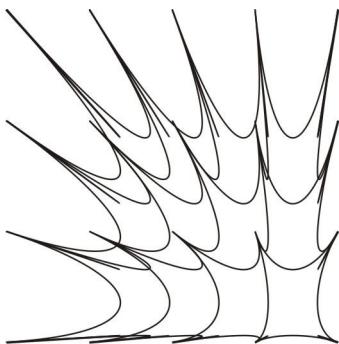
<b>Chapter 2.</b> Computer-aided simulation nonlinearly boundary – value problems. . . . .	43
--	----

2.1. Computer-aided simulation method - definition of <b>U.A. Sokolinskiy</b> . . . . .	43
2.2. The Newton-Rafson method for nonlinear equations. . . . .	46
2.3. The Newton-Kantorovich method - definition of <b>A.M. Weinberg</b> . . . . .	49
The quasilinearization method of Bellman - Colab's. for solving nonlinear operators equations. . . . .	49
2.4. Solving nonlinear boundary-value problems for system in partitional diferential. . . . .	53
2.5. Solving nonlinear boundary-value problems for system of ordinary differential equations . . . . .	56

<b>Chapter 3.</b> Computer-aided simulation for two-point boundary-value problems for systems of ordinary nonlinear second-order differential equations. . . . .	60
3.1. The two-point boundary-value problems. . . . .	60
3.2. Liquid Film Equipment Units in Chemical Engineering. . . . .	
3.3. Scrubber for carbon dioxide ( $\text{CO}_2$ ) purification with monoethanolamine ( $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-O-NH}_2$ ) and countercurrent absorption complicated by irreversible chemical reaction in the liquid phase. . . . .	64
3.4. One-dimensional model with effectively diffusivity. . . . .	70
3.5. Triumph and crash one-dimension modeling with effectively diffusity for films apparatus. . . . .	74
3.6. Computer – aided simulation of evaporative film apparatus . . . . .	77
<b>Chapter 4.</b> Nonlinear value-problems for equations and system equations in partitional derivatives. . . . .	87
4.0. Instead of introduction . . . . .	87
4.1. Stefan's Problem's . . . . .	95
4.2. Nonlinear boundary value – problems for process with phases transformation under continuous crystallization in apparatus wire die Heat and Mass Exchange under granulation from melet of mineral fertilizer tower of granulation . . . . .	97
4.3. Solving of nonlinear boundary value- problems for parabolic equations of methods NKS. . . . .	100
4.4. Generalization of the Stefan's problem. . . . .	117
4.5. Sorbtion of oxides of Nitrogen on finely porous of Selicagel . . . . .	121
4.6. Solving of Burger's equations. . . . .	128
4.7. Stating the inverse problems for nonstazionario of the heat transfer . . . . .	136

4.8. Programming algorithms and practical use the programming languages . . . . .	134
4.9. Using the languages "C", "Pascal", "Fortran" and "Basic" in operating system DOS for modeling of the processes of the transfer . . . . .	137
4.10. Using the languages "C", "Pascal", "Fortran" and "Basic" in operating system DOS for modeling of the processes of the transfer . . . . .	139
4.10.1. Adaptation visual of programming: Delphi, Visual Basic и Visual C++ . . . . .	139
4.10.2. Review program resources and working out program package . . . . .	140
4.11. Tactics creation of testes for control algorithms solving nonlinearly boundary-value problems and analysis results; correction goal-setting . . .	141
Chapter 5. Applications . . . . .	146
Enclosure A. Destination of program package «KHYT» . . . . .	146
Enclosure Б. Texts of program «KHYT» in a variety tongues . . . . .	154
Enclosure Б.1 Fragments of program KHYT on tongue «C» . . . . .	
Enclosure Б.2 Fragments of program KHYT on tongue «Pascal» . . . . .	157
Enclosure Б.3 Fragments of program KHYT on tongue «PL / 1» . . . . .	159
Enclosure Б.4 Fragments of program KHYT on tongue «Delphi» . . . . .	160
Enclosure В. Tables, block diagrams and pictures with result calculation different problems . . . . .	
Enclosure Г. Details of some calculations (calculation of the differential of Freshe and aproximation of the boundary conditions) . . . . .	171
List of literature . . . . .	177
Subject index . . . . .	189
List of key . . . . .	197
Epilogue . . . . .	204
<b>Chapter 6. CD – ROM with sources of program and my site «MY DELPHI» . . . . .</b>	<b>207</b>





**Часть 1**



*«Капля так же неисчерпаема, как и атом»*  
*Проф. В.В. Дильман*

## **Часть 1. Основные положения математического моделирования.**

**1.1. Общая характеристика проблем переноса, стационарные и нестационарные процессы.**

Многовековой опыт человечества в изучении каких-либо областей знаний показывает, что для достижения консенсуса в любой области знаний необходимо выработать базовую терминологию (систему определений).

Под процессами переноса нами понимаются в дальнейшем разнообразные химические и не только химические процессы в разнообразных аппаратах, где происходит диссиpация энергии или переносится какое-либо вещество в газовой, жидкой, дисперсной или твёрдой фазе.

Одним из элементов классификации процессов служит вопрос о стационарности процесса переноса.

Мы не будем вдаваться в философскую сущность течения времени, а лишь ограничимся популярными понятиями, что течение времени необратимо.

Будем называть математическую модель переноса стационарной, если в её дифференциальных уравнениях отсутствует производная по временной координате.

Этим уравнениям соответствуют процессы, в которых характеристики переноса не меняются со временем.

## 1.2. Классификация некоторых математических моделей.

### Общая пенетритная (диффузионная) модель.

Общая диффузионная модель при наличии химической реакции может быть записана в следующем виде:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + w \nabla C == \nabla(D \nabla C) + r_0 f(C) \quad (1.2.1.)$$

где С - концентрация вещества в потоке, w – средняя расходная скорость движения фазы,

D – коэффициент диффузии,  $r_0$  – константа скорости химической реакции,  $f(C)$  -концентрационный член.

Математический знак набла  $\nabla$  - символический вектор, заменяющий символы градиента, дивергенции и ротации. Его введение упрощает вычисление в векторном анализе. Набла - обозначает дифференциальный оператор Гамильтона:

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{i} + \frac{\partial}{\partial y} \mathbf{j} + \frac{\partial}{\partial z} \mathbf{k}, \quad (1.2.2.)$$

где

$\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$  - координатные орты.

Коэффициент диффузии в модели (1.2.1) является функцией свойств жидкости и условий течения потока. Причём, первое имеет основное влияние при низких скоростях потока и незначительное – при высоких скоростях. В общем случае D

неизотропен, а получение аналитического решения уравнения (1.2.1.) в общем случае невозможно.

### **Общая диффузионная модель для осесимметричного потока с постоянными коэффициентами диффузии.**

Общая диффузионная для осесимметричного потока описывается уравнением (1.2.3.).

Аналитическое решение в этом случае также невозможно.

$$\frac{\partial C}{\partial t} + w(r) \frac{\partial C}{\partial z} == \frac{\partial}{\partial z} \left( D_1(z) \frac{\partial C}{\partial z} \right) +$$

(1.2.3.)

$$+ (D_2 / r) \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial C}{\partial r} \right) + r_0 f(c),$$

где

$D_1$  – коэффициент продольного перемешивания;

$D_2$  – коэффициент поперечного перемешивания.

Оценка диффузионного переноса в этой модели ещё исключительно сложна, а поэтому необходимы дальнейшие упрощения.

### **Модель диффузионного поршневого потока.**

Эта модель представлена уравнением (1.2.4.), которое допускает аналитическое решение.

$$\frac{\partial C}{\partial t} + w(r) \frac{\partial C}{\partial z} = D_H \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} + (D_R / r) \quad (1.2.4.)$$

Диффузионная модель с постоянным коэффициентом диффузии для осесимметричного потока

### 1.3. Линейные и нелинейные краевые задачи переноса.

Мы рассматриваем в данной книге нелинейные уравнения переноса, характеризующиеся наличием в математической модели процесса уравнений в частных или полных производных нелинейности.

Математическая модель называется нелинейной, если хотя бы одна из производных неизвестной функции (включая производную нулевого порядка – саму неизвестную функцию) входит нелинейно или в само уравнение входят производные от искомой функции не в первой степени.

Под нелинейностью подразумевается, например, зависимость коэффициентов от искомой функции типа:

$$\frac{\partial u}{\partial t} \left( K(u) \frac{\partial u}{\partial t} \right). \quad (1.3.1)$$

Если  $K$  зависит только от  $x$  и / или  $t$ ,

$$\frac{\partial u}{\partial t} \left( K(x, t) \frac{\partial u}{\partial t} \right), \quad (1.3.2)$$

то такое выражение уже не является нелинейным, хотя имеет дивергентное слагаемое.

Мы рассмотрим в этой монографии, в основном, нелинейные краевые задачи для уравнений параболического типа:

$$1. \quad w_t = [f(w)w_x]_x.$$

Нелинейное уравнение теплопроводности общего вида.

$$2. \quad w_t = [f(w)w_x]_x + g(w).$$

Нелинейное уравнение теплопроводности с источником общего вида.

3.  $w_t = w_{xx} + ww_x$ . Уравнение Бюргерса.

Отметим, что хотя уравнение Бюргерса по своему виду явно нелинейно, путём замены переменных оно сводится к линейному уравнению. Подробно это уравнение будет рассмотрено в 4-й части этой монографии.

Иногда под нелинейным дифференциальным уравнением понимается наиболее общее уравнение определённого вида. Например, нелинейным обыкновенным дифференциальным уравнением 1-го порядка называется уравнение:

$$F(x, y, u) = 0, \quad \text{где } u = dy / dx, \quad (1.3.3)$$

с произвольной функцией  $F(x, y, u)$ ; при этом линейное обыкновенное дифференциальное уравнение 1-го порядка соответствует частному случаю

$$F(x, y, u) = a(x)u + b(x)y \quad (1.3.4)$$

Есть ещё понятие «полулинейного» уравнения теплопроводности, хотя оно не очень употребительно:

$$c \frac{\partial u}{\partial t} = \lambda \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + F(t, x, \partial u / \partial x) \quad (1.3.5)$$

Вообще говоря, нелинейности в коэффициентах уравнений условно можно разбить на 2 класса - алгебраические и трансцендентные.

Мы не хотим сводить нелинейность только к нелинейности коэффициентов уравнений, так как наш метод позволяет решать практически любые проблемы вне зависимости от того, что за нелинейность встречается в уравнении.



## 1.4. Методологические и математические аспекты моделирования.

Наиболее общим свойством математических моделей является их простота в сравнении с исследуемым объектом, так как они строятся для изучения лишь части свойств моделируемого объекта. В большинстве случаев для изучения одной и той же характеристики моделируемого объекта / процесса могут быть использованы разные математические модели, например непрерывные или дискретные, детерминированные или стохастические. Использование различных математических моделей может быть бъяснено различной степенью детализации описания изучаемых характеристик.

Целесообразность использования какой-либо конкретной модели предварительно анализируется на основе сопоставления с конкурирующими математическими моделями.

Математическое моделирование химико-технологических процессов, как новая область науки оформилось лишь в начале 60-х годов прошлого столетия.

Основные идеи были сформулированы Р.Арисом, Г.К. Боресковым, В.В. Кафаровым и М.Г. Слинько.

Одним из основных моментов моделирования является вопрос установления адекватности модели и объекта. В связи с этим необходимо отметить, что адекватность модели следует рассматривать только по определённым признакам, принятым в данном исследовании за основные.

Не существует «адекватности вообще», ибо полная адекватность означала бы тождество.

Ниже, в главе 3 будет рассматриваться одномерное уравнение с эффективным коэффициентом продольной дисперсии. Это уравнение в течение 25 лет привлекало многих учёных, которые его использовали в своих расчётах и, прежде всего, оно привлекало своей простотой.

Лишь в 1972 г. Михаил Сафонов с химического факультета МГУ доказал, что применение этого уравнения к плёночным аппаратам абсолютно ошибочно.

Но лишь спустя годы, это открытие стало постепенно проникать в сознание массы исследователей. Об этом более подробно мы говорим в главе 3 этой монографии.

Одной из важных характеристик математической модели является её простота с точки зрения математического описания и дальнейшего решения, а также максимальная полнота с точки зрения описания всех наиболее важных элементов моделируемого и / или исследуемого процесса.

Например, система интегро-дифференциальных уравнений значительно сложнее, чем система дифференциальных уравнений. Однако, например, если тройной интеграл взят уже в квадратурах, то положение значительно упрощается.

В одном из закрытых научных учреждений г. Москвы математик А. Б. Рабинович нашел квадратуру тройного интеграла. Узнав об этом, итальянские специалисты, работавшие в этой же области химии, за крупное вознаграждение купили в этом институте результат вычисления тройного интеграла, проделанного А. Рабиновичем.

## 1.5. Регулярные методы решения нелинейных краевых задач и метод НКС.

Есть принципиально две различные платформы для математического моделирования процессов переноса:

- 1) это использование цифровых вычислительных машин;
- 2) использование аналого-цифровых систем (комплексов).

Вычислительные машины являются более универсальным инструментом, чем аналого-цифровые комплексы. Созданные на компьютерах программы могут переноситься на другие вычислительные машины. С этой точки зрения они предпочтительнее.

Поэтому всё наше внимание будет сосредоточено на вопросах программного обеспечения ЭВМ и РС для решения задач нелинейного переноса.

На данном этапе мы не будем рассматривать какие-либо экзотические методы решения нелинейных краевых задач.

Мы можем заинтересованным читателям предложить обзор методов, имеющийся, например, в работах Лионса [15, 146] и весьма полном обзоре Г.И. Марчука [143] и А.Д. Полянина [150].

Одним из основных подходов является метод дискретизации исходной системы уравнений переноса, что означает замену производных их дискретными аналогами, а саму искомую функцию заменяют её дискретным аналогом. Так как система по-прежнему остаётся нелинейной, то к ней применяют итерационный метод. Мы предлагаем другой подход:

- 1) сначала проводим «ньютоновскую» линеаризацию системы уравнений,
- 2) затем применяем метод дискретизации.

Этот метод мы назвали методом НКС (от первых букв слов Ньютон, Канторович, сеточный метод). Мы уверены, что такой подход является более рациональным. Однако в общем случае это недоказуемо.

По-видимому, можно подобрать такой пример, что количество операций в итерациях «пикаровского» типа и количество операций в методе «Ньютона-Канторовича» будут сопоставимы. В этом случае надо ещё сравнить скорость сходимости приближённого решения к точному.

При этом скорость сходимости приближённых решений к точному решению (если сходимость вообще существует) может быть тоже исключительно близка. Метод «Ньютоновской» линеаризации требует вычисления большего количества производных на вычисление которых тоже тратится машинное время.

Здесь надо вспомнить проблему монотонности операторов и монотонность сходимости. Эти две связанные вещи могут дать ключ к построению соответствующих примеров и контрпримеров.

Мы думаем, что построение таких контрпримеров задача достаточно посильная и интересная, но нам ею заниматься сейчас некогда. Наша задача имеет противоположное назначение: показать конкретные примеры решения нелинейных уравнений в частных производных, которые мы рассмотрим в 4-четвёртой главе.

## 1.6. Алгоритмы решения краевых задач и их программная реализация.

Существует много разнообразных методов решения краевых задач, часть из которых вместе с ссылками, была изложена в конце предыдущего параграфа. Здесь надо произвести некоторые уточнения. Краевые задачи подразделяются ещё на несколько весьма специфических подгрупп. Есть краевые задачи с условием на границах отрезка, но не в виде суперпозиции функции и производной, а только задаются сами значения искомой функции. Эти задачи, как правило, ставятся для уравнений в полных производных. Такие задачи решаются методом пристрелки или (shutting) в английской нотации.

Есть начально-краевые задачи, которые решаются методом «прогонки» [12].

Вопросы программной реализации связаны с привязанностями конкретных программистов и тех вычислительных систем и машин, на которых они реализуются. Автору поначалу близки были идеи программирования в системе DOS (просто операционные системы Windows тогда ещё не были созданы).

Поначалу писались блоки программы, реализованные в виде процедур и функций и блока, который связывал воедино последовательность обращения ко всем этим процедурам и функциям.

Позже появилась операционная система Windows, которая рекомендовала для расчётов конкретных блоков программы использовать DLL.

Языки программирования всегда оставались на совести разработчиков конкретных программ.

В частности использовались такие языки программирования, как C, Pascal, FORTRAN, PL / 1, C++, Delphi, Visual Basic.

При переходе на персональные компьютеры ( PC ) и рабочие станции язык PL / 1 и FORTRAN выпали из обоймы широко распространённых языков программирования.

Остальные языки, перейдя под Windows, сохранили своё значение.

Отметим одну важную неприятную особенность некоторых программ фирмы «Борланд» под DOS.

В некоторых блоках (юнитах) программ этой фирмы содержались арифметические ошибки, ликвидированные в более поздних «виндусовских» переработках этих программ.

Часто это было легко заметить по абсолютно неприемлемым результатам расчётов, но иногда их было трудно обнаружить и надо было сверять с «ручным» расчётом.

Бесполезно на страницах этой монографии спорить о том, какой компьютерный язык лучше лучше.

Многие считают Delphi-7 очень хорошей 32 битной системой, позволяющей обучить модульному, объектно-ориентированному, событийному и компонентному программированию.

Кроме того, система DELPHI может взаимодействовать с языками C++ и JAVA.

Но и это ещё не всё. Система DELPHI позволяет создавать клиент-серверные приложения, причём делает это безо всяких сложностей.

Система DELPHI имеет мощную поддержку и для работы с базами данных.

Ей по-плечу создание баз данных и объектов – COM и DCOM. Она может работать и с сервисами. Я думаю, что перечисленного вполне хватает, чтобы убедить нормального продвинутого программиста в том, что это прекрасный продукт не только для новичков, но и для классных программистов.

В качестве подтверждения сошлёмся ещё на сайт автора этой монографии А.М. Вайнберг «My Delphi», который был размещён на бесплатном хостинге в первой половине 2002 года. Мы привели этот сайт на прилагаемом CD-ROM.

Другие считают, что лучше C++ нет ничего в мире. Третий спорят о языке Java или о другом модном языке.

Весьма эффективным, на мой взгляд, является язык си-шарп - C#. Фирма Майкрософт вкладывает в своё новое детище миллиарды и, повидимому, недаром.

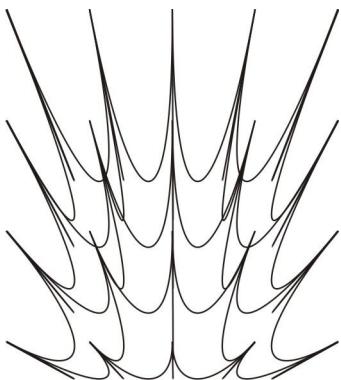
Скорее всего это будет весьма удобный инструмент программирования. Точнее это будет целый набор инструментов, так как появится целая плеяда языков под общей вывеской «шарп».

Мы не дадим втянуть себя в споры, какой язык лучше, отдавшись хорошо известной русской поговоркой:

*«Самая короткая дорога – знакомая».*

Спорить о применимости и удобстве того или иного языка, это почти всё равно, что спорить, какой цвет лучше или какой язык, для общения людей самый лучший в мире.

В мире конкуренции скоро всё будет расставлено на свои места.



## Часть 2

## **Часть 2. Математическое моделирование и решение нелинейных краевых задач.**

### **2.1. Математическое моделирование процессов переноса.**

Ниже приведено краткое определение метода математического моделирования, написанное известным специалистом в этой области, кандидатом технических наук Ю.А.Соколинским.

#### **Краткая характеристика метода математического моделирования.**

«Метод математического моделирования применительно к химическим процессам заключается в том, что сложный процесс представляется в виде совокупности стадий.

Для каждой стадии создаётся математическое описание, учитывающие физические и химические процессы, характерные для данной стадии. Параметры, входящие в это описание находятся из фундаментальных физико-химических закономерностей (термодинамические параметры), или специально организованных экспериментов (например, константы скорости и энергии активации химической реакции).

Общее математическое описание представляет собой систему уравнений, описывающую стадии процесса.

Например, для химического реактора с неподвижным слоем катализатора можно выделить следующие стадии:

- химические превращения на внутренней поверхности катализатора;
- процесс в зерне катализатора с учетом диффузии компонентов реакционной смеси;

- гидродинамические процессы, определяющие поле скоростей и давления в слое катализатора:

химический процесс в слое катализатора с учетом химических превращений, тепловыделения и переноса тепла и вещества;

- условия на наружной поверхности слоя катализатора, описывающие подвод или отвод тепла.

Математическое моделирование подразумевает разработку методов, как правило, численных, решения систем получаемых уравнений. Обычно, это краевые задачи для систем дифференциальных уравнений, как правило, нелинейных в обыкновенных или частных производных. Разумеется, на основе указанных методов разрабатываются программные модули, с помощью которых на компьютерах ведется исследование объектов математического моделирования.

Метод математического моделирования представляет собой мощный инструмент в руках инженеров при разработке, исследовании и оптимизации различных процессов и аппаратов и можно утверждать, что он вошёл в повседневную практику при проведении научно-исследовательских работ и проектировании.

Практически, все серьёзные фирмы располагают различными пакетами программ математического моделирования и постоянно пополняют свое программное обеспечение в этой области».

\* \* \*

Приведенное выше определение Ю.А. Соколинского является концентратом рассматриваемого метода математического моделирования применительно к химическим и химико-технологическим процессам.



## 2.2. Метод Ньютона-Рафсона для поиска корней нелинейных скалярных уравнений.

Достаточно часто перед программистами встаёт задача поиска решений скалярных уравнений типа:

$$f(x) = 0 \quad (2.2.1)$$

Разработано много методов решения подобных уравнений. Они, прежде всего, отличаются скоростью сходимости к точному решению и требованиями к функции  $f(x)$ .

При этом предполагается, что точное решение существует и оно единственno.

Наличие современных компьютеров позволяет не задаваться вопросом быстроты сходимости (работы) данного конкретного алгоритма. Например, вполне надёжно работает метод Вегстейна, который автор монографии неоднократно использовал в своих программах.

Тем не менее, с методологической точки зрения, нам удобнее рассмотреть здесь метод Ньютона-Рафсона. Так как в следующем пункте мы рассмотрим обобщение этого метода на нормированные пространства, то необходимо показать преимущества данного метода.

Будем дополнительно предполагать, что  $f(x)$  монотонно убывающая строго выпуклая функция для всех  $x$  из области определения, то есть вторая производная  $f''(x) > 0$ .

Следовательно, корень  $r$  простой,  $f'(r) \neq 0$ .

Пусть  $x_0$  начальное приближение для корня  $r$ , причём

$$(x_0 < r \text{ и } f(x_0) > 0),$$

и пусть  $f(x)$  аппроксимируется линейной функцией от  $x$ , задаваемой значениями самой функции  $f(x)$  и её производной при  $x = x_0$ :

$$f(x) \cong f(x_0) + (x - x_0) f'(x_0). \quad (2.2.2)$$

Ясно, что студенты вторых курсов университетов это представление хорошо знают, так как это просто приближение, получаемое из ряда Маклорена.

Тогда следующее приближение для  $g$  получается из решения линейного по  $x$  уравнени

$$f(x_0) + (x - x_0)f'(x_0) = 0. \quad (2.2.3)$$

Разрешая это уравнение относительно  $x$ , получаем второе приближение к корню:

$$x = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}. \quad (2.2.4)$$

Повторяя этот процесс, мы приходим к рекурентной формуле:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}. \quad (2.2.5)$$

Формула (2.2.5) является формулой Ньютона - Рафсона. Она позволяет вычислять последующее приближение к корню, имея предыдущее приближение и значения функции и её производной в предыдущей точке приближения.

По вопросам монотонности вычислительного процесса мы отсылаем читателя к прекрасной книге Беллмана-Калабы [1- 1-е].



## 2.3. Метод Ньютона-Канторовича и метод квазилинеаризации Беллмана-Калабы для решения нелинейных операторных уравнений. Метод НКС.

Выше мы рассмотрели метод Ньютона (Ньютона-Рафсона) для решения нелинейных уравнений для функции одной переменной. Отметим, что в русской технической литературе фамилию Рафсона часто опускают.

В 1948 году Л.В. Канторович в работах [2-4] построил обобщение метода Ньютона - Рафсона на функциональные нормированные пространства.

Этот метод изучался и в ряде последующих работ других авторов [5-9].

Спустя десять лет Л.В. Канторович вновь вернулся к этому кругу задач [11].

Спустя ещё 10 лет в СССР публикуется переводная книга Беллмана- Калабы [1], где подменяется название метода "Ньютона-Канторовича" для функциональных пространств на название "метод квазилинеаризации". Правда, в книге [1] говорится, что это одно и тоже, но при этом оказывается, что иногда и метод максимизации приводит к аналогичному итерационному процессу.

Мы считаем, что многие идеи из этой монографии [1-1-е] могут быть полезны тем, кто хочет глубже изучить вопросы существования и сходимости решений нелинейных уравнений.

В этой книге [1] приведена одна из модификаций метода решения нелинейных уравнений, которая этими авторами названа методом квазилинеаризации. Сами авторы в этой монографии утверждают, что их метод и метод Ньютона-Канторовича приводят к одним и тем-же вычислительным процессам.

Впоследствии соавтор Беллмана – Р. Калаба, выступая на математической конференции в Гонолулу (1971 г.) , изменил своё мнение, высказав мысль, что метод квазилинеаризации и метод Ньютона-Канторовича – разные методы, но при этом привёл недостаточно внятную аргументацию.

Нам кажется, что столь странное смешение понятий произошло от того, что эти математики не привели разумное

определение метода Ньютона - Канторовича, понятное в терминах нелинейного функционального анализа. Поэтому мы сочли необходимым дать такое определение. Именно, метод Ньютона - Канторовича, как мы утверждаем основан на нахождении и вычислении дифференциала Фреше, который по нашему мнению лежит в основе метода Ньютона-Канторовича для нелинейных функционалов.

Почему же возникла столь серьёзная путаница в книге известных американских математиков ?

Прежде всего, на наш взгляд, беда состоит в отсутствии чётких определений в целом очень интересной книги Беллмана и Калабы [1].

Именно поэтому мы начнём с чётких определений.

Проведём рассмотрение метода "Ньютона-Канторовича" согласно работам [ 12-14 ].

Пусть  $\mathbf{U}$  – решение уравнения

$$\mathbf{P}(\mathbf{U}) = 0, \quad (2.3.1.)$$

Где  $\mathbf{P} : \mathbf{E}_1 \rightarrow \mathbf{E}_2$  дифференцируемое по Фреше [ 15 ] нелинейное отображение, а  $\mathbf{E}_1$  и  $\mathbf{E}_2$  линейные нормированные пространства.

Допустим, что  $\mathbf{U}$  найденное приближённое решение ( 2.3.1 ). Тогда итерационный процесс (назовём его "ニュтоновской линеаризацией" или методом "Ньютона-Канторовича"), задаваемый линейным уравнением :

$$\mathbf{P}(\mathbf{U})^*(\mathbf{U} - \mathbf{U}) = -\mathbf{P}(\mathbf{U}), \quad (2.3.2.)$$

где  $s$  – номер приближения ( $s = 0, 1, 2, \dots$ ), позволяет найти связь его приближённого решения  $\mathbf{U}$  равнения ( 2.3.1 ) с

предыдущими  $\overset{s}{U}$ .

Если существует линейный обратный оператор

$[\mathbf{P}'(\mathbf{U})]^{-1}$ , то приходим к известному методу "Ньютона-Канторовича" [5] :

$$U^{s+1} = U^s - [P'(U^s)]^{-1} P(U^s). \quad (2.3.3.)$$

Мы не случайно оговорились, если существует линейный обратный оператор...

Дело в том, что построить обратный оператор в практически интересных случаях не удаётся. Именно это и вызывает затруднения у многих новичков в этих вопросах.

Единственный путь в этой ситуации – построить обратный оператор приближённо.

Именно этим путём и идут исследователи, желающие использовать метод Ньютона-Канторовича.

**Определение 1.** Говорят, что оператор  $P$  дифференцируем по Фреше в точке  $v \in E_1$ , если

$$P(v+h) - P(v) = dP(v, h) + \omega(v, h), \quad (2.3.4.)$$

где

$dP(v, h)$  – линейная ограниченная функция (оператор) от  $h$ , причём

$$\lim_{h \rightarrow 0} \omega(v, h) / \|h\| = 0 \quad (2.3.5.)$$

В равенстве (2.3.3) предполагается, что отображение  $P$  определено в шаре радиуса

$\delta$  с центром в точке  $v$ , причём  $\|h\| < \delta$ .

$dP(v, h)$  называется дифференциалом Фреше, а  $\omega$  остатком дифференциала.

Если известен вид оператора  $dP(v, h)$ , то есть

$$dP(v, h) = A(v)h,$$

где  $A$  – линейный ограниченный оператор, то пишут

$A(v) = P'(v)$  и называют его производной Фреше.  
В силу этого имеем

$$A(v) = \lim_{\|h\|} \frac{1}{\|h\|} \| (P(v+h) - P(v) - P'(v)*h) \| \quad (2.3.6.)$$

Конкретные применения метода "Ньютона-Канторовича" для решения нелинейных краевых задач переноса тепла и массы мы рассматриваем в части 4 нашей монографии.

Отметим один самый существенный момент. Уравнение (2.3.3) уже является линейным, но оно ещё не разрешено относительно искомой функции.

К этому уравнению мы применяем разностную аппроксимацию на сетке (метод сеток рассмотрен в главе 4) и получаем систему линейных алгебраических уравнений, которую решаем одной из модификаций метода исключения (применительно к системе линейных уравнений с трёхдиагональной матрицей. Эту модификацию один из авторов метода И.М. Гельфанд назвал методом «прогонки» [12].

Именно поэтому предлагаемый нами алгоритм мы называем метод НКС первые буквы слов Ньютон, Канторович и сеточный метод.

## 2.4. Решение нелинейных краевых задач для систем уравнений в частных производных методом НКС.

Выше, в предыдущем параграфе, мы рассмотрели определение метода "Ньютона-Канторовича", применимого к нелинейным операторным уравнениям.

В предыдущем пункте никаких дополнительных предположений о виде частных производных мы не делали.

Рассмотрим нелинейное уравнение  $P(u, v) = 0$ , где отображение

$$P : E_1 \times E_1 \Rightarrow E_2,$$

дважды непрерывно дифференцируемо.

В этом случае формула Тейлора имеет вид:

$$\begin{aligned} P(u^0 + h_1, v^0 + h_2) &= P(u^0, v^0) + d_u P(u^0, v^0) + \\ &+ d_v P(u^0, v^0) + r(u^0, v^0, h_1, h_2). \end{aligned} \quad (2.4.1.)$$

Отбрасывая  $r(u^0, v^0, h_1, h_2)$ , получим приближённое

уравнение:

$$P(u^0, v^0) + d_u P(u^0, v^0) + d_v P(u^0, v^0) = 0, \quad (2.4.2.)$$

где

$$(u = u^0 + h_1, v = v^0 + h_2).$$

Далее, рассмотрим систему

$$P_1(u, v) = 0; \quad P_2(u, v) = 0; \quad (2.4.3.)$$

Применяя к системе (2.4.3.) аппарат предыдущего параграфа и используя частные дифференциалы Фреше, получим следующее:

$$\begin{aligned} P_1(u^0, v^0) + d_u P_1(u^0, v^0) &= \\ = P_1(u^0 + h_1, v^0) + r_1(u^0, v^0, h_1) & \end{aligned} \quad (2.4.4.)$$

$$\begin{aligned} P_2(u^0, v^0) + d_v P_2(u^0, v^0) &= \\ = P_2(u^0, v^0 + h_2) + r_2(u^0, v^0, h_2) & \end{aligned} \quad (2.4.5.)$$

Отбрасывая в системе (2.4.4.) - (2.4.5.) остаточные члены, мы придём к следующей линейной системе:

$$P_1(u^0, v^0) + d_u P_1(u^0, v^0) = 0 \quad (2.4.6.)$$

$$P_2(u^0, v^0) + d_v P_2(u^0, v^0) = 0 \quad (2.4.7.)$$

И в данном случае метод Ньютона –Канторовича примет вид

$$P'_{1u}(u^n, v^n)(u^{n+1} - u^n) = -P_1(u^n, v^n), \quad (2.4.8.)$$

$$P'_{2v}(u^n, v^n)(v^{n+1} - v^n) = -P_2(u^n, v^n). \quad (2.4.9.)$$

Изложенное в этом параграфе было опубликовано автором в работе [75].



## 2.5 Решение нелинейных краевых задач для систем обыкновенных дифференциальных уравнений.

Обыкновенные дифференциальные уравнения мы можем рассматривать как подмножество уравнений в частных производных. Конкретное применение метода Ньютона-Канторовича к нелинейным системам обыкновенных дифференциальных уравнений мы рассмотрим в главе 3.

Единственное, но важное упрощение – это отсутствие производных по временной координате. Даже вопрос построения сеток упрощается до минимума: сетка рассматривается только как разбиение пространственной координаты.

Рассмотрим нелинейную краевую задачу для системы обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned} u'' &= f(u', u, x); \\ u &= (u_1, u_2); \quad f = (f_1, f_2), \end{aligned} \tag{2.5. 1.}$$

$$\begin{aligned} 0 < x < b, \\ \varphi_i(u', u, x = a_i) &= 0, \quad (i = 1, 2, 3, 4), \end{aligned} \tag{2.5. 2.}$$

$$a_1 = a_2 = 0; \quad a_3 = a_4 = b,$$

в предположении, что  $f_1(z, y, x)$  и  $f_2(z, y, x)$  непрерывны вместе со своими частными производными по  $z$  и  $y$  до второго порядка включительно в области

$$G = \{ |z| < d, |y| < c, 0 \leq x \leq b; c, d > 0 \}. \tag{2.5. 3.}$$

Предположим также, что  $(z, y, x)$  обладают такой же гладкостью, что и функции  $f_1, f_2$ , соответственно, в областях:

$$\omega_1 = \{ x \leq \varepsilon, |y| < d, \varepsilon > 0 \}, \tag{2.5. 4.}$$

$$\omega_2 = \{ |b-x| < \varepsilon, |y| < c, |z| < d \},$$

и что задача (2.5. 1.) - (2.5. 2.) имеет решение

$$u \in C^2[0,b].$$

Применяя к задаче (2.5.1.) - (2.5.2.) аппарат предыдущих параграфов (попросту вычисляя дифференциал Фреше), получим линейную краевую задачу:

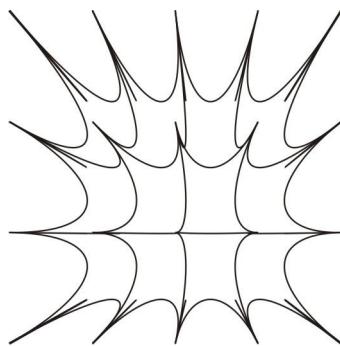
$$u_j^{n+1} = f_j[t] + f'_{ju_j}[t] (u_j^{n+1} - u_j^n) + f'_{ju'_j}[t] (u'^{n+1}_j - u'^n_j);$$

$$\varphi_i[\lambda] + \varphi'_{iu_j}[\lambda] (u_j^{n+1} - u_j^n) + \varphi'_{iu'_j}[\lambda] (u'^{n+1}_j -$$

$$- u'^n_j).$$

Остается только напомнить, что целочисленный индекс  $j = 1 \dots 2$ .





Часть 3

## Часть 3. Нелинейные двухточечные краевые задачи для обыкновенных дифференциальных уравнений и систем обыкновенных дифференциальных уравнений. Плёночные выпарные аппараты.

### 3.1. Краевые нелинейные двухточечные задачи.

Под краевыми задачами в этом пункте понимаются задачи для уравнений в обыкновенных или частных производных, которым сопоставлены дополнительные условия на концах или краях области рассмотрения задачи. Для нестационарных и стационарных процессов рассматривают ещё и начально-краевые задачи, в которых задаётся условие в начальный момент времени в области рассмотрения задачи.

Нас, прежде всего, в данной главе интересуют нелинейные уравнения второго порядка в полных производных с краевыми условиями на границе области в виде суперпозиции производной искомой функции и самой функции в точках на границе области.

Типичным представителем таких задач является следующая, рассматриваемая на отрезке  $[a, b]$ :

$$\begin{aligned} x'' &= f(x, x'); \\ x'(a) &= u(x(a)); \\ x'(b) &= v(x(b)), \end{aligned} \tag{3.1}$$

$$\text{где } x' = \frac{dx}{dz}; \quad x'' = \frac{d}{dz} (x'); \quad a \leq z \leq b.$$

Конечно же, значения **a** и **b** соответствуют входу в аппарат и выходу из него одной или обеих фаз, а **z** – пространственная координата, **x** – искомая функция (обычно концентрация жидкой или газовой фазы или температура газовой или жидкой фазы).

Если мы рассматриваем задачу для обеих фаз, то система уравнений (3.1) дополняется ещё подобной системой уравнений для газовой или жидкой фазы. При этом функции **f**, **u** и **v** заменяются на соответствующие функции для газовой или жидкой фазы, например, как в системе (3.3.1).

Математики, в основном, рассматривают задачи (3.1) и (3.3.1) с точки зрения существования и единственности решения, а также вопросы непрерывной зависимости решения краевой задачи от функции **f**.

Подробными исследованиями этих вопросов занимался в начале прошлого века С.Н. Берштейн [22]. Более поздние исследования и обзор литературы можно найти в монографии [23].

Среди достаточно популярных введений в область краевых и начально-краевых задач отметим особо книгу академика С.Л. Понtryагина [96].

Отметим также, что английским эквивалентом понятия начально-краевая задача служит словосочетание «Initial boundary-value problems»

### **3.2. Плёночные аппараты в химической промышленности.**

Плёночные аппараты в химической промышленности нашли широкое применение благодаря целому ряду весьма полезных и важных характеристик:  
значительной площади поверхности контакта между фазами, малому сопротивлению движения жидкой и газовой фаз, достаточно простой регулировке нагрузок по обеим фазам, сравнительно лёгкому изготовлению аппаратной части.

Само устройство трубчатых плёночных аппаратов позволяет проводить как изотермические процессы теплообмена, так и процессы выпаривания за счет подогрева внешней поверхности трубок паровой фазой (острым паром-конденсирующимся

греющим паром).

Как правило, жидккая фаза подаётся выше трубной платы и стекает по внутренней поверхности трубы вниз. Газовая фаза подаётся противотоком в трубы под нижней трубной платой.

Паровая фаза подаётся в межтрубное пространство внутрь обечайки аппарата.

Последняя из описанных выше конструкций трубчатого плёночного аппарата соответствует выпарному аппарату.

Простота изготовления, эффективность и дешевизна плёночной аппаратуры способствует широкому применению и распространению плёночной аппаратуры.

В четвёртом пункте мы рассмотрим достаточно простые одномерные диффузионные математические модели и их применение.

В пятом пункте будет рассмотрен современный конфликт между двумя подходами к исследованию диффузионных плёночных моделей экспериментальным и научным.

В шестом пункте будет рассмотрена двумерная математическая модель выпарного аппарата.

### 3.3 Противоточные скруббера МЭА очистки от $\text{CO}_2$ .

Изложение данного параграфа даётся на основе наших работ [24-25].

Моделированию однофазных потоков с учётом продольного перемешивания и химической реакции посвящено много работ. Начиная с работ Данквертса [26], где впервые была рассмотрена постановка подобной задачи для изотермического случая и реакций первого порядка, появился целый ряд работ, где рассматривались реакции второго порядка [27], обратимые реакции [28-29], неизотермические реакции, описывающие процессы в неподвижном слое катализатора [30].

Несколько позднее появились работы по математическому моделированию двухфазных потоков с учётом продольного перемешивания в обеих фазах [31-32].

В настоящее время нам известны лишь четыре работы [31-34], в которых проведены расчёты аппаратов с учётом химических реакций и продольного перемешивания в обеих фазах.

Работы [24-25] посвящены математическому описанию кинетики и расчёту противоточной изотермической абсорбции, осложнённой сравнительно быстрой химической реакцией первого или второго порядка в жидкой фазе.

В химической промышленности и, в частности, в азотных производствах, процесс абсорбции широко используется для очистки технологических хвостовых газов от  $\text{CO}_2$ ,  $\text{SO}_2$ ,  $\text{NO}_2$ .

Многие процессы, например, абсорбция двуокиси углерода и сероводорода растворами едкого натра, поташа, аммиака, этаноламинов (при умеренных степенях карбонизации), абсорбция аммиака серной кислотой, абсорбция серного ангидрида серной кислотой [24], сопровождаются сравнительно быстрой химической реакцией в жидкой фазе.

Имеющиеся в литературе [35-39] теоретические уравнения позволяют рассчитывать локальную скорость хемосорбции, но при этом не учитываются изменение

скорости хемосорбции по высоте аппарата и влияние состава газа и жидкости. Приводимые в литературе графические методы [35] связаны с разбивкой абсорбента на отдельные зоны и усреднением концентрации активной части хемосорбента.

Эти методы сложны, обладают малой точностью и непригодны для практически важной переходной области.

Ю.В. Аксельродом и В.В. Дильманом было предложено использовать для описания противоточной абсорбции, осложнённой необратимой химической реакцией в жидкой фазе, систему уравнений, которая в безразмерном виде может быть представлена так [24]:

$$\frac{d^2Y}{dz^2} - B_e \frac{dY}{dz} - N_{or} B_\varphi Y = 0 \quad (a)$$

( 3.3.1 )

$$\frac{d^2X}{dz^2} - B_\varphi \frac{dX}{dz} - N_{or} B_\varphi Y / (\alpha_c M_c) = 0, \quad (b)$$

где

$$Y = Y_\varphi / Y_{\varphi 1}; \quad X = X_\varphi / X_{\varphi 1}; \quad \alpha_c = w_\varphi / (m_c w_\varphi); \quad (3.3.2)$$

$$M_c = X_{\varphi 1} m_c / (n_c Y_{\varphi 1});$$

$X_{\varphi 1}$  - текущая концентрация активной части хемосорбента (моноэтаноламина -  $C_2H_7NO$ ) в ядре потока жидкости;  $Y_\varphi$  - текущая концентрация абсорбируемого в ядре потока газа;  $z$  – безразмерная высота аппарата.

В этих уравнениях за положительное направление оси  $oz$  выбрано направление движения жидкой фазы (гравитационно стекающей по стенке аппарата и насадке).

Первое слагаемое в обоих уравнениях характеризует перенос вещества за счёт продольного перемешивания потоков; второе-перенос вещества за счёт направленного движения потоков; третье – локальный межфазный перенос вещества, причём предполагается, что справедливо правило аддитивности фазовых сопротивлений:

$$1 / N_{o\sigma} = 1 / N_g + 1 / (\alpha_c N_{\mathcal{H}} \gamma), \quad (3.3.3)$$

$$\gamma = K_1 / K_2,$$

где

$$K_1 = 2 [((D / E) \frac{X}{Y} + 1)]; \quad D = M_c \sqrt{\theta}; \\ E = (1 - N_{o\sigma} / N_g);$$

$$K_2 = 1 + \sqrt{1 + 4(D/(ER_0))^2} \quad \sqrt{\frac{X}{Y^2}}$$

Система уравнений (3.3.1) -(3.3.2) по своей структуре весьма близка к тем дифференциальным системам, которые описывают противоточную абсорбцию (ректификацию), но имеет принципиальное отличие. Оно заключается в последнем члене каждого дифференциального уравнения системы и, который, описывает локальный межфазный перенос вещества. Входящий в этот член (в качестве сомножителя) локальный коэффициент общего числа единиц переноса является функцией коэффициента ускорения, который представляет собой отношение потока вещества (переходящего из одной фазы в другую) при хемосорбции к потоку вещества при физической абсорбции. Значения коэффициента ускорения (см. работу И.А. Гиндельблата [92])

на основе использования модели проницания, нелинейным образом зависит от концентрации обеих фаз.

Данное обстоятельство вносит совершенно новую специфику в знаковую модель, превращая её в нелинейную краевую задачу для системы двух дифференциальных уравнений, каждое из которых второго порядка. Это приводит нас к системе четвёртого порядка. (Фактически имеем систему дифференциальных уравнений четвёртого порядка).

Регулярные методы решения таких задач в настоящее время ещё не разработаны.

Отметим также, что алгоритм решения задачи (3.3.2) принципиально отличается от алгоритма решения задач физической абсорбции, так как в последней общий коэффициент массопередачи является подбираемым параметром математической модели и не изменяется с высотой аппарата.

Эффективность процесса хемосорбции зависит от концентрации абсорбируемого компонента в газовой фазе и хемосорбента в жидкости, степени карбонизации, скоростей газа и жидкости. Значения этих величин определяют область протекания химической реакции, а каждая из областей характеризуется различными кинетическими закономерностями:

в верхней части аппарата наблюдается область реакции псевдопервого порядка с соответствующим избытком хемосорбента по отношению к абсорбируемому компоненту;

в нижней части – переходная область или область мгновенной химической реакции,

в которой хемосорбент в значительной степени исчерпан, и скорость абсорбции сильно зависит от гидродинамических условий.

Проведенные на ЭВМ расчёты в широком диапазоне изменения параметров

$M_c$ ,  $\Theta$ ,  $R_0$ ,  $B_e$ ,  $B_{\infty}$  позволили получить некоторые закономерности, типичные для

случая абсорбции  $\text{CO}_2$  водным растворомmonoэтаноламина при атмосферном давлении.

Установлено, что влияние перемешивания жидкости на коэффициент извлечения по газу сравнительно невелико, но увеличивается с повышением степени карбонизации.

Этот вывод хорошо согласуется с более ранними результатами по физической абсорбции.

Интересным вопросом во всех математических моделях является вопрос параметрической чувствительности математической модели. Ниже приведены подобные исследования в зависимости от чисел Боденштейна в жидкой и газовой фазах.

Для условий переходной области при изменении  $B_{ж}$  от 100 до 1 величина безразмерной концентрации хемосорбента на выходе из аппарата меняется почти в полтора раза.

В области мгновенной химической реакции изменение  $B_{ж}$  от 100 до 0.5 приводит к увеличению  $Y_2$  более чем вдвое.

Результаты расчёта при изменении  $B_2$  от 50 до 0,5 практически не сказываются

на  $Y_2$ .

При некоторых условиях перемешивание жидкости заметно влияет на  $\varphi$ . (и ещё больше на число единиц переноса) в диапазоне изменения  $B_{ж}$  от 5 до 10 и, следовательно, расчёт по уравнению, соответствующему случаю полного вытеснения жидкости, ведёт к значительной ошибке.

## ***Метод расчёта процесса и сравнение с опытными данными.***

Коэффициент ускорения  $\gamma$  в системе (3.3.2) является нелинейной функцией своих аргументов.

Поэтому система дифференциальных уравнений (3.3.2) нелинейная и решается итерационным методом на разностной сетке, после предварительной линеаризации системы уравнений методом Ньютона-Канторовича, согласно пункту 2.3.

Сравнение расчётов по программе А.М. Вайнберга [40] системы (3.3.2) с опытно-промышленными данными, полученными Л.В. Алекперовой [40] для системы  $\text{CO}_2$  - водный раствор моноэтаноламина ( $\text{NH}_2 - \text{CH}_2 - \text{CH}_2 - \text{OH}$ ) на керамических сёдлах Инталокс размером 44 мм. и кольцах Рашига размером 50 мм. при высоте слоя насадки 4,21 м. в диапазоне изменения скоростей газа от 0,3 до 1,17 м./с. и с плотностью орошения от 20 до 60 м / м час, показывает удовлетворительное соответствие по газовой фазе в верхнем сечении аппарата и по концентрации  $\text{CO}_2$  и активной части амина в жидкой фазе в нижнем сечении аппарата.

### 3.4. Одномерные модели плёночных аппаратов с эффективной диффузией (температуропроводностью, Коэффициентом дисперсии, продольным перемешиванием).

СТРУКТУРА ПОТОКОВ (**С.п.**) в аппаратах непрерывного действия, существенно влияет на химические процессы, тепло- и массообмена.

Для процессов в многофазных потоках важно взаимное направление движения фаз (противоток, прямоток и др.) и геометрической формы движущихся объемов (пленки, струи, капли, пузыри).

При рассмотрении **процессов переноса** существенны режим течения (ламинарный, волновой, турбулентный) и связанная с ним проблема пограничного слоя.

Большое значение имеют различия во времени пребывания частиц потока в рабочем объеме и их взаимное перемешивание в результате нестационарности поля скоростей, неравномерности распределения скоростей и их разнонаправленности. В частицах потока, покидающих рабочий объем быстрее других, процесс оказывается

незавершенным; в частицах, задерживающихся в этом объеме, он проходит глубже. Поскольку скорость процесса обычно снижается во времени, его

незавершенность определяется долей частиц с малым временем пребывания.

Отрицательное влияние неравномерности распределения времени пребывания тем сильнее, чем выше требуемая степень незавершенности процесса.

Перемешивание в потоках подразделяют по направлению на поперечное и продольное, а также по уровню-перемешивание на макроуровне (смешивающиеся частицы сохраняют свою индивидуальность) и на микроуровне (происходит гомогенизация частиц). Поперечное перемешивание, как правило, связано с турбулентностью; оно интенсифицирует массо- и теплоперенос. Продольное перемешивание-взаимное смешение элементов потока, поступивших в аппарат в разные моменты времени. Оно приводит к выравниванию профилей концентраций и температур

по длине потока, к неравномерности распределения времен пребывания, часто уменьшает движущую силу процесса и снижает его **эффективность**. Для подавления продольного перемешивания и усиления поперечного применяют секционирование потока с помощью соответствующих устройств.

Для анализа химической технологии процессов используют модели смешения потоков разной степени идеализации; простейшие из них – идеальное вытеснение и идеальное смешение. В первом случае

предполагается отсутствие продольного перемешивания при полном поперечном, время пребывания всех частиц одинаково.

Эта модель удовлетворительно описывает, например, многие процессы в длинных трубах, особенно заполненных зернистыми слоями.

В модели идеального смешения полагают, что элементы потока при поступлении в аппарат мгновенно и равномерно смешиваются со всем его содержимым, концентрации и температура одинаковы во всех точках объема. К этой модели близки, напр., потоки в аппаратах с интенсивным механическим перемешиванием.

Упомянутые модели – крайние случаи условий смешения в потоке. Промежуточные случаи описывают модели, выбор которых определяется физической картиной процесса и степенью сложности расчетов.

Диффузионные модели представляют поток как вытеснение, на которое накладывается перенос в продольном (однопараметрическая модель) или в продольном и поперечном (двухпараметрическая модель) направлениях, причем перенос формально описывается уравнениями *диффузии*. Ячеичная модель представляет поток как последовательность одинаковых ячеек идеального смешения, причем число ячеек подбирается так, чтобы отразить влияние продольного перемешивания. Ячеичная модель удовлетворительно описывает потоки в секционированных аппаратах; как простую расчетную схему ее иногда используют и для иных потоков. Более сложные потоки описываются комбинированными моделями (схемные соединения простых моделей).

Каждой модели С. п. отвечает уравнение или система уравнений, позволяющие рассчитывать процесс в потоке и необходимый объем аппарата. Эти уравнения содержат параметры моделей (эффективный коэффициент диффузии,

число ячеек и др.), для определения которых применяют различные методы. Например, на входе потока вводят по определенному закону (импульсному, ступенчатому и др.) индикатор, а на выходе регистрируют отклик-изменение концентрации индикатора во времени (*метод трассёра*). Обработка отклика методами статистики позволяет оценить закон распределения времени пребывания и найти параметры модели.

Сведения о С. п. особенно важны при моделировании промышленных аппаратов. При переходе к ним от малых установок следует учитывать изменение С. п. Знание параметров С. п. и физ.-хим. характеристик процессов позволяет расчетным путем исследовать и прогнозировать поведение аппаратов и определять оптимальные условия их работы [123-125].

Выше мы уже говорили о многих положительных свойствах плёночной аппаратуры.

Мы, по-прежнему, говорим об аппаратах с непрерывным контактом фаз.

Достаточно соблазнительно выглядят математические модели таких аппаратов, в которых присутствует в жидкой фазе коэффициент эффективной диффузии в качестве основного параметра такой модели. Как правило, эффективные коэффициенты таких математических моделей призваны отражать гидродинамическую обстановку в аппарате. Они не отражают суть пристеночных течений вблизи стенок аппарата и трения в развитых турбулентных пристеночных течениях. Но если такие модели могут дать правильные осреднённые данные концентраций по аппарату, то такие модели имеют право на жизнь.



### 3.5. Триумф и крах одномерных моделей с эффективной диффузией для плёночных аппаратов.

В конце 60-х годов прошлого века в ГИАПе аспирантом В.М. Олевского - В.И. Чернышёвым было проведено множество экспериментов по исследованию продольного перемешивания в плёночных аппаратах [126-128]. Статистическая обработка этих экспериментов показала, что для математического моделирования процесса тепло и массопереноса в плёнке жидкости вполне правомерно использовать диффузионную модель с эффективным коэффициентом продольного перемешивания. На основе этих экспериментальных исследований был проведен численный эксперимент с участием А.М. Вайнберга [131].

Казалось, что для плёночных аппаратов вопрос применимости диффузионной модели с коэффициентом продольного перемешивания вполне решён.

Но неожиданно в одном из номеров одного из серьёзнейших журналов СССР в области теории технологии химических производств - журнале «ТОХТ» появляется «разгромная статья» учёных из московского университета им М.В. Ломоносова М.С.Сафонова и Н.М. Воскресенского[128]. Эти учёные от одномерной диффузионной модели в плёночных аппаратах не оставляют камня на камне.

Первая из их работ появилась в 1972 году [127], но не была замечена из-за неожиданности их результатов. М.С. Сафонов решая аналитически одномерное уравнение с коэффициентом продольного перемешивания нашёл, что этот коэффициент должен быть отрицательным!

очень хорошо знал теоретическую литературу                      Этот результат поверг учёных мужей, занимающихся вопросами математического моделирования плёночных аппаратов в состояние лёгкого шока.

Каждая школа исследователей посвоему реагировала на результаты университетских химиков.

Единственное, что их объединяло - это понимание, что дилетантским исследованиям наступает конец. То есть одномерным диффузионным моделям в плёночных аппаратах

пришёл естественный конец. До этого времени многие исследователи ощущали большие натяжки этой модели:

- 1) изменение коэффициента массоотдачи по высоте аппарата (вслед за изменением движущей силы процесса из-за изменения парциального давления);
- 2) необходимость принятия переменного по высоте коэффициента эффективной диффузии.

Эти допущения многим исследователям казались большой натяжкой.

Какой вывод необходимо было сделать после получения подобных новых результатов?

Вполне естественный вывод - прекратить использование плёночных одномерных моделей с эффективной диффузией в практике математического моделирования плёночных аппаратов.

Именно это и сделано в следующем параграфе, где рассматривается двумерная диффузионная модель плёночного выпарного аппарата.

Но это ещё не решает вопрос, почему результаты экспериментальных работ Валерия Чернышова привели к такому заблуждению? Я могу только высказать своё частное мнение. Аспирант Чернышёв очень подробно изучил литературу по перемешиванию (в основном иностранную) по вопросам перемешивания. Школа Олевского, следуя принципам продольного перемешивания, искала коэффициенты этого перемешивания. Аспирант вынужден был их найти...

Некий аналог можно найти и в литературе по гидродинамике турбулентных течений.

Один из западных журналов по гидродинамике попросил авторов экспериментальных работ прислать подтверждения своих результатов спустя 10 лет.

Оказалось, что все авторы за этот промежуток времени нашли какие-то ошибки в своих работах и поэтому подтверждения не прислали. Ко мне обращались разные бывшие аспиранты с целью обработки их результатов спустя 6-9 лет.

Когда они вновь просматривали свои работы, то находили в них ошибки.

Самой простой ошибкой было то, что вакумная аппаратура не была таковой.

Признаться в подобных ошибках на страницах научных журналов у большинства ученых не хватало мужества.

### 3.6. Моделирование плёночных выпарных аппаратов.

В пункте 3.4 мы рассмотрели моделирование плёночных аппаратов с простейшей однопараметрической диффузионной моделью в жидкой фазе и без учёта полу-параболического распределения скоростей в плёнке жидкости.

Здесь мы рассмотрим более сложную модель в жидкой фазе, которая учитывает гидродинамическую обстановку в аппарате (особенно в жидкой фазе). Сразу оговоримся, что авторство этой модели принадлежит М.Е. Иванову и И. Михельсону [97].

В обсуждении этой модели активное участие в 70-х годах прошлого столетия принимал кандидат технических наук Ю.А. Соколинский.

Отметим также, что в кандидатской диссертации Марка Ефремовича Иванова впервые было чётко указано, что процессы конденсации и испарения необходимо рассматривать не только как массообменные процессы, но и как процессы, сопровождающиеся теплообменом.

Ещё более это верно в случае процесса выпарки минеральных удобрений. Ниже будет приведена двумерная модель процесса доупаривания плава аммиачной селитры. Программа расчёта по этой модели принадлежит А.М. Вайнбергу [82].

Наиболее целесообразно использование выпарных аппаратов на конечной стадии. Доупаривания для получения практически безводных плавов.

Разница парциальных давлений паров воды над раствором и в потоке газа обеспечивает движущую силу процесса массопереноса при допустимых температурах и атмосферном давлении. Это позволяет отказаться от высокого разряжения, необходимого для протекания процесса в вакуумных аппаратах.

В плёночных выпарных аппаратах для производства минеральных удобрений наиболее часто реализуется волновой режим течения орошающей жидкости

( $Re_{ж} = 100 \dots 400$ ). Напомним, что значение числа Рейнольдса для плёнки жидкости

вычисляется по формуле  $Re_{\infty} = 4*L / \nu$ , где L – плотность орошения кг / м с:

Итак, рассмотрим выпарной плёночный аппарат аммиачной селитры, где снизу внутрь труб подаётся воздух, сверху по внутренней поверхности стекает плав примерно 98 % аммиачной селитры, а в межтрубное пространство подаётся острый пар приблизительно температурой 175 градусов цельсия.

Трубы, по которым стекает плав имеют высоту 4-е метра, а их внутренний диаметр достигает 34 мм (0.034 м).

Над верхней трубной доской находятся верхние части патрубков, срезанные под острым углом, которые позволяют равномерно распределить плёнку плава по внутренней поверхности труб.

Собранный под нижней трубной доской плав, направляется затем в лейки гранулятора для разбрзгивания почти обезвоженного плава внутри грануляционной башни (гранбашни).

Добавим, что сами выпарные аппараты находятся на самом верху гранбашни и этот процесс достаточно хорошо отработан. Хотя, при первых пусках один из аппаратов получил мощнейший гидродинамический удар, и его сорвало с 12 стальных шпилек, толщиной 24 мм. и отбросило на расстояние более километра.

Итак, рассмотрим более подробно новаторские элементы математической модели процесса доупарки плава аммиачной селитры.

Ниже мы приводим математическую модель, обозначения которой ясны из прилагаемого рисунка в Приложении В.

За основу принимается ниже диффузионная модель, предполагающая, что коэффициент эффективной диффузии меняется в зависимости от расстояния до фазовой границы. Применимость этой модели для волнового течения экспериментально подтверждена авторами работы [120 ].

Во первых в жидкой фазе (плёнке плава аммиачной селитры ( $NH_4 NO_3$ ), стекающей по внутренней поверхности труб) принимается полу параболический профиль скорости, задаваемый уравнением:

$$U(y) = 3 U^\otimes \left[ \frac{y}{\delta} - \frac{1}{2} \left\{ \frac{y}{\delta} \right\}^2 \right], \quad (3.6.1)$$

где

$$\begin{aligned} U^\otimes &= \delta^2 g \sin(\alpha) / 3\nu, \\ \delta &= (0.75 \nu^2 \operatorname{Re} / g^* \sin(\alpha))^{1/3}. \end{aligned} \quad (3.6.2)$$

Хотя мы рассматриваем математическую модель выпарного аппарата, на рисунке приведен вариант стекания плёнки по наклонной плоскости, где угол наклона обозначен символом альфа  $\alpha$ .

Будем полагать, осреднённый поток установившимся плоским двумерным потоком с поверхностью раздела, соответствующей средней толщине плёнки  $\delta$ , и учитывая также, что градиент температур и концентраций в продольном (вертикальном) направлении значительно меньше, чем в поперечном.

Формула среднерасходной скорости стекающей плёнки включает в себя синус угла наклона труб к поверхности земли. В случае вертикального расположения труб, синус угла в выражении среднерасходной скорости и толщины плёнки нужно опустить, так как синус угла в 90 градусов равен единице.

Уравнения переноса тепла и массы в плёнке жидкости для волновой области гравитационно стекающей плёнки раствора запишутся таким образом:

$$\begin{aligned} U(y) \frac{\partial C}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial z} \left( D_m \frac{\partial C}{\partial z} \right) &= \frac{\partial}{\partial y} \left( D \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \\ &+ \frac{D}{R-y} \frac{\partial C}{\partial y} + r_c f_c \end{aligned} \quad (3.6.3)$$

$$U(y) \frac{\partial T}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial z} \left( a_m \frac{\partial T}{\partial z} \right) = \frac{\partial}{\partial y} (A \frac{\partial T}{\partial y}) + \\ + \frac{A}{R-y} \frac{\partial T}{\partial y} + q / (c_p \rho) \quad (3.6.4)$$

где

$$D = D_m + D_t; \quad A = a_m + D_t; \quad f_c = f(C).$$

Напомним ещё раз, что  $z$  – вертикальная координата, а  $y$  – поперечная координата.

Эта модель учитывает и химические реакции своими последними слагаемыми, которых нет в данном процессе доупарки стекающего плава. Поэтому последним слагаемым в обоих уравнениях можно пренебречь.

Как известно, при радиусе трубы  $R > 0.0125$  м. вкладом второго слагаемого в правых частях уравнений переноса (3.6.3) - (3.6.4) можно пренебречь [100-101].

Отметим, что приведенная модель не является замкнутой в том смысле, что эти соотношения необходимо дополнить величинами коэффициентов теплоотдачи от стенки к плёнке жидкости; условием непроницаемости стенки при переносе массы и балансом по парогазовому потоку:

$$\frac{\partial C}{\partial y}(z, 0) = 0. \quad (3.6.5)$$

Для полноты модели необходимо привести и граничное условие по теплопереносу:

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial y}(z, 0) = \frac{1}{r_{cm}} [T_k - T(z, 0)] \quad (3.6.6)$$

На поверхности раздела фаз ( между плёнкой плава и парогазовым потоком)

$$-D \frac{\partial C}{\partial Y}(z, \delta) = \beta_e (P_s - P_{ne}) \quad (3.6.7)$$

(условие, устанавливающее равенство количества влаги, дифундирующей к поверхности раздела, количеству влаги, отводимой в парогазовый поток )

$$\begin{aligned} -\lambda \frac{\partial T}{\partial y}(z, \delta) &= \alpha_e [T(z, \delta) - \\ &- T_{ne}] - r_n \frac{dG_{ne}}{dz} \frac{1}{2\pi Rn} \end{aligned} \quad (3.6.8)$$

(условие, показывающее, что тепловой поток на поверхности пленки расходуется на теплообмен с парогазовым потоком и на испарение влаги; знак «минус» в правой части обусловлен уменьшением веса парогазового потока в направлении оси oz).

На поверхности раздела фаз теплообмен и массообмен связаны уравнением равновесия:

$$P_\delta = f(T_s, C_s). \quad (3.6.9)$$

Тепловой баланс парогазового потока для элементарного участка dF описывается уравнением

$$\begin{aligned} \alpha_e [T(z, \delta) - T_{ne}] &= c_{ne} [T(z, \delta) - \\ &- T_{ne}] \frac{dG_{ne}}{dz} \frac{1}{2\pi Rn} - G_{ne} c_{ne} \frac{dT_{ne}}{dz} \frac{1}{2\pi Rn}. \end{aligned} \quad (3.6.10)$$

Из материального баланса парогазового потока получаем

$$-\frac{1}{2\pi Rn} \frac{dG_{ne}}{dz} = -\beta_e (\mathbf{P}_\delta - \mathbf{P}_{ne}). \quad (3.6.11)$$

В качестве начальных условий имеем

$$\begin{aligned} T(0, y) &= T_0; \quad C(0, y) = C_0; \\ G_{ne} &= G_{ne}^0; \quad T_{ne} = T_{ne}^0. \end{aligned} \quad (3.6.12)$$

Для определения эффективных значений температуропроводности и диффузии Иванов и Михельсон воспользовались результатами работ [120-121].

К сожалению, в семидесятых годах не было принято ссылааться на великолепную монографию Левича [137], ввиду того, что он покинул СССР, но многие очень полезные результаты не потребовалось бы открывать заново.

Измерения показали, что при  $Re_\infty = 160$  имеются продольные и поперечные пульсации скорости. Однако при  $Re_\infty < 800$  величина поверхностных пульсаций и коэффициент корреляции продольных и поперечных пульсаций скоростей малы, касательные напряжения Рейнольдса

$$(\tau_t = -\rho \bar{U}' \bar{V}' = A_t \frac{dU}{dy})$$

также малы и не влияют на распределение скоростей ( $A_t \ll v$ ). Этим объясняется то обстоятельство, что экспериментальный профиль осреднённой скорости и определённая по нему средняя толщина плёнки хорошо согласуется с соответствующими зависимостями для ламинарного течения плёнки с гладкой поверхностью:

$$\frac{U}{U_\delta} = 2 \left( \frac{y}{\delta} \right) - \left( \frac{y}{\delta} \right)^2; \quad (3.6.13)$$

$$\delta = \left( \frac{3\nu^2}{4g} \text{Re}_\infty \right)^{\frac{1}{3}}; \quad (3.6.14)$$

Распределение коэффициента эффективной диффузии по средней толщине плёнки раствора в диапазоне чисел Рейнольдса от 200 до 1600 указывает на существенный вклад в массоперенос пульсаций скорости, обусловленные большими величинами диффузионных чисел Прандтля  $\text{Pr}'$  для жидкостей.

На стенке и на свободной поверхности плёнки при небольших числах  $\text{Re}_\infty$  и отсутствии эффекта Марангони, коэффициент  $D_{\phi}$  принимает значение  $D_{\text{мол}}$ . При этом на расстоянии примерно 1 / 3 толщины плёнки от её свободной поверхности  $D_{\phi}$  достигает максимального значения.

Вышеизложенное дает основание записать следующие соотношения:

$$D_{\phi}(y) = D_{\text{мол}} + A_m(y); \quad (3.6.15)$$

$$a_{\phi} = a_{\text{мол}} + A_m(y); \quad (3.6.16)$$

Наличие затухающих пульсаций и то обстоятельство, что характер течения определяется молекулярной вязкостью, дают основание рассматривать волновую плёнку как своеобразный ламинарный подслой.

Исходя из такой картины процесса переноса была принята в работе М.Е. Иванова и И. Михельсона [97] физическая модель механизма переноса тепла и массы при волновом режиме течения плёнки доупариваемого раствора. Эти авторы предложили считать плёнку

«двухслойным пирогом», точнее двумя смежными областями, одна из которых прилегает к поверхности стенки трубы, а вторая прилегает к свободной поверхности плёнки раствора. Предположив такое строение плёнки, авторы работы [97] нашли путём дополнительных рассуждений и вычислений две формулы, описывающие коэффициент турбулентного обмена  $A_m$

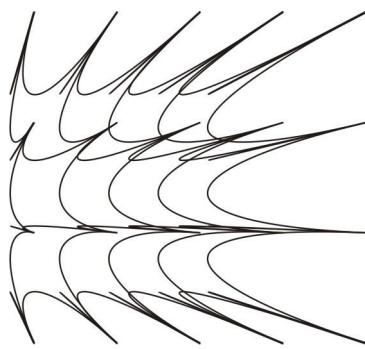
$$A_m^n = 0.126 * \nu * We^{0.55} (\eta_\delta - \eta)^{1.55}; \quad (3.6.17)$$

$$A_m^{cm} = 0.351 * 10^{-3} * \eta^{1.87}; \quad (3.6.18)$$

где  $\eta$  - безразмерная координата (расстояние от стенки).

Необходимо напомнить, что эти данные получены в узком диапазоне параметров. Сопоставление с экспериментальными данными шло на промышленных аппаратах для доупаривания только 98 % плава аммиачной селитры.





## Часть 4

## Часть 4. Нелинейные краевые задачи для уравнений и систем уравнений в частных производных.

### 4.0. Вместо введения.

«Важно понять, что все реальные системы, как правило, открыты и нелинейны. И наоборот, закрытость и линейность есть исключение из правила, чрезмерное, часто неправомерное, упрощение действительного положения дел». (Е.Н. Князева, академик С.П. Курдюмов).

Весьма часто задачи нелинейного нестационарного тепло - и массопереноса возникают при расчёте физических и химико – технологических процессов, протекающих в области сверхнизких и сверхвысоких температур и давлений.

Другая область, которая порождает подобные задачи – проблемы химической и химико-технологической промышленности.

Известно, что решение нелинейных начально-краевых задач - это одна из самых мало исследованных областей математики. Нелинейный функциональный анализ в этой области пока отстаёт от практических задач и шагов, предпринимаемых отдельными практиками, решающими подобные задачи, не дожидаясь готовых рецептов от научных математических кругов.

Наибольшие успехи численной математики сделаны пока в области одномерных линейных нестационарных задач, так как они не требуют мощных вычислительных ресурсов и позволяют обходиться обычными персональными компьютерами (PC), а не «рабочими станциями».

Двумерные нелинейные нестационарные начально-краевые задачи вот-вот будут массово решаться на рабочих станциях с несколькими процессорами.

Это, вероятно, должно нас радовать, так как появляется перспектива решения и трёхмерных линейных и нелинейных нестационарных краевых задач.

Решение линейных уравнений в частных производных, как правило, получается вполне предсказуемым и их иногда можно получить аналитически (этими вопросами занимается

область математики, которая называется «математической физикой»).

В случае двумерного уравнения теплопроводности линейная нестационарная задача описывает физически ожидаемое решение, выражающее остывание пластины или стержня в форме перетекания тепла от нагреветого центра к холодной периферии.

Нелинейные уравнения, наоборот, могут демонстрировать самые неожиданные решения, причем в подавляющем большинстве практических задач их можно получить только численно, а никак не аналитически.

В настоящей книге мы настоятельно и последовательно пропагандируем и применяем одну из предложенных нами модификаций метода Ньютона-Канторовича совместно с методом «сеток», которую мы назвали методом «НКС».

Кроме того, в качестве метода Ньютона-Канторовича мы используем вычисление дифференциала Фреше, который окончательно уточняет наш аппарат решения проблем нелинейности. Применяемая нами методика решения задач с нелинейностями позволяет ожидать квадратичную сходимость приближённых решений к точному решению, если последнее вообще существует.

Отметим одно важное обстоятельство. Математический пакет [«Mathcad»](#) и пакет [«Simple»](#) С.В. Патанка [112-113] практически единственно широко- доступные пакеты в большинстве российских и иностранных научных центрах, позволяют решать многие нелинейные задачи, но в них изначально заложен медленно сходящийся метод Пикара. Этот метод сразу снижает ценность применения указанных выше пакетов программ. Удобство использования этих математических пакетов не компенсирует потерю в скорости вычисления, так как скорость сходимости “пикаровских” приближений решения к точному решению (если точное решение вообще существует и эта сходимость вообще имеется) у метода Пикара является линейной, а метод НКС, как правило, даёт, вообще говоря, квадратичную сходимость при определённых условиях.

Отметим и такую, очевидную даже для новичков вещь, что одномерная нелинейная нестационарная задача проще в решении, чем решение нестационарной двумерной нелинейной краевой задачи, поскольку объём вычислений для реализации и

установления адекватности алгоритма его численного решения не так велик.

Для многих рассматриваемых ниже процессов наблюдается сильная зависимость коэффициента теплопроводности от температуры (и, соответственно, коэффициента диффузии от концентрации), а в некоторых случаях и от градиента температуры (или градиента концентрации).

Аналогичные изменения могут претерпевать удельная теплоёмкость и плотность вещества. Особенно сильную зависимость эти коэффициенты имеют в задачах Стефана и в плазме.

Если, кроме того, в процессе наблюдается ещё и изменение агрегатного состояния вещества, то уравнение теплопроводности приобретает другой вид (для случая одномерного распределения температуры) [44].

Пусть рассматривается уравнение теплопроводности:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = - \frac{\partial W}{\partial z} + \Phi(z, t, T), \quad (4.0.1)$$

где  $\theta = \theta(z, t, T)$  - энергия,

а  $W = W(z, t, T, \partial T / \partial z)$  – тепловой поток,  $\Phi$  – функция источников или стоков энергии, причём все три функции нелинейно зависят от  $T$ .

Сразу оговоримся, что никакой однозначности решения нелинейных уравнений никто не гарантирует. Но, после того, как нелинейное уравнение каким либо образом заменяется алгебраическим уравнением в конечных разностях, решение последнего непременно сводится к единственному. Таким образом, формальный переход к уравнению в конечных разностях автоматически может привести к потере одного или нескольких решений нелинейного уравнения. Это говорит об очень важном вопросе.

Формальный переход к конечно-разностному уравнению таит в себе очень важный математический парадокс (точнее ошибку) – возможную потерю некоторых решений.

Поэтому переход к алгебраическому уравнению должен быть как – то формально узаконен. Отметим ещё один важный момент – каждое уравнение переноса выражает закон

сохранения энергии или массы. Для таких уравнений, вообще говоря, используются консервативные конечно-разностные схемы, если это возможно.

Подчеркнём, что переход по системе Ньютона-Канторовича таит в себе, как нам кажется, меньше опасности, чем произвольная линеаризация с использованием метода сеток. Нам этот пункт кажется настолько важенным, что это заслуживает выделения его красным цветом.

Отметим, что разговор о методе сеток вовсе не исключает применения метода «конечно-разностных элементов» или каких-либо других подходов.

Если тепловой поток линейно зависит от производной  $\partial T / \partial z$  и выполнен закон Фурье:

$$W = -\lambda(z, t, T) \frac{\partial T}{\partial z}, \quad (4.0.2.)$$

то приходим к квазилинейному уравнению теплопроводности с дивергентной главной частью:

$$c_v(z, t, T) \frac{\partial T}{\partial t} == \\ = \frac{\partial}{\partial z} [\lambda(z, t, T) \rho(z, t, T) \frac{\partial T}{\partial z}] + \Phi(z, t, T), \quad (4.0.3.)$$

$$\text{где } c_v(z, t, T), \lambda(z, t, T), \rho(z, t, T) > 0.$$

В неоднородных средах и при появлении области с другим агрегатным состоянием функций

$$c_v, \lambda, \rho \text{ и } \Phi,$$

могут даже быть разрывными (с разрывами первого и второго рода).

Нелинейная зависимость коэффициента теплопроводности  $\lambda$  от температуры приводит к новым физическим явлениям [63], главным из которых является конечная скорость распространения тепла (температурная волна; смотри, например, [87]).

Хорошо известное рассуждение о пропорциональности теплового потока градиенту температур приводит к феноменологическому закону Фурье, известному как уравнение теплопроводности

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a \nabla^2 T. \quad (4.0.4.)$$

Уравнение (4.0.4.) хорошо описывает реальное изменение температуры, т.е. является в этом смысле адекватным в количественном отношении.

Кроме того, из него вытекает ряд следствий качественного характера, также правильно описывающих реальный процесс: сохранение количества тепла и выравнивание температуры при  $t \rightarrow \infty$  в случае тепловой изоляции тела, асимптотическое достижение температуры окружающей среды. А в случае лучеиспускания, невозможность концентрации температуры и осцилляций и т.д. Поэтому относительно этих утверждений, которые можно принять за основные, уравнение теплопроводности (4.0.4.) является адекватным в качественном отношении.

С другой стороны, хорошо известно, что из уравнения (4.0.4.) вытекает физически абсурдный вывод о бесконечной скорости распространения тепла. Таким образом, если в качестве основной характеристики процесса рассматривать скорость в распространения тепла, уравнение (4.0.4.) как модель реального процесса оказывается неадекватным не только в количественном, но и в качественном отношении.

Адекватную по новой характеристике модель можно получить, уточнив закон Фурье, учитывая инерционность молекул, которая в уравнении (4.0.4.) была опущена.

Это приводит к уравнению

$$\alpha \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} + \frac{\partial T}{\partial t} = a \nabla^2 T; \quad (4.0.5.)$$

$$(\alpha \ll A = \frac{B^2}{a})$$

где  $A$  и  $B$  - характерное время и длина в рассматриваемом процессе.

Из (4.0.5.) получаем скорость распространения тепла

$$v = \sqrt{\frac{\alpha}{a}} >> \frac{B}{A},$$

эта скорость, как это и должно быть, является конечной. Для вопросов, указанных выше, полученная здесь поправка несущественна, и поэтому рассмотрение вместо (4.0.4.) более сложного уравнения (4.0.5.) не оправдано.

Аналогичные примеры можно найти во многих разделах науки.

Например, классическая модель атома Бора, которая является неадекватной современным представлениям о внутренней структуре атома, с успехом применяется во многих разделах физики и химии.

В этом же ряду стоят и уравнения Навье — Стокса, которые достаточно редко используют в математических моделях, ввиду сложности их решения.

Процессы с изменением агрегатного состояния и значительным температурным градиентом широко применяются в химико-технологической промышленности.

Например, экзотермический процесс кристаллизации плава аммиачной селитры, сопровождающийся нестационарным теплообменом при башенном гранулировании из расплавов, широко применяется при получении гранулированных минеральных удобрений, шарообразных катализаторов, фармацевтических и пищевых продуктов.

Для некоторых веществ, например, нитрата аммония ( $\text{NH}_4 \text{NO}_3$ ), процесс грануляции сопровождается несколькими

полиморфными изменениями, также дающими определенный вклад в процесс нестационарного охлаждения гранул.

Процесс теплообмена осложняется нестационарным характером движения капель – гранул в хладагенте, что приводит к переменному во времени осреднённому коэффициенту теплоотдачи. Кроме того, меняются и локальные коэффициенты теплоотдачи, достигающие максимального значения в лобовой части частицы (гранулы) и резко убывающие к кольцу отрыва воздушного потока. Так как отрывные течения наблюдаются для чисел Рейнольдса больших 8, а движение капель – гранул происходит в диапазоне

$$10^2 < Re'' < 3 \cdot 10^3,$$

то важным является вопрос перераспределения температурных полей при решении внутренней задачи теплообмена, а также связанный с ним вопрос о характере вращения частичек (капель – гранул) во время движения в охладителе.

Указанный процесс нестационарного несимметричного теплообмена не нашёл пока достойного и полного отражения и воплощения ни в учебной, ни в монографической литературе.

Хотелось бы отметить ещё интересное направление исследований чл.-корр. РАН Курдюмова С.П. с соавторами [63]. Одна из его работ «Режимы с обострением», проведенная с В.А Галактионовым, А.П. Михайловым и академиком А.А. Самарским, внесла новую струю в исследование нелинейных уравнений переноса.

Под руководством С.П. Курдюмова были проведены исследования лазерных термоядерных мишеней средствами вычислительного эксперимента.

Курдюмов С.П. - специалист в области математического моделирования, задач математической физики и вычислительной математики, член-корреспондент РАН (1984 г.), автор и соавтор более 300 научных работ, опубликованных в России и за рубежом.

К сожалению, многие математические публикации в России в настоящее время из соображений секретности закрыты

и свободно ознакомиться с ними, по интернету пока не представляется возможным.

Е.Н. Князева и академик С.П.Курдюмов утверждают, что “ Нелинейный мир - это мир с иными, отличающимися от привычных для классической науки закономерностями” (сайт академика С.П. Курдюмова – <http://narod.ru> ).

Без сомнения, временная полоса шпиономании в России пройдёт, думается, навсегда. Научные работы опять появятся в свободном доступе, и нам будет интересно сравнить полученные академиком С.П. Курдюмовым с сотрудниками результаты с предлагаемым нами методом НКС. Будем надеяться, что следующая редакция этой монографии позволит нам сделать такое сравнение.

Одной из интереснейших задач для квазилинейных параболических уравнений с источниками (стоками) явилась задача Колмогорова-Петровского-Пискунова<sup>1</sup>. Эта задача посвящена анализу автомодельных решений указанных уравнений. Это, прежде всего, решения типа «бегущей волны».

С.П. Курдюмова интересовали вопросы неограниченного роста решений подобных задач в ограниченной области. Ясно, что эти вопросы связаны со специальными областями науки и техники.

---

<sup>1</sup> А.Н. Колмогоров, И.Г. Петровский, Н.С. Пискунов. Исследования уравнения диффузии, соединённой с возрастанием количества вещества. Бюл. МГУ-1937, т.1 № 6 с1-26

## 4.1. Задача Стефана.

В 1889 г. польский математик Иван Стефан [134] поставил совершенно новую для математики задачу, где краевая задача дополняется ещё одним краевым условием на подвижной межфазовой границе (условие на движущемся фронте кристаллизации (плавления)). Одновременно он опубликовал четыре разных по постановке физические задачи [134], с дополнительным условием на движущемся фронте.

Задача образования фронта льда рассматривалась (ставилась) Стефаном применительно к вопросу о промерзании грунта земли.

Новая постановка задачи, сразу привлекла к себе внимание математиков и физиков. При постановке задачи предполагается, что все физико-химические свойства и, в особенности, плотность рассматриваемых фаз остаются неизменными. По-видимому, такое предположение сделано было абсолютно сознательно, чтобы упростить итак достаточно сложную постановку задачи.

За исключением простейших постановок, задача Стефана в общем случае не имеет решений в замкнутой аналитической форме.

Поэтому реальный интерес к подобным задачам появился только с началом эры массового появления компьютеров и методов численного решения краевых задач.

Большое количество достаточно странных статей на тему численного расчёта задач «степановского» типа [62] было опубликовано Б. Буддаком, Ф. Васильевым и А.Б. Успенским из вычислительного центра МГУ СССР.

Правда, их больше интересовали военные приложения этих вопросов. Например, сжигание металлов лазером и поэтому трудно сравнить не достаточно подробно изложенные ими материалы с предлагаемыми нами подходами алгоритма НКС.

Определённое оживление в области численного решения «степановских» задач произошло после появления предложенного С. Л. Каменномостской (аспирантки профессора О. А. Олейник) метода замены переменных [51-52], позволяющего все сложные проблемы решения задачи Стефана «перевалить» на более сложный (нелинейный) вид коэффициента теплопроводности. Такая замена переменных, предложенная в своё время Г. Р. Кирхгофом, позволяла перейти

к новым переменным, в которых формулировка задач «стефановского» типа выглядела более удобным образом.

Благодаря такой замене переменных исчезает дивергентное слагаемое в уравнении теплопереноса. Оно просто пропадает.

С. Л. Каменомостская использовала в дополнение к замене переменных Г. Р. Кирхгофа, метод «энтальпийного» размазывания теплоты кристаллизации с помощью  $\delta$  – функции Дирака, превратив решение задачи Стефана в достаточно понятную, хотя и не совсем простую процедуру вычислительной математики, правда, при этом результат получаем в других переменных и требуется возврат к старым, чтобы оценить результаты.

Ниже мы рассмотрим целый ряд постановок задачи Стефана применительно к разным технологическим процессам и геометрически симметричным разным объектам.

## 4.2. Нелинейные краевые задачи для процессов с фазовыми превращениями при непрерывной кристаллизации в аппаратах фильтрного типа.

Нестационарные процессы тепло - и массопереноса при наличии фазовых и модификационных превращений находят широкое применение в химической, фармацевтической, пищевой, радиотехнической, текстильной, металлургической и других отраслях промышленности.

Не менее употребим технологический метод кристаллизации из расплавов для получения полимерных нитей (капрон, нейлон и др.) и металлического микропровода в аппаратах фильтрного типа. Кристаллизация одно- и многокомпонентных расплавов в формах и кристаллизаторах – это сложный процесс теплопереноса, который во многих случаях сопровождается массопереносом, естественной и механической конвекцией.

Аппараты фильтрного типа позволяют получать металлические нити драгоценных металлов для получения мало корродирующихся термопар.

После продавливания через фильтр образуется практически идеальная цилиндрическая «нить», которая, охлаждаясь по мере движения, кристаллизуется.

При создании аппаратов фильтрного типа задача теплообмена ставится следующим образом: необходимо найти высоту (длину) аппарата, обеспечивающую на выходе заданную среднерасходную температуру при принятой температуре плава и хладагента при заданной нагрузке аппарата ( $G_e / G_{ж}$  ).

В качестве достаточно обоснованного предположения в таких задачах [63] пренебрегают массообменном, конвекцией и радиальной составляющей в уравнении переноса, так как число Био мало и почти всё тепловое сопротивление сосредоточено в жидкой (твёрдой) фазе.

В этом случае удаётся получить сравнительно простую задачу, которая в одномерной постановке (в системе координат, связанной с фильтрой) запишется в виде:

$$c_v \frac{\partial T}{\partial t} + \bar{v}_c \frac{\partial T}{\partial z} =$$

$$\frac{\partial}{\partial z} [\lambda_{\infty} (T)] - \frac{2\alpha}{R_c} (T_{nc} - T''), \quad (4.2.1)$$

$$0 \leq z \leq z_0(t);$$

$$c_v \frac{\partial T}{\partial t} + \bar{v}_c \frac{\partial T}{\partial z} =$$

$$= \frac{\partial}{\partial z} [\lambda_t (T)] - \frac{2\alpha}{R_c} (T_{nc} - T''), \quad (4.2.2.)$$

$$z_0 \leq z \leq H; \quad T(0,t) = T_1(t);$$

$$T''(H, t) = T_2''(t);$$

$$[\lambda \frac{\partial T}{\partial z}]_{z=z_0+0} - [\lambda \frac{\partial T}{\partial z}]_{z=z_0-0} = \\ = \rho_0^* L (\bar{v}_c + \frac{dz_0(t)}{dt}) \quad (4.2.3)$$

Отметим, что символ Н означает длину (высоту) аппарата.  
Тепловой баланс процесса запишем так:

$$c_p'' G'' \frac{dT''}{dz} = \\ = 2\pi R_c \alpha (T'' - T_{nc}) + K (T'' - T_{bc}). \quad (4.2.4)$$

В такой постановке удобно изучать вопросы влияния физических характеристик процесса на скорость кристаллизации тонких стержней (нитей) с малой величиной критерия Био. Так как термическое сопротивление в этом случае сосредоточено в жидкой (твёрдой) фазе, то появляется возможность использовать явление резонансной кристаллизации

(температурного резонанса), когда темп падения температуры охлаждающей среды совпадает с темпом падения температуры в стержне.

Резонансная кристаллизация даёт возможность ввести процесс в экстремальных условиях (при минимальном расходе энергии).

Задача **(4.2.1) – (4.2.4)** относится к динамическим задачам Стефана, поэтому в граничное условие **(4.2.3)** входит член, учитывающий среднюю скорость движения нити.

Приведенная постановка исправляет и уточняет постановку задачи, приведенную в работе [63] (в этой работе не учтено изменение температуры охладителя и имеется ошибка в последнем члене обоих уравнений **(4.2.1) – (4.2.2)**).

### 4.3. Тепло - и массообмен при грануляции из расплавов минеральных удобрений в грануляционных башнях.

Получение гранулированных продуктов путём разбрызгивания перегретого расплава в жидкий или газообразный хладагент - достаточно часто употребляемый технологический процесс. Математическое моделирование таких процессов приводит с точки зрения математики к задачам типа Стефана.

Процесс грануляции из расплавов в грануляционных башнях достаточно долго не находил отражение в литературе. Для этого было несколько причин – отсутствие достаточно мощных ЭВМ и недостаток специалистов по МММ.

Получение гранулированной аммиачной селитры (нитрата аммония) и мочевины в СССР было неразрывно связано со стремлением получения высоких урожаев в сельском хозяйстве. Поначалу казалось, что урожай колосовых растений почти пропорционален количеству внесенных минеральных удобрений.

Лишь спустя десятилетия, изучая американский опыт, специалисты в 70-х годах прошлого века пришли к печальному выводу, что подкормка колосовых растений полезна растениям только в течение нескольких определённых часов.

Однако в СССР ещё не были созданы современные аппараты, позволяющие определять необходимые часы подкормки растений. Завоз соответствующих приборов из США в СССР представлялся слишком дорогим удовольствием. Кроме того, в США подкормка растений производилась жидкими минеральными удобрениями, а в СССР – гранулированными. Гранулированные минеральные удобрения завозились на поля Подмосковья абы как, иногда просто в осенний период не распакованными. Это автор монографии наблюдал собственными глазами.

Всё это говорит о том, что миллиарды тонн минеральных удобрений были произведены в СССР не просто напрасно, а во вред экологической ситуации, так как отравляли подземные воды на громадных территориях страны.

В начале 70-х годов прошлого века в ГИАП был спроектирован и создан агрегат производства аммиачной селитры АС-72, а затем и ещё более мощный агрегат АС-76 с производительностью 60 т/час.

Этот агрегат должен был заменить устаревшие агрегаты АС-67 и АС-72 с низкой производительностью.

Основой для определения параметров этого проекта послужили результаты расчётов охлаждения аммиачной селитры по программе, разработанной сотрудником ГИАП А.М. Вайнбергом [47].

Сама постановка задачи (написание математической модели) принадлежала Марку Ефремовичу Иванову и его сотруднику Виктору Михайловичу Линдину.

Задача была сформулирована и поставлена в 1967-1968 гг.

В расчёте параметров этой гранбашни принимали участие А.М.Вайнберг , К.М. Захарова, Виктор Михайлович Линдин и Марк Ефремович Иванов.

Как уже говорилось, алгоритм и программа расчёта была создана А.М. Вайнбергом [47].

Оппонентом этих расчётов была Елена Алексеевна Казакова.

Её монографии [114 -115], предполагали, что все фазовые превращения в гранулах аммиачной селитры уже произошли. Таким образом, самую сложную часть расчёта (решение внутренней задачи теплопроводности) она просто опускала.

В итоге, расчёт необходимой высоты гранбашни она автоматически превращала в лёгкое упражнение для студентов. Это допущение было вполне правомерно, так как Елена Алексеевна была в курсе наших расчётов [65, 109-109-е].

Одним из достоинств (точнее удобств) при расчёте процесса грануляции аммиачной селитры было наличие достоверных данных о её физико-химических свойствах.

Это резко отличало ситуацию с расчётом грануляции мочевины ( $\text{CON}_2\text{H}_4$ ).

Несколько позднее, примерно в 1975-1976 гг. А.М. Вайнбергом был проведен расчёт высоты гранбашни мочевины.

Кроме того, им были проведены экспериментальные исследования процесса охлаждения капель-гранул мочевины на созданной им же новой экспериментальной установке.

Во время этих исследований выяснилось, что нет надёжных данных по физико-химическим свойствам мочевины. Причём ошибки по физхим свойствам выходили за пределы допустимого и перекочевали с ошибкой из правильных немецких источников в советские издания. Ошибочность физхим данных мочевины требовала срочных дополнительных исследований, которые и были проведены в ГИАП в лаборатории профессора И.Ф. Голубева.

Поиск физико-химических (физхим) свойств мочевины привёл к потрясающим выводам [65], что они (физхим. свойства) практически ещё достоверно не изучены советскими специалистами.

А.М. Вайнберг создал в 1975-1976 гг. опытную установку для изучения процесса кристаллизации мочевины. Местоположение королька термопары фиксировалось двумя фотоаппаратами в двух перпендикулярных плоскостях одновременно. Капля расплава мочевины в этих экспериментах подвешивалась на сложную систему из двух человеческих волосков и термопары палладий – золото – палладий. Эта установка впоследствии эксплуатировалась в течение 10 лет сотрудниками лаборатории М.Е. Иванова.

Одним из важных вопросов, связанных с расчетом кристаллизации гранул минеральных удобрений, являлось предположение о равнодоступности их поверхности, что означало допущение правомерности использования симметричной математической модели гранул (в виде шара). Дебаты по этому поводу не умолкали в течение ряда лет «благодаря» усердным стараниям нашего постоянного грозного оппонента, дважды кандидата наук Е.А. Казаковой.

Она даже построила опытную установку высотой 6 метров, но на этой установке невозможно было достичь «скорости витания» крупных гранул и её возражения на этом этапе экспериментов прекратились.

Наши доводы о равнодоступности гранул аммиачных удобрений опирались на определённые аэродинамические исследования и аэродинамические соображения.

Рассмотрим схематично процесс охлаждения и кристаллизации из расплавов минеральных удобрений в гранбашнях.

Ажурная высотная металлоконструкция поддерживает тонкостенную листовую нержавеющую сталь - короб гранбашни, представляющий собой прямоугольник или круг в поперечном сечении.

Рассмотрим подробнее диспергирование расплава аммиачной селитры в гранбашне. Из лейки гранулятора (статического или центробежного) под действием мощного гидростатического давления вылетают сотни струй перегретого высококонцентрированного расплава аммиачной селитры.

Отметим, что в центробежных грануляторах ещё используются центробежные силы.

Из лейки гранулятора вытекает ряд струй (примерно 300-3000 струй) плава аммиачной селитры.

Искусственная и естественная вибрация диспергатора, совместно с возникающими на поверхности струй капиллярными волнами, от потока встречного воздуха приводят к дроблению струй на капли.

Процесс отрыва капель от возмущённой свободной поверхности струи происходит за счёт динамического воздействия окружающей газовой среды. Волны на поверхности струй, имеющие волновое число, меньшее некоторого критического значения, оказываются неустойчивыми, следствием чего является рост их амплитуды и отрыв капель от гребней волн. Образующийся полидисперсный распыл имеет капли с широким спектром диаметров. Построенная Д.Релеем [68] линейная теория распада струй в широком диапазоне технологических параметров диспергирования приводит к следующему соотношению между диаметром капель ( $d_k$ ) и диаметром струй( $d_c$ ):

$$d_k \cong 1.89 d_c \quad (4.3.1)$$

Эта формула в дальнейшем уточнялась рядом исследователей (Вебером, Лышевским и т.д.). Согласно расчётам А.С. Лышевского [68], учёт сопротивления среды и физических свойств диспергируемого материала приводит к формуле:

$$d_k \cong 2,06 d_c \exp(0,051 * \rho * We)^* Mf^{0,014}, \quad (4.3.2)$$

где

$$Mf = \mu_{\infty}^2 / \rho_{\infty} * \sigma * d_c; \quad \rho = \rho'' / \rho_{\infty}. \quad (4.3.3.)$$

Более поздние исследования, использующие нелинейную теорию распада струй, показали, что дополнительно появляются капли - сателлиты значительно меньшего размера. После отрыва от струи, капля в течении одной - трёх секунд достигает скорости витания.

В зависимости от размера капли и скорости охладителя скорость витания колеблется от 6 до 12 м / сек и более.

Следствием этого является разное время пребывания капель – гранул в аппарате (гранбашне).

Рассмотрим схематично процесс тепломассообмена. Как правило, при кристаллизации веществ из расплавов температура плава на несколько градусов выше температуры кристаллизации вещества. Это делается для того, чтобы не происходила кристаллизация в самих лейках гранулятора. Движение расплава в среде охладителя вызывает механическую внутреннюю конвекцию в струе и капле. В результате этого явления кондуктивный теплоперенос и массоперенос за счёт разности химических потенциалов дополняются механизмом конвективного тепломассопереноса.

При понижении температуры диспергированной массы до температуры кристаллизации, интенсивность механической конвекции падает.

При температуре струи выше 400 градусов Цельсия, необходимо учитывать радиационный перенос тепла от струи расплава.

Дальнейшее охлаждение расплава приводит к появлению на его поверхности кристаллической модификации, которая по мере теплоотвода проникает всё дальше вглубь капли-гранулы. Движение фронта кристаллизации сопровождается выделением скрытой теплоты фазового превращения.

Аналогичным образом протекают и модификационные превращения кристаллической фазы, так как полиморфные изменения являются реальной картиной при кристаллизации плава аммиачной селитры.

Скрытая теплота полиморфных изменений в гранулах аммиачной селитры не столь велика как при её кристаллизации.

Как уже отмечалось выше, одновременно с теплопередачей может происходить и транспорт массы (например, транспорт остаточной влаги в плаве от маточника (жидкой фазы-расплава) к поверхности кристаллической модификации и испарение её в парогазовый поток). Это приводит к временной приостановке подвода тепла непосредственно к поверхности частицы за счёт дополнительного охлаждения поверхности последней за счёт испарения.

Процесс теплообмена осложняется нестационарным характером движения капель - гранул в хладагенте, что приводит к переменному во времени осреднённому коэффициенту теплоотдачи. Кроме того, меняются и локальные коэффициенты

теплоотдачи, достигающие максимального значения в лобовой части и резко убывающие к кольцу отрыва потока от капли-гранулы. Так как отрывные течения наблюдаются уже для чисел Рейнольдса больше 8, а движение капель-гранул происходит в диапазоне

$$10^2 < Re'' < 3 \cdot 10^3,$$

то важным моментом является вопрос перераспределения температурных полей при решении внутренней задачи теплообмена, а также

связанный с ним вопрос о характере вращения капель-гранул во время движения в охладителе. Указанный процесс нестационарного несимметричного теплообмена не нашёл пока отражения ни в учебной ни в монографической литературе.

Одним из спорных моментов при кристаллизации гранул является вопрос образования в грануле аммиачной селитры некоторой выемки-полости. Первым в литературе на это явление обратил внимание Курин, а затем Vernede [17-18].

Автор работы [17] выдвинул гипотезу, что гранулы с малой выемкой получаются за счёт разности плотностей, а большая полость связана с высоким перегревом плава. Причём слишком большая полость образуется при большом диаметре дюзов (отверстий) лейки гранулятора.

Холин с сотрудниками [18] объясняет этот феномен усадкой материала, вследствие разности плотностей, а прорыв в поверхности (большая каверна) – выдавливанием маточника

через неокрепшую корочку частично закристаллизовавшейся гранулы.

Дальнейшее развитие математической модели процесса теплопередачи в процессе кристаллизации гранул аммиачной селитры шло именно в направлении учёта термической усадочной раковины (в нашей терминологии).

Гельперин с соавторами [117], впервые изучил влияние усадочной раковины на поле температур при решении внутренней задачи. Наличие усадочной раковины допускалось только по центру капли-гранулы.

Расчеты этих авторов показали значительное расхождение с данными, не учитывающими наличие термической усадки. При этом, однако, модель не учитывала конвективного переноса тепла за счёт движения границы усадочной раковины.

Позднее, в диссертации А.Л. Тарана (МИТХТ) (сотрудника Гельперина) был впервые проведен расчёт охлаждения капли-гранулы аммиачной селитры с учётом влияния несимметричного обтекания гранулы (а, следовательно, с переменным по поверхности локальным коэффициентом теплоотдачи).

К сожалению, мы не имеем возможности полностью оценить вклад Александра Тарана в расчет башенного гранулирования минеральных удобрений, так как мы не знаем, были ли эти расчёты связаны с массовыми обсчётами гранул в распыле, или же это были одиночные расчёты без сведения баланса по охлаждающей среде.

Тем не менее, его вклад в вопрос несимметричного охлаждения гранул несомненен. Отметим, что дальнейшее направление работ А.Л. Тарана пошло по созданию условий получения гранулированных минеральных удобрений без термической усадочной раковины (по нашему мнению, это ошибочное направление, как будет объяснено позже).

Мы сейчас приведём полную математическую модель процесса башенной грануляции минеральных удобрений. При изложении мы будем опираться на наши работы [44, 109, 109-е].

Кроме того, в пятом пункте этой главы мы дадим общий подход к решению нелинейных краевых задач для уравнений параболического типа.

Рассмотрим один из центральных моментов производства минеральных удобрений - процесс башенного гранулирования аммиачной селитры.

Задача рассматривается в симметричной относительно центра гранулы постановке в предположении, что применимо уравнение Фурье.

Ниже приведена математическая постановка задачи кристаллизации гранул аммиачной селитры в гранбашнях. Как уже было сказано выше, изложение ведётся согласно работам [44, 109], однако, из-за небрежности наборщика во многих местах в формулах перепутаны буквы и индексы  $\tau$  и  $r$ .

За это один из соавторов статьи [109 -109-е] из ТОХТ, Вайнберг Александр, вынужден принести свои глубочайшие извинения, но ему не были предоставлены для правки материалы гранок статьи.

В сферических координатах уравнение Фурье для капли-гранулы (внутренняя задача) запишется следующим образом:

$$c_p \rho \frac{\partial T}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial r} (\lambda \frac{\partial T}{\partial r}) + \frac{2\lambda}{r} \frac{\partial T}{\partial r} \quad (4.3.4.)$$

граничные условия для теплоотдачи с поверхности гранулы имеют следующий вид:

$$\left. \frac{\partial T}{\partial r} \right|_{r=R-0} = - \frac{\alpha}{\lambda} (T_p - T''), \quad (4.3.5.)$$

причём коэффициент теплоотдачи  $\alpha$  определяют по формулам для конвективного теплообмена, например, для диапазона  $200 < Re < 3000$ , по формуле работы [45]

$$Nu'' = 0.37(Re'')^{0.6} (Pr'')^{1/3}. \quad (4.3.6.)$$

Здесь входящую в число  $Re''$  скорость движения гранулы в охлаждающей среде находят из системы уравнений движения гранулы:

$$m \frac{d^2x}{d\tau^2} = (-\frac{1}{2} \xi F \rho v^2)_x; \quad (4.3.7.)$$

$$m \frac{d^2y}{d\tau^2} = (-\frac{1}{2} \xi F \rho v^2)_y + m^*g, \quad (4.3.8.)$$

где координата **x** соответствует горизонтальной координате, а **y** – вертикальной координате.

Причём, согласно имеющимся в литературе данным [45], для турбулентного и переходного режимов обтекания гранул коэффициент сопротивления  $\xi$  следует считать в первом случае величиной постоянной, а во втором случае – величиной, зависящей от числа Рейнольдса по степенному закону типа

$$\xi = 18.5 (\text{Re}^*)^{-0.6}.$$

В центре гранулы необходимо принять краевое условие (симметричности охлаждения):

$$\left. \frac{\partial T}{\partial r} \right|_{r=0} = 0. \quad (4.3.9.)$$

Необходимо напомнить, что при охлаждении аммиачной селитры, вещества заведомо полиморфного, происходит несколько фазовых превращений, а не только кристаллизация из расплава.

На сferах  $r_n$ , температуры которых достигли  $T_n$ , соответствующего, фазовым превращениям между n-ой и (n+1)-ой модификациями, происходит тепловыделение, описываемое уравнениями вида (4.3.10.) (при  $r = r_n$ ,  $T = T_n = \text{const}$ ) :

$$\lambda \left. \frac{\partial T}{\partial r} \right|_{rn+0} - \lambda \left. \frac{\partial T}{\partial r} \right|_{rn-0} = L_n \rho \frac{dr_n}{d\tau}. \quad (4.3.10.)$$

Уравнение теплового баланса гранулы и охлаждающей среды на элементарном участке запишется в виде:

$$-4\pi r_n^2 \lambda \frac{\partial R}{\partial r} \Big|_{r=r_0} \Delta \tau = c_p'' \rho'' V_1'' \Delta T'', \quad (4.3.11.)$$

и, соответственно на интервале  $(0, y_{nol})$  в виде:

$$\begin{aligned} -4\pi r_n^2 \lambda \int_0^{y_{nol}} \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=r_0} d\tau = \\ c_p'' \rho'' V_1'' (T_{\text{вых}}'' - T_{\text{вых}}''), \end{aligned} \quad (4.3.12.)$$

где

$$V_1'' = 4 V'' \rho'' g \pi r^3 / 3G. \quad (4.3.13.)$$

Начальные условия процесса ( при  $\tau = 0$  )

$$T(r, \tau) = f(r); \quad v = v_{\text{вых}}.$$

Остановимся подробнее на вопросе о функции  $f(r)$ . Для случая капель малых размеров, вещества которых достаточно вязко и обладает относительно хорошей теплопроводностью, передачей тепла за счёт механической внутренней конвекции можно пренебречь по сравнению с передачей тепла теплопроводностью.

В этом случае (назовём его случаем I) процесс теплоотдачи внутри капли (гранулы) резонно рассматривать как процесс, протекающий по описанному выше механизму нестационарного теплообмена.

Возможен и противоположный случай (назовём его случаем II), когда в капле преобладает перенос тепла за счёт механической конвекции. В таком случае следует предварительно рассчитать начальную стадию процесса, при которой теплообмен внутри капель описывается уравнениями, учитывающими механическую конвекцию, например, аналогично массообмену [48]

$$Nu = 0.65 \cdot Re^{0.5} \left( 1 + \mu / \mu^* \right)^{-0.5} \quad (4.3.14.)$$

Такой расчёт должен вестись до того момента, когда за счёт кристаллизации в грануле прекратится механическая конвекция. Оценки показывают, что влиянием тепловой конвекции в грануле для обычных «типовых» условий можно пренебречь.

Момент завершения начальной стадии затем принимается за начало расчётов по схеме нестационарного теплообмена, причём  $f(r)$  в этот момент можно полагать величиной постоянной, равной температуре кристаллизации.

Возникает, однако, вопрос о том, при какой степени кристаллизации вещества капли  $\varphi$  её наружная поверхность станет достаточно прочной (жёсткой) и прекратится механическая конвекция, возникающая за счёт касательных напряжений со стороны окружающей (охлаждающей) среды.

В предельном случае достаточно сильной механической конвекции можно полагать, что образующиеся на поверхности кристаллы распределяются по объёму гранулы.

Пока объёмная концентрация кристаллов невелика, увеличение «эффективной» вязкости среды можно определить по известной [48] зависимости

$$\mu^* = \mu (1 + 5/2 \varphi). \quad (4.3.15.)$$

Как видно из соотношения (4.3.15.), внутренний теплообмен при этом практически остаётся неизменным. Однако, по мере увеличения  $\varphi$  должен наступить момент, когда начинается сильное

взаимодействие между отдельными кристаллами.

Это явление должно проявиться при приближении к точке полного соприкосновения всех кристалликов. Как известно, при упаковке шаров такой точке соответствует  $\varphi = 0.5 - 0.6$ .

Учитывая, однако, что форма кристаллов (дендритов) обычно существенно отличается от шаровой, а также то обстоятельство, что сильное взаимодействие между частицами должно наступить несколько ранее их полного соприкосновения, можно считать величину  $\varphi$  при этом явлении существенно меньшей, например, в первом приближении равной 0.3.

Таким образом, до  $\varphi = 0.3$  расчёт внутреннего теплообмена следует проводить на основе зависимостей для механической конвекции (с учётом 0.3 доли скрытой теплоты кристаллизации), после чего его надо вести по схеме нестационарного теплообмена, причём то, что в объёме гранулы содержится 0.3 части твёрдой фазы, можно учесть соответствующим снижением скрытой теплоты кристаллизации (введением множителя, равного 0.7).

Возможно протекание теплоотдачи в начальной стадии и по смешанной схеме, совмещающей оба рассмотренных выше механизма.

При этом представляется рациональным расчёт теплоотдачи вести по схеме нестационарного теплообмена с заменой  $\lambda$  на величину  $\lambda_{\text{оф}}$ , включающую в себя дополнительный конвективный перенос тепла в виде  $\lambda_{\text{оф}} =$

$\lambda + \lambda_{\text{кон}}$ ; добавочная величина  $\lambda_{\text{кон}}$  должна определяться из сопоставления результатов эксперимента и расчётных данных.

При решении поставленной задачи представляет интерес нахождение пространственного и временного распределения температур в грануле. Кроме того, имеется одна характерная величиной, то во втором случае её следует считать известной, а искомым становится соотношение величина, представляющая и практический интерес – адиабатическая температура, то есть та температура, которая установится в грануле после её адиабатического терmostатирования. Адиабатическая температура может быть не равна температуре фазового или модификационного превращения или равна одной из этих температур.

Если в первом случае адиабатическая температура неизвестна и является искомой между массами двух модификаций (или фаз), получающихся после адиабатического терmostатирования.

Согласно сказанному, из уравнений теплового баланса получим для случая (I)

$$T_a = \bar{T} + \frac{1}{mc_p} \left[ \sum_{n_c}^{n_s} \left( m_n \sum_{k_0}^n L_k \right) - m \sum_{k_0}^{k_a} L_k \right]; \quad (4.3.16.)$$

Для случая (II) получаем следующее соотношение

$$\frac{m_a}{m} = \frac{c_p}{L_a} (\bar{T} - T_a) + \sum_{n_c}^{n_s} \left( \frac{m_n}{m} \sum_{k_0}^n \frac{L_k}{L_a} \right) - \sum_{k_0}^{k_a} \frac{L_k}{L_a} \quad (4.3.17.)$$

Сформулированная выше задача относится к классу нелинейных краевых задач (или задач со слабой нелинейностью по О.А. Ладыженской [50]) стефановского типа.

Из имеющихся приближённых методов решения подобных задач с помощью вычислительных машин наиболее общим и эффективным является метод, основанный на конечно-разностной аппроксимации исходной системы, после введения функции удельного теплосодержания (энталпии). Этот подход основан на замене переменных, предложенной когда-то Г.Р. Кирхгофом, а позже использованным в своём алгоритме С. Л. Каменомостской [51-52].

Обозначим

$$U(T) = \int_{T_0}^T \lambda(t) dt. \quad (4.3.18.)$$

Тогда уравнение (4.3.4.) можно записать в виде

$$\frac{\partial U}{\partial \tau} = a \left( \frac{\partial^2 U}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial U}{\partial r} \right), \quad (4.3.19.)$$

где

$$a = \lambda / c_p \rho.$$

Последнее уравнение (4.3.19.) с условием Стефана эквивалентно уравнению:

$$\frac{\partial J}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 U}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial U}{\partial r}, \quad (4.3.20.)$$

где функция удельного теплосодержания  $J$  записывается следующим образом:

$$J(U) = \int_{U_0}^U \left[ \frac{1}{a} + \sum_{k=k_0}^n L_k \rho \delta(t - U_k) \right] dt , \quad (4.3.21.)$$

а  $\delta(t - U_k)$  – дельта функция Дирака.

$J(U)$  при  $U_k = U(T_k)$  где ( $k=0,1,2,\dots, k_0$ ) имеет разрывы первого рода, а её производная по  $U$  при  $U = U_k$  обращается в бесконечность.

Это обстоятельство затрудняет непосредственное применение к уравнению (4.3.20.) разностных схем на равномерной сетке, поэтому целесообразно предварительно выполнить сглаживание функции  $J(U)$ . Можно провести сглаживание функции нулевого порядка наклонным отрезком или сглаживание сопрягающимися дугами кривых [53].

Сглаженную функцию обозначим через  $v(U)$ . В интервалах сглаживания

$\bar{\omega} = (U_k - \omega, U_k + \omega)$ , где  $\omega$  – достаточно малые числа,

потребуем выполнения условия нормировки

$$\int_{\bar{\omega}} v'(U) du = \int_{\bar{\omega}} J'(U) du . \quad (4.3.22.)$$

В целях упрощения аппроксимации уравнения

(4.3.20.) при численном решении задачи проведём ещё одну замену переменных

$$G = u^* r, \quad (4.3.23.)$$

тогда уравнение (4.3.20.) после линеаризации (4.3.21.) запишется так

$$\frac{\partial^{s+1} G}{\partial \tau} = \sigma^s \frac{\partial^2 G^{s+1}}{\partial r^2} - C^s (G^{s+1} + G^s), \quad (4.3.24.)$$

где  $\sigma^s =$

$$= 1 / (\frac{\partial}{\partial r} G^s (G^s, r)); \quad C^s = \sigma^s \frac{\partial}{\partial r} G^s (G^s, r) \frac{\partial G^s}{\partial r}, \quad (4.3.25.)$$

( $s = 0, 1, 2, \dots$ ),  $s$  – номер последовательного приближения.  
Краевые условия при этом записываются в виде

$$\frac{\partial^{s+1} G}{\partial r} \Big|_{r=0+0} = G^{s+1} (h, \tau) / h; \quad (4.3.26.)$$

$$\frac{\partial^{s+1} G}{\partial r} \Big|_{r=rn-0} = \chi_1 G^{s+1} + \chi_2; \quad (4.3.27.)$$

$$\psi \left( \frac{G(r, 0)}{r} \right) = \psi [U(f(r))], \quad (4.3.28.)$$

где  $\chi_1 = 1/r$ ,  $\chi_2 = -\alpha \psi' \left( \frac{G^{s+1}}{r} - \frac{G^s}{r} \right) + \alpha T'$ ,

$\psi(u)$  – функция, обратная функции  $u = u(T)$ . Существование функции  $\psi(u)$  следует из монотонности функции  $u(T)$ .

Сформулированная выше задача (4.3.24.) – (4.3.28.) является линейной краевой задачей для уравнения параболического типа. Для её численного решения должна быть проведена дискретизация, состоящая в замене функций и их производных приближенными значениями в области определения задачи.

Эта область разбивается равномерно (или нет) точками – называемыми координатами построенной сетки.

Для аппроксимации искомых функций и её производных может быть использована явная или неявная разностная

итерационная схема, например, следующая неявная двухслойная итерационная схема на четырёхточечном симметричном шаблоне, где производная по времени аппроксимируется разностью «вперёд», а производные по пространству-центральными разностями :

$$h^2(z_i^{j+1} - z_i^j) = \Lambda(z) + h^2 I c_i^{j+1}, \quad (4.3.29.)$$

где оператор  $\Lambda$  имеет вид:

$$\Lambda(z) = \sigma^l (z_{i+1}^{j+1} - 2z_i^{j+1} + z_{i-1}^{j+1}) - h^2 I * c z_i^{j+1};$$

$$1 \leq i \leq N_1 - 1; 0 \leq j \leq N_2; z_0^{j+1} = \chi_2 / (2 \sigma^l + \chi_1);$$

$I$  – шаг сетки по временной координате;  $h$  – шаг сетки по пространственной координате. Построение пространственной сетки рассмотрено в пункте 4.5.

Решение полученной системы линейных алгебраических уравнений проводится методом «прогонки», о котором уже говорилось выше. В современной литературе этот метод также называется методом факторизации [143].

Напомним, что метод «прогонки» применяется для решения системы уравнений с «трёхдиагональной» матрицей.

«Трёхдиагональной» матрицей называют матрицу следующего вида:

$$A = \begin{pmatrix} C_1 & B_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ A_2 & C_2 & B_2 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & A_3 & C_3 & B_3 & \cdots & 0 & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & A_{n-1} & C_{n-1} & B_{n-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & A_n & C_n \end{pmatrix},$$

где отличные от нуля значения располагаются на главной диагонали матрицы и 2 – х ближайших к ней. Метод очень экономичен с точки зрения количества вычислений и вычислительно устойчив при определённых условиях [143].

Для решения такой системы вида  $A * x = F$  или, что то - же самое,

$$A_i x_{i-1} + C_i x_i + B_i x_{i+1} = F_i$$

используется метод прогонки<sup>2</sup>, называемый также методом факторизации, основанный на важном предположении, что искомые неизвестные связаны рекуррентным соотношением:

$$x_i = \alpha_{i+1} x_{i+1} + \beta_{i+1}, \text{ где } i = n - 1, 1.$$

Альфа и бета - называются «прогоночными» коэффициентами.

Используя краевые условия, находят сначала «нулевые» «прогоночные» коэффициенты а затем все остальные коэффициенты по указанной выше рекуррентной формуле.

Затем, когда «прогоночные» коэффициенты найдены, начинают обратную «прогонку» - то есть вычисляют искомую функцию  $x_i$ , используя найденные «прогоночные» коэффициенты.

---

<sup>2</sup> Костомаров Д.П., Фаворский А.П. Вводные лекции по численным методам. ФИЗМАТЛИТ, 2006, с.184

## 4.4. Обобщение задачи Стефана.

В начале этой главы мы рассказали о математике И. Стефане, который внёс громадный вклад в постановку задач с нелинейными краевыми условиями на движущихся внутренних фронтах кристаллизации или фильтрации.

При этом Иван Стефан, автор постановки таких задач, я думаю, вполне осознанно предположил, что физико-химические свойства фаз постоянны.

Главное в этом предположении, что плотности фаз одинаковы. На самом деле это не просто не очень точно, а в реальных процессах совсем не так.

Эксперименты показывают, что в полностью охлаждённых гранулах аммиачной селитры радиус усадочной раковины в среднем равен половине радиуса самой гранулы.

Этот парадоксальный результат поначалу очень удивил исследователей.

Однако оказалось, что эта каверна оказывает на теплообмен влияние совсем не столь значительное, как предполагали некоторые исследователи (такие, например, как Е.А. Казакова и А. Таран).

Это объясняется тем, что объём каверны (усадочной раковины) является одной восьмой от объёма капли-гранулы, а теплоёмкость тела пропорциональна его объёму.

Это, например, мгновенно разглядел профессор Тель - Авивского университета А. Воронель.

Поэтому, учитывая движение границы маточного раствора к поверхности гранулы, эта ошибка ориентировочно составляет чуть больше 10-12 %, которые несёт в себе просто учёт вклада объёма усадочной раковины и одновременно расширение усадочной полости.

В нашей работе [57] приведена постановка задачи кристаллизации гранул в случае образования усадочной раковины в её центре. Как и в пункте 4.3. будем считать картину процесса известной. Вначале поверхностный слой капли за счёт теплообмена охлаждается до температуры кристаллизации. После кристаллизации в поверхностном слое образуются кристаллы-дендриты. Поэтому такой пористый кристалл за счёт капиллярных сил подтягивает расплав (маточный раствор) к

поверхности закристаллизовавшейся капли- гранулы - точнее к поверхности шарика-гранулы ( полу - шар, полу - капля).

В конце концов, твёрдая корочка поверхности становится непроницаемой для расплава, а следующая часть приповерхностного слоя тоже кристаллизуется и начинает по своим порам подтягивать расплав. В результате, где-то внутри гранулы образуется усадочная раковина, представляющая для простоты полый шар, наполненный горячим газом.

Для простоты также предположим, что и сама капля расплава тоже представляет собой каплю-шар с внутренней полостью. Процесс охлаждения заканчивается, когда полый шарик полностью закристаллизуется. Будем полагать, что фронт кристаллизации выделяет тепло, согласно модели Стефана. Уравнение охлаждения поверхностного слоя капли в сферических координатах запишется, как и ранее

$$c_p \rho \frac{\partial T}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial r} (\lambda \frac{\partial T}{\partial r}) + \frac{2\lambda}{r} \frac{\partial T}{\partial r}, \quad (4.4.1.)$$

здесь все теплофизические характеристики соответствуют либо жидкой, либо твёрдой фазе.

Когда проходит фронт кристаллизации, то на фронте кристаллизации принимаем условие Стефана:

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{rn+0} - \lambda \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{rn-0} = L_n \rho \left( \frac{dr_n}{d\tau} \right). \quad (4.4.2.)$$

Теперь нам надо отразить движение плава внутрь кристаллической структуры:

$$\pi r^2 \frac{dr}{d\tau} = \pi R_p^2 \frac{dR_p}{d\tau} \quad \text{или}$$

$$\omega(r, \tau) \equiv \frac{dr}{d\tau} = (R_p / r)^2 \frac{dR_p}{d\tau}, \quad (4.4.3.)$$

Где  $\omega$  - локальная скорость движения плава к фронту кристаллизации,

$r$  - текущий радиус произвольной точки плава,

$\tau$  - время.

На поверхности термической полости, по – видимому, нужно задать условие

$$\begin{aligned} & \{ \rho_t L + [c_t(T_0) - c_{\infty}(T_0)] T_0 \} \frac{dR_0}{d\tau} - c_{\infty}(T_0) T_0 \omega(R_0, \tau) = \\ & = \lambda_{\infty}(P^+) \frac{\partial T(P^+)}{\partial r} - \lambda_t(P^-) \frac{\partial T(P^-)}{\partial r}, \end{aligned} \quad (4.4.4.)$$

где символ  $P$  соответствует поверхности усадочной раковины, а верхний символ соответствует минимальному увеличению или уменьшению значения этой величины.

Величины коэффициентов  $\lambda$ ,  $c$ ,  $\rho$  - теплопроводность, объёмная теплойёмкость и плотность соответственно.

Соотношение между радиусом полости (усадочной раковиной) и радиусом первоначальной капли можно вычислить из следующих соображений:

$$\rho_{\infty} V_{\text{кап. нач}} = \rho_{\infty} V_{\infty} + \rho_t V_t; \quad (4.4.5.)$$

из этого соотношения получаем текущий радиус усадочной раковины:

$$R_{yp} = R_{\infty} \sqrt[3]{(1 - \rho_{\infty})} \cdot I \rho_t, \quad (4.4.6.)$$

где  $V$  – объём,  $R_0$  - расстояние от центра до фронта кристаллизации,

$R_{yp}$  - радиус усадочной раковины.

Для предельного случая, когда заканчивается кристаллизация гранулы, формула (4.4.6.) принимает вид :

$$R_{yp} = R_k \sqrt{1 - (\rho_{sc} / \rho_m)} \quad (4.4.7.)$$

При этой физической картине кристаллизации капли плава нам представляется следующим образом. Вместо капли расплава осталась твёрдая оболочка и по центру – усадочная раковина с остаточными парами. Более подробно система обсуждается в [45].

## 4.5. Решение нелинейных краевых задач для уравнений параболического типа методом НКС.

Выше мы рассматривали метод Ньютона-Канторовича, применяемый для решения нелинейных уравнений совместно с методом сеток, или, как мы его назвали, метод (алгоритм) **НКС**.

Мы рассмотрим применение **НКС** к достаточно общей нелинейной задаче, которая возникает в задачах переноса тепла и массы. При этом, будем исходить из того, что все коэффициенты позволяют считать само уравнение уравнением параболического типа:

$$\eta(\tau, \mathbf{x}, \mathbf{u}) \frac{\partial u}{\partial \tau} = F(\tau, \mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_n, \mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n), \quad (4.5.1.)$$

где  $\mathbf{u}(\tau, \mathbf{x})$  – неизвестная функция и  $\mathbf{x} = \{\mathbf{x}_i\} \in E^n$ ;

$$\mathbf{y}_i = \partial u / \partial x_i; \mathbf{q}_i = \partial^2 u / \partial x_i^2;$$

$$0 < \eta(\tau, \mathbf{x}, \mathbf{u}), i = 1, \dots$$

Пусть  $F$  – нелинейная функция, непрерывная со своими производными  $\partial F / \partial u$ ,  $\partial F / \partial y$  и  $\partial F / \partial q_i$ .

Используя предлагаемый нами метод линеаризации (**НКС**), базирующийся на чисто формальном вычислении дифференциала Фреше [14, 55-56] применительно к уравнению (4.5.1.), получим линейное уравнение параболического типа (второго порядка относительно «сеточных» значений искомой функции  $u^{s+1}$ ).

В итоге получим следующее линеаризованное уравнение:

$$\eta^s \frac{\partial u^s}{\partial \tau} + [\frac{\partial \eta}{\partial u} \frac{\partial u^s}{\partial \tau} - \frac{\partial F}{\partial \tau}] [u^{s+1} - u^s] -$$

(4.5.2.)

$$-\sum_{i=1}^n \frac{\partial F}{\partial y_i} (y_i^{s+1} - y_i^s) - \sum_{i=1}^n \frac{\partial F}{\partial q_i} (q_i^{s+1} - q_i^s) - F = 0,$$

индекс  $s$  - номер итерации, указывающий, что, что данная функция вычисляется при

$$u^s = u (s = 0, 1, 2, \dots).$$

Если предположим, что символ  $\tau$  (тай) соответствует времени, то это будет означать, что неизвестная функция вычисляется на предыдущем временном слое. При этом в качестве начального приближения берётся начальное условие краевой задачи.

Таким образом, исходная нелинейная краевая задача для уравнения (4.5.1.) **редуцирована** к линейной краевой задаче для уравнения (4.5.2.). Конечно, при этом предполагается, что краевые условия при необходимости линеаризованы таким же путём.

(Под необходимостью подразумевается наличие нелинейности в краевых условиях).

Сделаем небольшое отступление для пояснения метода вычисления дифференциала Фреше нелинейного оператора.

Рассмотрим более подробно процесс нахождения дифференциала Фреше для весьма простого дифференциального оператора с дивергентной правой частью:

$$\frac{\partial u}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial x} (k(u) \frac{\partial u}{\partial x}); \quad (4.5.3.)$$

Если читатель заглянет в предметный указатель этой монографии, то увидит, что вычисление дифференциала Фреше нелинейного оператора столь же просто, сколь просто вычисление дифференциала функции в обычном математическом анализе, следовательно, под силу практически любому второкурснику (см. примеры в [108]).

Итак, повторяя главу 2, запишем процесс Ньютона-Канторовича для достаточно простого нелинейного уравнения (4.5.3):

$$P'(\overset{s}{u})(\overset{s+1}{u} - \overset{s}{u}) = -P(\overset{s}{u}), \quad (4.5.4)$$

где

$s$  – номер последовательного приближения.

Вычислим теперь дифференциал Фреше оператора

$$P(u) = \left\{ \frac{\partial u}{\partial \tau} - \frac{\partial}{\partial x} (k(u) \frac{\partial u}{\partial x}) \right\}; \quad (4.5.5)$$

Для простоты, начально-краевые условия мы здесь опустим.

Если мы найдём решение задачи (4.5.4), то это будет приближённым решением задачи (4.5.3.).

То же самое можно сказать и о предыдущих уравнениях. Если мы найдём решение задачи (4.5.2.), то это будет приближённым решением задачи (4.5.1.). Формальное

вычисление дифференциала Фреше оператора  $P'(\overset{s}{u}) h$  в точке  $u = \overset{s}{u}$  связано с вычислением предела

$$P'(\overset{s}{u}) h = \lim_{\lambda \rightarrow 0} \{ \lambda^{-1} [P(u + \lambda h) - P(u)] \}, \quad (4.5.6.)$$

$$\lambda \rightarrow 0$$

где

$$h = \overset{s+1}{u}(x,t) - \overset{s}{u}(x,t); \quad u = \overset{s}{u}.$$

Используя при вычислении предела элементарные приёмы математического анализа и подставляя найденный дифференциал Фреше в уравнение (4.5.4.), будем иметь (отметим только, что частные производные функций не зависящих от переменной, по которой мы дифференцируем, будут равны нулю):

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left[ k \frac{\partial u}{\partial x} \right] - \left( \frac{\partial k}{\partial u} \frac{\partial u}{\partial x} \right) \frac{\partial u}{\partial x} + \quad (4.5.7.)$$

$$+ \frac{\partial^2 k^s}{\partial u^2} \left[ \frac{\partial u^s}{\partial x} \right]^2 (u^{s+1} - u^s)$$

Мы не будем останавливаться на сложнейших и ещё не достаточно исследованных вопросах (ещё не имеющих пока окончательного ответа), при каких условиях это будет так.

Это проблема нелинейного функционального анализа и нам хочется надеяться, что это время не за горами.

Рассмотрим более подробно **НКС** алгоритм для чуть более сложной задачи, чем задача (4.5.3), и более употребительного нелинейного одномерного нестационарного уравнения переноса вида

$$\eta(Q) \frac{\partial u}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial x} (\lambda(Q) \frac{\partial u}{\partial x}) + \frac{m\lambda(Q)}{x} \frac{\partial u}{\partial x} + \Psi(Q), \quad (4.5.6.)$$

где

$$Q = (\tau, x, u); \quad \lambda(Q) > 0.$$

Уравнением (4.5.6.) можно описать целый ряд процессов переноса в нелинейных и анизотропных средах в телах со сферической симметрией ( $m = 2$ ), цилиндрической симметрией ( $m = 1$ ) и плоской ( $m = 0$ ) симметрией.

Обратим Ваше внимание и на последнее слагаемое в уравнении (4.5.6.). Это слагаемое часто называют в математической литературе функцией источников или стоков.

Применяя к (4.5.3.) метод **НКС**, получим линейное уравнение параболического типа без дивергентной главной части: (а это уже значительно упрощает вопросы численной аппроксимации на вводимой разностной сетке).

$$\eta \frac{\partial^{s=1} u}{\partial \tau} - \lambda \frac{\partial^{s+1} u}{\partial x^2} + N \frac{\partial u^{s+1}}{\partial x} + M u^{s+1} = G, \quad (4.5.7.)$$

где  $N = -2 \frac{\partial \lambda}{\partial u} \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{m\lambda}{x} - \frac{\partial \lambda}{\partial x};$

$$G = \psi + \frac{\partial \lambda}{\partial u} \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + Mu;$$

$$\begin{aligned} M = & \frac{\partial \eta}{\partial u} \frac{\partial u}{\partial \tau} - \left[ \frac{\partial^2 \lambda}{\partial u^2} \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{v}{x} \frac{\partial \lambda}{\partial u} + \right. \\ & \left. + \frac{\partial^2 \lambda}{\partial u \partial x} \right] \frac{\partial u}{\partial x} - \\ & - \frac{\partial \lambda}{\partial u} \frac{\partial u^2}{\partial x^2} - \frac{\partial \psi}{\partial u}. \end{aligned}$$

Обратим внимание, что коэффициенты  $N, M, G$  и  $\lambda$  вычисляются с использованием значения функции  $u$  на  $s$ -ой итерации, т.е. с использованием значений  $u^s$ .

Если коэффициент  $\lambda$  зависит только от  $u$ , то есть  $\lambda = \lambda(u)$ , то более компактное, (а следовательно требующее меньшего количества вычислений) линеаризованное уравнение получается после предварительной замены переменных – подстановки Г.Р. Кирхгофа.

Положим

$$v = k^* \int_0^u \lambda(f) df, \quad k^* = 1 / \lambda(0). \quad (4.5.8.)$$

Подставляя (4.5.5.) в уравнение (4.5.3.), получим уравнение в недивергентной форме:

$$\frac{\partial v}{\partial \tau} = b(\tau, x, v) \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + g(\tau, x, v, p), \quad (4.5.9.)$$

Где

$$b = \lambda(u) / \eta; p = \partial v / \partial x; g = b [k^* \beta + mp / x];$$

$$\beta(\tau, x, v) = \psi(\tau, x, u).$$

Применяя к (4.5.9.) предложенный нами метод НКС, получим следующие соотношения

$$L(v^{s+1}) - W(v^s) = 0 \quad (4.5.10.)$$

где

$$L(v^{s+1}) = b \frac{\partial^2 v^{s+1}}{\partial x^2} + \frac{\partial g}{\partial p} \frac{\partial v^{s+1}}{\partial x} + T v^{s+1} - \frac{\partial v^{s+1}}{\partial \tau};$$

$$W(v^s) = -g + \frac{\partial q}{\partial p} p + T v^s;$$

$$T = \frac{\partial b}{\partial v} \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial g}{\partial v},$$

причём значения  $b$ ,  $p$ ,  $g$ ,  $q$ ,  $\partial b / \partial v$ ,  $\partial g / \partial v$ ,  $\partial q / \partial p$  вычисляются на  $s$ -той итерации.

Численное решение полученных линейных уравнений с соответствующими краевыми условиями проводятся с помощью дискретизации.

Используемый при этом метод сеток нашёл широкое распространение при решении задач тепло – массопереноса в областях с простыми границами.

Для применения метода сеток в расчётной области вводится сетка (в общем случае неравномерная) :

$$\Omega_{hl} = \Omega_h \times \Omega_l;$$

$$\Omega_h = \{x_i, x_0 < \dots < x_{N1} = x_k, \quad h_i = x_i - x_{i-1}\};$$

$$\Omega_l = \{t_j, t_0 < \dots < t_{N2} = t_k, \quad l_j = t_j - t_{j-1}\},$$

с шагами по пространственной координате  $x$  и по времени  $\tau$  так, чтобы граничные узлы сетки  $\Omega_{hl}$

(  $i=0$ ,  $i=N1$ ,  $j = 0$ ,  $j = N2$  ) совпали с границами расчётной области.

Вместо функции непрерывного аргумента рассматриваются сеточные функции, определённые в узлах рассматриваемой сетки  $\Omega_{hl}$ . Апроксимация производных может проводиться на различных шаблонах с помощью разнообразных формул.

Для численного решения задачи мы использовали простейшую аппроксимацию на равномерной сетке на четырёхточечном шаблоне с использованием «неявной» схемы, причём производные по времени аппроксимировались разностью «вперёд», а остальные производные – центральными разностями. Все расчёты производились на ЭВМ IBM 370 / 148, а позднее на персональных компьютерах типа PC-286 и PC-386.

Отметим, что алгоритм с заменой переменных (4.5.5.) можно использовать и в том случае, когда интеграл не выражается через элементарные функции [76]. В этом случае подынтегральная функция может быть аппроксимирована кусочно-линейной непрерывной функцией. Счётные формулы для этого случая подробно даны в работе [76].

Отметим только, что при интегрировании кусочно-линейной функции появляются параболы и выбор «улыбающейся» параболы или «плачущей» даётся формулой в работе [76].

## 4.6. Сорбция окислов азота на мелкопористом гранулированном селикагеле.

Ещё более значительный рост нелинейности в коэффициентах переноса, чем в задачах с меняющимся фазовым состоянием веществ, встречается в некоторых задачах нестационарного массопереноса. Такие задачи возникают при математическом моделировании адсорбционных процессов, протекающих на единичных зёрнах или в слое сорбента, где коэффициент эффективной диффузии в порах может меняться более чем на порядок.

Хотя этот факт достаточно известен, и данные по изменению эффективных коэффициентов диффузии имеются в литературе, но до сих пор модели с нелинейными эффективными коэффициентами диффузии не нашли применения в процессах адсорбции и заменяются более грубыми, упрощёнными математическими моделями.

В связи с форсированным решением проблемы борьбы с загрязнением атмосферы ставится задача тонкой очистки нитрозных (и других газов) в неподвижном и / или псевдонеподвижном слое сорбента.

Необходимым элементом расчёта такого процесса является изучение динамики сорбции единичным зёрном.

Имеющиеся в литературе данные по статике и динамике сорбции нитрозных газов [70-74], позволяют построить соответствующую математическую модель.

Применительно к модели адсорбции двуокиси азота единичным зерном силикагеля такая модель была предложена Русланом Зураховичем. Хитерером (ГИАП).в 1975 году и была решена в 1976 г. Вайнбергом А.М.

Пористая структура мелкопористого силикагеля достаточно однородна и хорошо изучена [73]. Используя

понятие эквивалентного коэффициента диффузии  $D_e$  квазигомогенного зерна, распределение концентраций по радиусу частицы со временем при сорбции на сферическом зерне запишем так:

$$\frac{\partial(a+c)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial r} [D_3 \frac{\partial c}{\partial r}] + \frac{2}{r} D_3 \frac{\partial c}{\partial r}, \quad (4.6.1)$$

где  $a = a(c, \sum)$  – концентрация  $\text{NO}_2$  в сорбенте,  $c$  – концентрация  $\text{NO}_2$  в газовой фазе,  $r$  – текущий радиус,  $D_3 = D_3(c, \sum)$  – эквивалентный коэффициент диффузии,  $\sum$  – плотность распределения объёмов пор по размерам.

Эффективный коэффициент диффузии в кнудсеновской области для модели квазигомогенного зерна имеет вид  $D^\otimes = D_k \varepsilon / k^2$ , где  $\varepsilon$  – порозность глобул внутри частицы,

$$D_k = \frac{4}{3} \nu \sqrt{(2R_4 T) / (\pi M(c, T))}, \quad (4.6.2)$$

$k$  – коэффициент извилистости. При протекании процесса первоначальный радиус капилляра изменяется за счёт сорбции частиц  $\text{N}_2\text{O}_4$  на поверхности капилляра.

Текущий радиус капилляра может быть представлен зависимостью

$$\nu = (\nu - \frac{3a(c)}{0.38}) 10^{-10} \text{ м}. \quad (4.6.3)$$

Учитывая текущую порозность глобул в зерне с капиллярами и принимая во внимание то, что максимум на кривой распределения пор по размерам приходится на поры радиусом

$\nu \cong 11 * 10^{-10}$  м, причём около 20% пор приходится на переходные поры размером от  $(20 \text{ до } 60) * 10^{-10}$  м, а минимальный размер пор

$$\nu \cong 8 * 10^{-10} \text{ м},$$

в первом приближении получаем следующую зависимость для эквивалентного коэффициента диффузии:

$$D_{\vartheta} = 0,8 D_I^{\otimes} + 0,2 D_H^{\otimes},$$

где

$D_I^{\otimes}$  - соответствует порам размером  $11 * 10^{-10}$  м, а  $D_H^{\otimes}$  - соответствует порам размером  $40 * 10^{-10}$  м.

В качестве граничных условий ( предполагая отсутствие внешнедиффузионного торможения) берутся следующие:

$$c(R_n, t) = c_0; \quad [\frac{\partial c}{\partial r}]_{r=0} = 0, \quad (4.6.4.)$$

а в качестве начального условия возьмём для зерна, свободного в начальный момент времени от окислов азота:

$$c(r, 0) = 0. \quad (4.6.5.)$$

Проведенный на компьютере численный анализ приведенной математической модели, представленной уравнениями ( 4.6.1.) - ( 4.6.5.), показал высокую параметрическую чувствительность к изменению  $D_{\vartheta}$  и лишь учёт реального распределения пор по размерам позволил получить надёжное совпадение расчётных и опытных данных [72]..

Отметим также, что в расчётах использовалась изотерма ленгмюровского типа.

## 4.7. Решение уравнения Бюргерса.

Рассмотрим движение кинематической волны для простейшего уравнения Навье – Стокса – уравнения Бюргерса. Это одно из простейших уравнений, отражающих эффекты нелинейной конвекции и диффузии.

Оно встречается в многочисленных приложениях, а также используется для тестирования численных алгоритмов<sup>3</sup>. Последнее объясняется тем, что задача Коши для уравнения Бюргерса с ограниченным начальным условием имеет аналитическое решение.

Этот результат независимо друг от друга получили Коул и Хопф<sup>4</sup>.

Итак рассмотрим решение задачи Коши для уравнения Бюргерса

$$\frac{\partial u}{\partial \tau} + \Gamma \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{1}{Re} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}. \quad (4.7.1.)$$

Это одно из немногих содержательных нелинейных уравнений переноса, для которого известно точное решение задачи Коши. Нелинейной заменой переменных [78-79]

$$u = - \frac{2}{Re} \frac{1}{y} \frac{\partial y}{\partial x}. \quad (4.7.2.)$$

---

<sup>3</sup> Андерсон Д., Танненхил Дж., Плетчер Р. Вычислительная гидромеханика и теплообмен. В 2-х т. Т.1 – М. Мир, 1990. 384 с.

Плетчер К. Численные методы на основе метода Галёркина. М. Мир, 1988. 352 с.

<sup>4</sup> Cole J.D. On a quasilinear parabolic equation occurring in aerodynamics. Q.Appl.Math. 1951. V.9p.225.

Hopf E. The partial differential equation  $u_t + uu_x = \mu u_{xx}$ . Comm.PureAppl.Math 1950/ V 3,p201

Уравнение (4.7.1.) приводится к линейному уравнению теплопроводности

$$\frac{\partial y}{\partial \tau} = \frac{1}{\text{Re}} \frac{\partial^2 y}{\partial x^2}. \quad (4.7.3.)$$

Решение этого линейного уравнения хорошо известно. Поэтому для начального условия  $u(0,x) = \varphi(x)$  решение (4.7.1.) будет иметь вид:

$$u_e(\tau, x) = \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{x - \xi}{\tau} \exp\left(-\frac{G \text{Re}}{2}\right) d\xi \right] / \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{G \text{Re}}{2}\right) d\xi \right], \quad (4.7.4.)$$

где

$$G(\xi, x, \tau) = \int_0^\gamma \varphi(\xi) d\xi + \frac{(x - \gamma)^2}{2\tau}. \quad (4.7.5.)$$

верхний предел в последнем соотношении  $y = \xi$ .

Также относится и ко второму слагаемому.

В качестве тестовой рассмотрим задачу с разрывными начальными условиями

$$u(0, x) = \begin{cases} 0 & \text{при } x > 0; \\ 1 & \text{при } x \leq 0; \end{cases} \quad (4.7.6.)$$

которая соответствует физической задаче распространения ударной волны с учётом диссипативного вязкого процесса. Точное решение задач (4.7.1.), (4.7.6.) в соответствии с (4.7.4.) имеет вид [80]

$$u_e = 1 / (1 + h \exp\{ \text{Re}(x - t/2) / 2 \}) \quad (4.7.7.)$$

где

$$h = \operatorname{erfc}(-x/q) / (\operatorname{erfc}((x-t)/q)),$$

$$q = \sqrt{4t/\text{Re}}, \quad (4.7.8.)$$

$$\text{erfc}(z) = \int_z^{+\infty} \exp(-\xi^2) d\xi.$$

Приложение – Глава 5 – демонстрирует сравнение результата численного расчёта с аналитическим решением задачи Бюргерса.

Из первого рисунка по задаче Бюргерса видно, что численное решение правильно отслеживает движение фронта ударной волны. Для сравнительно малых значений  $\text{Re}$  максимальная погрешность невелика, также как и для  $\text{Re} = 100$  вне фронта волны.

При  $\text{Re} = 100$  на коротком участке за фронтом волны возникают осцилляции (второй рисунок по задаче Бюргерса), увеличивающиеся со временем.

Это характерное явление при использовании аппроксимации второго порядка для конвективных членов.

Аналогичный эффект возникает и при других подходах, например, при использовании метода Галёркина (см. ссылку на книгу Флетчера).

Простое уменьшение порядка аппроксимации конвективного члена к успеху не приводит из-за слишком большого увеличения схемной вязкости.

Проводились исследования с использованием разностей против потока на предыдущем слое итераций. Как и следовало ожидать, фронт сильно размазан и погрешность велика.

Поэтому для подавления осцилляций, возникающих при больших числах Рейнольдса, надо использовать другие средства. К ним относятся, например, измельчение сетки в районе ударной волны или использование в методе Ньютона-Канторовича разностных схем с переменным порядком аппроксимации конвективных членов, как советуют Рихтмайер и Мортон [87].

## 4.8. Постановка обратных задач для нестационарных процессов теплообмена. (Расчёт кипящего слоя)

По целому ряду причин в последние десятилетия прошлого века в научной литературе проявился интерес к решению обратных задач. Например, в монографии Власова и Шаталова [81], предложены были не только методы, но и технические устройства сбора данных для восстановления коэффициентов тепломассопереноса. Предложенные в монографии методы позволяют определить неизменные параметры (теплофизические константы) без нарушения целостности самого исследуемого объекта.

Рассмотрим постановку одной из подобных задач применительно к вопросам охлаждения закристаллизовавшихся Гранул в двойном кипящем слое. Рассмотрим уравнение параболического типа

$$a_i(r,t,u_i) \frac{\partial u_i}{\partial t} - \frac{\partial^2 u_i}{\partial r^2} + b_i(r,t,u_i) \frac{\partial u_i}{\partial r} + c_i(r,t)^* * (u_i - u_0)^\alpha, \quad (4.8.1.)$$

при

$$(r,t) \subseteq D_i = \{x_{i-1}(t) \leq r \leq x_i(t); 0 < t < T\}; i=1,2;$$

$$\alpha = 2,3;$$

$$\lambda^2(x(t),t) \frac{dx_i}{dt} = \frac{\partial u_{i+1}}{\partial r}(x_i(t),t) - \frac{\partial u_i}{\partial r}(x_i(t),t)$$

и пусть, наконец,  $x_i(t)$  – граница раздела фаз, причём

$$a_i \geq \beta > 0, c_i > -\gamma^2, c_i(r,0) \equiv 0;$$

предположим также, что  $b_i$  и  $c_i$  – ограничены в промежутке  $r \in [0, M]$ .

Известно [81], что данная задача имеет единственное классическое решение  $u(r,t)$ , причём  $u \neq 0$  при  $t = 0$ .

Будем рассматривать  $u$  как функцию от  $(r,t)$  и отображение  $c_i(r,t)$

$$u = u(r,t | c_i) \equiv U(c_i).$$

Так как при

$$c_i = 0 \text{ и } c_1 = c_2 \text{ следует, что } U(0) \neq 0 \quad (4.82.),$$

то отображение (оператор)  $U$  не является линейным. Для обратимости  $U$  необходимо и достаточно, чтобы равенство  $U=0$  выполнялось только тогда, когда  $c_i=0$ .

Поэтому из (4.8.1.) вытекает, что оператор  $U$  не имеет обратного.

В связи с изложенным, постановка обратной задачи может быть сформулирована следующим образом.

Найти условия, при которых  $U$  имеет псевдообратный оператор  $U^{-1}$  и исследовать операторы

$$u = U(c); \quad c = U^{-1}(u).$$

Отметим, что такое исследование представляется, по крайней мере, весьма сложным.

Поэтому на практике решение обратной задачи получают путём решения прямой задачи с некоторой меняющейся характеристикой, которую при каждом новом расчёте монотонно меняют, пока в результате не достигнут совпадения расчётных и известных (экспериментальных или теоретических) величин.

Этот способ легко применим, когда искомая характеристика (коэффициент диффузии, теплоёмкости и др.) постоянна.

Если же она является (кинетической или динамической) или зависит от геометрии объекта, то такой подход малоэффективен.

В работе [81], например, методом сравнения экспериментальных и расчётных данных, использующих

одномерную нестационарную математическую модель кипящего слоя, был определён коэффициент эффективной температуропроводности кипящего слоя  $E_t$ . Для расчёта использовалась программа [82] решения уравнения :

$$\frac{\partial T}{\partial t} = E_t \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} - b T, \quad (4.8.3.)$$

с начальным распределением безразмерной температуры

$$T(z, 0) = k \exp(pz^2) \left[ \int_0^H \exp(pz^2) dz \right]^{-1}. \quad (4.8.4.)$$

Для решения задачи использовался метод неравномерных сеток по обеим координатам.

## 4.9. Программирование алгоритмов и практическое использование языков программирования.

Вопрос использования языков программирования напрямую связан с эксплуатируемой ЭЦВМ. Если на вашей ЭЦВМ установлены трансляторы с языка ФОРТРАН, то вы можете воспользоваться всем сервисом, вложенным математиками в этот язык.

Если у Вас под рукой находится РС, то Вы можете воспользоваться одним из широкодоступных языков C++, Visual C++, C#, Delphi -7, Delphi-2007 или Visual Basic.

Мы не будем обсуждать преимущества и недостатки этих языков в разных отраслях программирования, а отошлём читателя к одному молодому и талантливому автору Михаилу Фленову, который достаточно подробно освещает этот вопрос в своей современной монографии [96] с.25.

Из его обзора и нашего опыта мы вполне обоснованно можем порекомендовать читателю систему Delphi-7 или Delphi-2007.

Мы не хотим останавливаться на самых новых языках типа RUBU, так как информации по этому языку и его использованию ещё не достаточно.

Есть также много любителей системы Eclipse-фреймворк.

Принципиально использование любого языка вполне возможно, если результаты расчёта арифметических операторов дают правильные результаты. Важно только ваше знание используемого языка программирования.. Кроме того, вы можете воспользоваться выводом расчётных графиков на печать и сопоставить эти графики с графиками точных решений, если последние имеются в наличии.

Вывод графиков, по мнению автора, достаточно удобно делать в программе EXCEL.

Есть ли какое – либо преимущество у визуальных языков программирования перед языками не визуальными?

Мы думаем, что кроме использования особых методов отладки программы больше никаких преимуществ у визуальных языков нет.

Но это не совсем точно. Великолепный язык Pascal, разработанный фирмой Borland в прошлом столетии для DOS имел ряд математических ошибок в своих юнитах, о которых

сама фирма умалчивала. Язык, используемый сейчас фирмой Borland в различных версиях Delphi - «Object Pascal» стал значительно мощнее и, претерпев множество изменений и улучшений, стал значительно надёжней, а поэтому вероятность появления простой математической ошибки в «Unit» («юнитах») значительно ниже.

## 4.10. Применение языков «C» , «Pascal » , «Фортран» и «Basic» для моделирования процессов переноса.

### 4.10.1. Применение визуальных языков программирования : Delphi, Visual Basic и Visual C++.

Выше мы (в предыдущем разделе) уже сказали несколько слов о выборе языка программирования и не будем сейчас повторяться.

Если Вы используете готовый пакет программ, то надо исходить из опыта работы с подобным продуктом.

Ещё раз напомним, сказанное раньше. Из всех языков программирования фирма Microsoft выделила особо язык C# (си шарп), в который она вложила массу средств.

Результат не заставил себя ждать. Новое детище гигантской программистской фирмы Microsoft оказалось на удивление хорошей.

По-видимому, за подобными языками с приставкой «шарп» будущее.

#### 4.10.2. Обзор программных средств и разработка программных пакетов.

В пятой главе нашей монографии приведены куски программ, которые функционировали как программный пакет решения нелинейных уравнений теплопроводности (диффузии) сокращённо «**КНУТ**». Единственное место, которое требовало доводки – нужно было вычислять вручную дифференциал Фреше. Эта задача вполне под силу даже студенту 2-го курса.

Программируя краевую задачу для уравнения Бюргерса (одну из задач для уравнения типа Навье - Стокса), мой дипломник, студент 5-го курса В.К. Конторович внёс необходимые изменения в программный пакет “**Кнут**” [13 , 59] .

Конечно, ещё лучше было бы вставить в пакет программ процедуру «ПАРСИНГА», которая сама находит дифференциал Фреше (используя методы обратной польской записи). Но этого по причине отсутствия времени тогда так и не было сделано.

Мы уже в начале главы говорили, что знаменитая американская программа «Matcad» не имеет возможность использовать мощный метод Ньютона – Канторовича.

Вполне возможно, что какие-то организации имеют программные пакеты для решения нелинейных краевых задач методом Ньютона-Канторовича, но в свободном обращении эта пакеты отсутствует, либо я ещё не знаю о них.

#### 4.11. Тактика создания тестов для проверки алгоритмов решения нелинейных задач и анализа результатов. Коррекция постановки задач.

В 1973 году А.М.Вайнберг на конференции по МММ в Академгородке г. Новосибирска предложил использовать метод **НКС** для решения нелинейных нестационарных одномерных уравнений переноса [83]. Я, откровенно говоря, не был тогда на 100 % убеждён, что результаты будут непременно хорошие.

Но в 1975 году на подобной же конференции я уже привёл полученные результаты тестирования своего метода, показывающие прекрасные результаты его применения [84].

Можно ли было останавливаться на одном примере? Конечно, один пример ещё не делает погоду. Потребовалось ещё многократно перепроверить этот метод на различных типах нелинейных параболических уравнений. Большая часть четвёртой главы посвящена подобным задачам.

Но автор до сих пор убеждён, что надо ещё и ещё раз проверять применение этого метода на всё большем круге задач, пока специалисты по нелинейному анализу не предоставят надежные достаточные (а ещё лучшие необходимые) условия сходимости метода **НКС**.

Однако надо ли нам ждать от чистых математиков этих теорем?

Это вовсе не риторический вопрос. Известно, что именно запросы практики являются одной из главных составляющих сил движения и прогресса науки.

Но беда в том, что слишком мало существует аналитических решений практически интересных нелинейных нестационарных начально - краевых задач.

**Неожиданно автор нашёл простой путь - оказалось, что есть прекрасная и достаточно лёгкая возможность искусственно создавать безграничное количество подобных примеров для нелинейных начально-краевых задач.**

Объясним как создавать тестовые примеры. Берём достаточно подходящую функцию нескольких переменных

(зависящую от времени, координат и самой искомой функции). Подставляем её в соответствующее нелинейное уравнение. Всю образовавшуюся разницу между левой и правой частью уравнения перебрасываем в функцию источников или стоков.

Начально - краевые условия подгоняем подобным же образом.

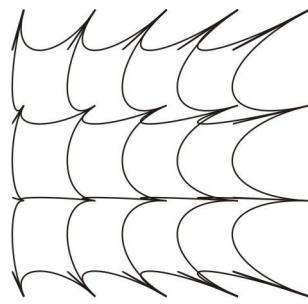
Конечно, это ещё не практически необходимые задачи, но определённый крупный шаг в нужном направлении. Кстати, гладкость тестовой функции не является обязательной.

При решении задачи Бюргерса в качестве начального условия бралась разрывная функция, а результаты получились великолепными.

На таких искусственно созданных тестовых примерах можно исследовать любой разработанный пакет программ для решения нелинейных краевых задач, решаемых методом Ньютона – Канторовича.

Выше мы указали, что для тестирования метода **НКС** мы берём примеры с достаточно гладкими функциями. Можно ли избавиться от этого требования?

Да, можно ослабить требования на начально-краевое условие. Это нами утверждается в публикации [59].



## Глава 5





## **Часть 5. Приложения . . . . .**

### **ПРИЛОЖЕНИЕ А. Назначение пакета - программ «КНУТ».**

Программный комплекс решения нелинейных задач теплопроводности и диффузии.

Программный комплекс «**КНУТ**» (аббревиатура названия «Квазилинеаризация нелинейных уравнений теплопроводности »).

Область применения:

Решение широкого класса нелинейных начально - краевых задач для уравнений параболического типа тепло - и массопереноса в процессах химической технологии, теплотехники, гидродинамики, металлургии, физики высоких и низких температур, физики полимеров, магнитных исследований и др.

При этом предполагается нестационарная одномерная или двумерная постановка краевой задачи.

При наличии многомерности возможно применение дробных шагов - хорошо освещённый в литературе метод.

В программном комплексе «**КНУТ**» использован метод глобальной линеаризации задачи с использованием дифференциала Фреше совместно с методом сеток и методом прогонки для решения трёхдиагонального матричного уравнения.

Пакет программ «**KNUT**» предназначен для решения нелинейных одномерных нестационарных уравнений типа теплопроводности (диффузии с реакционным членом) методом **НКС**, либо двумерных стационарных нелинейных задач методом **НКС**.

Предварительно нелинейная задача линеаризуется с помощью вычисления дифференциала Фреше, а затем линеаризованная задача решается с использованием сеточного метода и метода «прогонки».

Решаются задачи методом итераций, что позволяет получать более точные результаты решения. При этом каждая итерация удваивает количество правильных знаков.

Использование такого ньютонаподобного метода позволяет надеяться на квадратичную сходимость приближённого решения к точному. При этом каждая

дополнительная итерация приводит на каждой итерации к двукратному увеличению количества правильных значащих цифр в приближённом численном решении.

Использование неявной разностной схемы даёт возможность проводить расчёты с бо́льшим шагом по временной координате.

В качестве начального приближения используется заданное заранее начальное условие. Краевые условия также предполагаются известными.

Если краевые условия также являются нелинейными, то они также линеаризуются с помощью того же аппарата, что и само уравнение.

Напомним, что нестационарная задача рассматривается в одномерной постановке.

Если желательно рассмотреть задачу в двумерной постановке, то задача в этом случае предполагается стационарной.

Сам подход никак не ограничивает размерность задачи и если необходимо решать 3-х мерные

нелинейные краевые задачи, то можно перейти к методу дробных шагов.

Как мы уже говорили, есть несколько автономных пакетов программы «**КНУТ**», написанных на разных языках.

Исходная информация:

Вид конкретных коэффициентов уравнения и краевых условий, параметры расчёта, число и размер шагов по пространственной и временной координате, максимальное количество итераций и др.

Рекламная заставка:

```
<=====>
<= ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС РЕШЕНИЯ      =>
<= НЕСТАЦИОНАРНЫХ НЕЛИНЕЙНЫХ      =>
<= ОДНОМЕРНЫХ УРАВНЕНИЙ ПЕРЕНОСА      =>
<=====→
<=          (ОДНОМЕРНЫЙ СЛУЧАЙ)      =>
<=====→
```

{\*\* ВИД УРАВНЕНИЯ \*\*}

$$C^*[\partial U/\partial T + W^*(\partial U/\partial X)] = (\partial/\partial X)^*[KA(U)^*(\partial U/\partial X)] + \\ + (MK^*KA(U)/X)^*(\partial U/\partial X) + F(U, X, T);$$

<\*\* ВИД КОЭФФИЦИЕНТОВ ТЕСТОВОЙ ЗАДАЧИ \*\*>

$$C(X, T, U) = 1/(2 * \text{SQRT}(1+U^*U));$$

$$KA(X, T, U) = U/(2 * \text{SQRT}(1+U^*U));$$

$$F(X, T, U) = 1 - 2 * \text{COSH}(2 * (T+X)) - MK^*U/X;$$

$$W(X, T, U) = 0;$$

EXACT SOLUTION (точное решение)

$$U = \text{SINH}(2 * (T+X)); \\ (\text{синус гиперболический})$$

В ТЕСТОВОМ ПРИМЕРЕ ИСПОЛЬЗУЮТСЯ ГИПЕРБОЛИЧЕСКИЕ ТРИГОНОМЕТРИЧЕСКИЕ ФУНКЦИИ.

Искомая функция  $U = U(X, t)$ .  
 $X$  – пространственная координата;  
 $t$  – временная координата.

По определению, гиперболические функции синуса и косинуса имеют следующий вид:

$$\text{SINH} = (e^{\frac{x}{2}} - e^{-\frac{x}{2}}) / 2;$$

$$\text{COSH} = (e^{\frac{x}{2}} + e^{-\frac{x}{2}}) / 2;$$

Назначение исходных данных  
( приведенная распечатка программы соответствует АЦПУ  
ЭВМ IBM -370 / 148  
и была впервые выполнена в 1973 г. Программа была  
создана на языке PL /1 )

Попытка переноса распечатки с АЦПУ в книжный вариант  
Привела к некоторой потере визуальной совместимости,  
за что автор приносит свои извинения.

```
{=====
{*      ОПИСАНИЕ ИСХОДНЫХ ДАННЫХ ДЛЯ      *}
{*
{*      РАСЧЕТА И ИХ ТИПЫ      *}
{*
{* LITER 1 – КОМЕНТАРИИ И ОБОЗНАЧЕНИЯ      *}
{*   Литерная строка длиной до 80 символов (CHAR 80)      *}
{*<=====*>      *}
{* MK 2 – ФАКТОР ФОРМЫ -СИММЕТРИЯ ОБЪЕКТА      *}
{* N 3 – ЧИСЛО ШАГОВ ПО ПРОСТРАНСТВЕННОЙ      *}
{*           КООРДИНАТЕ      *}
{* NT 4 - ЧИСЛО ШАГОВ ПО ВРЕМЕН. КООРДИНАТЕ.      *}
{*           JJ/NT)      *}
{* NX 5 - ЧАСТОТА ПЕЧАТИ ПО *}      *}
{*проСТРАНСТВ.КООРД.(N/NX)      *}
{* NMAX 6 - МАКСИМАЛЬНОЕ ЧИСЛО ИТЕРАЦИЙ      *}
{* IK 7 - ПАРАМЕТР УПРАВЛЕНИЯ / ПЕЧАТЬЮ : INTEGER *}      *
{* IK=0 - ПОДАВЛЕНИЕ ПЕЧАТИ ИСХОДНЫХ ДАННЫХ      *}
{*           IK=> 0 - ПЕЧАТЬ РАСЧЁТНОГО      *}
{*           (ПРИБЛИЖЁННОГО РЕШЕНИЯ)      *}
{*           IK=1 - ВСПОМОГАТЕЛЬНАЯ ПЕЧАТЬ      *}
{*           IK=2 - ПЕЧАТЬ АБСОЛЮТНОЙ ПОГРЕШНОСТИ      *}
{*           IK=3 - ПЕЧАТЬ ОТНОСИТЕЛЬНОЙ ПОГРЕШНОСТИ      *}
{*           IK=4 - ПЕЧАТЬ АБСОЛЮТНОЙ и ОТНОСИТЕЛЬНОЙ      *}
{*           ПОГРЕШНОСТЕЙ      *}
{*           IK=5 - ПЕЧАТЬ ТОЧНОГО РЕШЕНИЯ,ПРИБЛИЖЁННОГО *}      *
{*           АБСОЛЮТНОЙ и ОТНОСИТЕЛЬНОЙ ПОГРЕШНОСТИ *}      *
{* KK 8 - КОЛИЧЕСТВО ЗНАЧАЩИХ ЦИФР ПРИ ПЕЧАТИ      *}
{*           РЕЗУЛЬТАТА      *}
```

```

{* LL  9 - КОЛИЧЕСТВО ЗНАЧАЩИХ ЦИФР ПОСЛЕ *}
{*ЗАПЯТОЙ      *}
{*<=====*> *}
{* L 10 – ШАГ СЕТКИ ПО ВРЕМЕННОЙ КООРДИНАТЕ (t)
*}
{* EPS   11 – ТОЧНОСТЬ ИТЕРИРОВАНИЯ
*}
{* XN    12 – ЛЕВАЯ ГРАНИЦА ИНТЕРВАЛА ПО
ПРОСТРАНСТ.  *}
{* XK    13 – ПРАВАЯ ГРАНИЦА ИНТЕРВАЛА ПО
ПРОСТРАНСТ.  *}
{* TN    14 – НАЧАЛЬНЫЙ МОМЕНТ ВРЕМЕНИ
*}
{* TK    15 – КОНЕЧНЫЙ МОМЕНТ ВРЕМЕНИ : REAL;
*}
{*<=====*>*}
{* T1    16 – ВИД КРАЕВОГО УСЛОВИЯ НА ЛЕВОЙ ГРАНИЦЕ
(CHAR(6) *)
{* T2    17 – ВИД КРАЕВОГО УСЛОВИЯ НА ПРАВОЙ
ГРАНИЦЕ (CHAR(6)*}
{*<=====*>*
}

```

Значения исходных данных для тестового примера к комплексу

*<< KNUT >>*

- 1-й вариант расчёта - литерная константа - комментарий;
- (\*<< =====>>\*)
- 2 – мк – форм фактор – в тестовом примере соответствует шару;
- 50 – число интервалов по пространственной координате;
- 1 – NT – частота печати по временной координате;
- 5 – NX – частота печати по пространственной координате;
- 2 – NMAX – максимальное количество итераций;
- 5 – IK – условие печати;
- 0.001 – шаг по временной координате;
- 0.0000002 – точность итерирования (число эпсилон);
- 0 – XN – начало пространственного интервала;
- 1 – XK – конец пространственного интервала;

0.6 – TN – начало временного интервала;  
0.604 – TK – конец временного интервала;  
FIRST – ON THE LEFT SIDE – краевое условие с левой стороны;  
FIRST – ON THE RIGHT SIDE – краевое условие с правой стороны;

---

### ТЕСТ 1. ИСПЫТАНИЕ КОМПЛЕКСА << KNUT >>

Вариант расчёта 1-й

ДАТА: 12.03.1974 ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС  
\*\* < KHUT > \*\*

```
+-----+
      РАСЧЁТ 1-го ВАРИАНТА
      ПАРАМЕТРЫ РАСЧЁТА
+-----+
! ФОРМ- ! ЧИСЛО !ШАГ РАЗН. !ТОЧНОСТЬ !ЧАСТОТА
! ЧАСТОТА !
!
НАЧАЛО!КОНЕЦ!
!    ФАКТОР! ШАГОВ!      СЕТКИ !    ИТЕРИ-      !
ЕЧАТИ!ПЕЧАТИ!ИНТЕРВ!ИНТЕРВ!
! ГЕОМЕТР! ПО X !    ПО T    ! РОВАНИЯ! ПО T=JJ/NT
!ПО X=N/NX

!По X ! По X !
+-----+
      +
! MK   ! N   !     L   ! EPS   ! NT ! NX
! XN   ! XK  !
! 2    ! 50  !
! 0.00 ! 1.00 !
+-----+
      +
! МАКСИМАЛЬНОЕ ! УСЛОВИЕ ! НЕОБХОДИМОСТЬ
!НАЧАЛО ! КОНЕЦ !
! ЧИСЛО ИТЕРАЦИЙ! ПЕЧАТИ      ! ОБРАЩ. К ВСР
!ИНТЕРВ.!ИИНТЕРВАЛА !
!           !           !
T ! по     T !           ! по
```

BOUNDARY CONDITIONS  
ON THE LEFT SIDE      ON THE RIGHT SIDE  
FIRST KIND              FIRST KIND  
УСЛОВИЕ ПО ПРОСТРАНСТВУ -->

## НАЧАЛО РАСЧЁТА->

1.50946	1.90430	2.37557	2.94217	3.62686
4.45711	5.46623	6.69473	8.19192	10.01787
-0.00000				

СРЕДНЯЯ ПО ОБЪЁМУ ТЕМПЕРАТУРА / КОНЦЕНТРАЦИЯ  
ШАРА= 7.91814

+-----+  
!- ВРЕМЯ ! СОПОСТАВЛЕНИЕ РАСЧЁТНОГО И ТОЧНОГО  
РЕШЕНИЯ!

+-----+  
АБСЦИССЫ ТОЧЕК ПЕЧАТИ ПО ОСИ Х (ПО  
ПРОСТРАНСТВУ)

0.00000	0.10000	0.20000	0.30000	0.40000
0.50000	0.60000	0.70000	0.80000	0.90000
1.00000				

начальное условие -->

1.583115 1.991884 2.480595 3.068860 3.780290  
 4.643436 5.692940 6.970921 8.528670 10.428704  
 12.245884  
 T=0.601 APPROACH (ПРИБЛИЖ. РЕШЕНИЕ)-->  
 1.51309 1.91048 2.38117 2.95015 3.63518  
 4.46788 5.47830 6.70967 8.20921 10.03881  
 12.27048  
 СРЕДНЯЯ ПО ОБЪЁМУ ТЕМПЕРАТУРА/КОНЦЕНТРАЦИЯ  
 ШАРА= 7.93509  
 EXACT ---->  
 1.51309 1.90861 2.38073 2.94840 3.63439  
 4.46625 5.47735 6.70828 8.20844 10.03803  
 12.27048  
 T=0.602 APPROACH (ПРИБЛИЖ. РЕШЕНИЕ)-->  
 1.51672 1.91483 2.38635 2.95641 3.64274  
 4.47707 5.48946 6.72327 8.22578 10.05902  
 12.29513  
 СРЕДНЯЯ ПО ОБЪЁМУ ТЕМПЕРАТУРА/КОНЦЕНТРАЦИЯ  
 ШАРА= 7.95114  
 EXACT ---->  
 1.51672 1.91292 2.38590 2.95463 3.64194  
 4.47541 5.48850 6.72186 8.22499 10.05823  
 12.29513  
 T=0.603 APPROACH (ПРИБЛИЖ. РЕШЕНИЕ)-->  
 1.52035 1.91916 2.39153 2.96266 3.65030  
 4.48626 5.50063 6.73688 8.24237 10.07926  
 12.31982  
 СРЕДНЯЯ ПО ОБЪЁМУ ТЕМПЕРАТУРА/КОНЦЕНТРАЦИЯ  
 ШАРА= 7.96720  
 EXACT ---->  
 1.52035 1.91724 2.39108 2.96087 3.64950  
 4.48459 5.49967 6.73547 8.24158 10.07846  
 12.31982  
 КОНЕЦ РАСЧЁТА 1-го ВАРИАНТА  
 ======  
 \* \*  
 ДАТА: 1974; КОНЕЦ РАСЧЁТА ПО КОМПЛЕКСУ < KHUT >  
 \*\* <12.03.1974> \*\* TIME: /0..6  
 \* \*

## **ПРИЛОЖЕНИЕ Б1.**

Фрагмент программы «KNUT» на языке «С»

```

/*ka = u/(2*qyy); /* ka= ka (u,x,t)      */
*kax = 0;
*kau = 1/(2*qyy*yy);
*kaxu= 0;
*kauu= -3*u/(2*qyy*yy*yy);
*ff = 1- 2*cosh(2*(t+x))- mk*u/x;
*ffu = -mk/x;

/**===== end funk; =====*/

```

```

/* DEF.H */          /* HEDER FILE*/
/*****=====
/*      ОБЪЯВЛЕНИЕ ВНЕШНИХ ПРОЦЕДУР      */
/*****=====*****/


#include <string.h>
#include <stdio.h>
#include <stdlib.h>
#include <alloc.h>
#include <math.h>

/** FILE *in; УКАЗАТЕЛЬ ФАЙЛА ИСХОДНЫХ ДАННЫХ
FFF.V **/
extern FILE *out;
        /** УКАЗАТЕЛЬ ФАЙЛА РЕЗУЛЬТАТОВ
РАСЧЁТА ННН.В **/


void FUNK ( double, double, double, double, double,
double *,double,
int,    double *, double *, double *, double *, double *,
double *, double *, double *, double *, double *, double *);
void COEF ( double, double, double, double, double,
double *,
double *, double *, double *, double *, int[], int, char *,
char *);
int CHECKM ( int, int, int, double *, double, double, char *,
char *);
void COMPAR ( int, int, double *, double * );
void DAT  ( void );

```

```
void TIME ( void );
void EXACT ( double, double, double, int, int, int, double *,
double * );
void INITCO ( int,    int,    int, double, double,
                           double *, double *,
double * );
void SCREEN ( );
void PRIN2 ( int,    int,    int, int, int, int,
                           double, double, double,
double, double, char *, char * );

void PRIN3 ( double,  int,  double * );
void SHAPK ( int);
void POINT ( int, int, double, double *, double * );
void PECH ( int, int, int,  double * );
void HH   ( int, int ,double, double, double * );
void BOUND ( double, double, double[],);
```

## **ПРИЛОЖЕНИЕ Б2.**

Фрагмент программы KNUT на языке «PASCAL»

```
UNIT FUNKU;
INTERFACE
USES OPU;
{ * КОЭФФИЦИЕНТЫ УРАВНЕНИЯ И ИХ
ПРОИЗВОДНЫЕ *}
PROCEDURE FUNK
( X,T,U,XN,XK: real;
H: UKMODN;
L: real;
MK: integer;
VAR CC,CCU,WW,WWU,KA,KAX,KAU,KAXU,
KAUU,FF,FFU: real);
IMPLEMENTATION
PROCEDURE FUNK
( X,T,U,XN,XK: real;
H: UKMODN;
L: real;
MK: integer;
VAR CC,CCU,WW,WWU,KA,KAX,KAU,KAXU,
KAUU,FF,FFU:real);

{ МК      ФАКТОР ФОРМЫ ( 0, 1, 2 )      }
{ X,T,U,   У- ИСКОМАЯ ФУНКЦИЯ      }
{ XN,XK,   НАЧАЛО И КОНЕЦ ИНТЕРВАЛА  }
{ L   ШАГ СЕТКИ ПО РЕМЕННОЙКООРДИНАТЕ}
{ H   МАССИВ ШАГОВ СЕТКИ ПО ПРОСТРАНСТВУ }

{ РЕЗУЛЬТАТЫ ВЫЧИСЛЕНИЯ ФУНКЦИЙ И ИХ
ПРОИЗВОДНЫХ }
VAR YY,QYY: REAL;
P1,P2 : REAL; { ДОПОЛНИТЕЛЬНЫЕ ПАРАМЕТРЫ }
BEGIN
YY := 1+U*U;
QYY := SQRT(YY);
CC := 1/(2*QYY);
CCU := -U/(2*QYY*YY);
WW := 0;
WWU := 0;
KA := U/(2*QYY); { KA:= KA (U,X,T) }
```

```
KAX := 0;
KAU := 1/(2*QYY*YY);
KAXU:= 0;
KAUU:= -3*U/(2*QYY*YY*YY);
FF := 1- EXP(2*(T+X))-EXP(-2*(T+X))- MK*U/X;
FFU := -MK/X;
{*:=:=:=:=:=:=:=:=*} END;{FUNK} {*:=:=:=:=:=:=:=*}
END.
```

## **ПРИЛОЖЕНИЕ Б3.**

Фрагмент программы KNUT на языке «PL / 1»

```
FUNK: /* КОЭФФИЦИЕНТЫ УРАВНЕНИЯ И ИХ  
ПРОИЗВОДНЫЕ */  
      PROC  
      ( X,T,U,XN,XK,H ,L  
      ,MK,CC,CCU,WW,WWU,KA,KAX,KAU,KAXU,KAUU,FF,FFU);  
      DCL ( X,T,U, /* U- ИСКОМАЯ ФУНКЦИЯ */  
            XN,XK, /* НАЧАЛО И КОНЕЦ ИНТЕРВ. */  
            L, /* ШАГ СЕТКИ ПО ВРЕМЕННОЙ  
КООРДИНАТЕ */  
            P1,P2 ) /* ДОПОЛНИТЕЛЬНЫЕ ПАРАМЕТРЫ */  
                  FLOAT (16),  
H /* МАССИВ ШАГОВ СЕТКИ ПО РОСТРАНСТ. */  
      (*)FLOAT(16),  
      MK /* ФАКТОР ФОРМЫ ( 0, 1, 2 ) */  
      /* РЕЗУЛЬТАТЫ ВЫЧИСЛЕНИЯ ФУНКЦИЙ И ИХ  
ПРОИЗВОДНЫХ:*/  
      (CC,CCU,WW,WWU,KA,KAX,KAU,KAXU,KAUU,FF,FFU)  
      DCL (YY,QYY) FLOAT(16);  
          YY = 1+U*U; QYY=SQRT(YY);  
          CC = 1/(2*QYY);  
          CCU = -U/(2*QYY*YY);  
          WW = 0;  
          WWU = 0;  
          KA = U/(2*QYY); /* KA= KA (U,X,T) */  
          KAX = 0;  
          KAU = 1/(2*QYY*YY);  
          KAXU= 0;  
          KAUU= -3*U/(2*QYY*YY*YY);  
          FF = 1- 2*COSH(2*(T+X))- MK*U/X;  
          FFU=-MK/X;  
/*===== END FUNK; =====*/
```

## **ПРИЛОЖЕНИЕ Б4.**

Фрагмент запускающего модуля программы KNUT на языке «DELPHI»

```
unit Unit1;

interface

uses
  Windows, Messages, SysUtils, Variants, Classes,
  Graphics,UtilsAssembling,
  Controls, Forms, Dialogs, Menus, Buttons, ExtCtrls, StdCtrls;

type
  TMainForm = class(TForm)
    MainMenu1: TMainMenu;
    File1: TMenuItem;
    Open1: TMenuItem;
    Close1: TMenuItem;
    SaveAs1: TMenuItem;
    About1: TMenuItem;
    Help1: TMenuItem;
    Timer1: TTimer;
    OpenDialog1: TOpenDialog;
    N1: TMenuItem;
    Panel1: TPanel;
    SpeedButton1: TSpeedButton;
    SpeedButton2: TSpeedButton;
    SpeedButton3: TSpeedButton;
    Edit1: TEdit;
    Label1: TLabel;
    Lbl2: TLabel;
    Lbl3: TLabel;
    Bevel1: TBevel;
    Bevel2: TBevel;
    Label2: TLabel;
    procedure FormCreate(Sender: TObject);
    procedure FormPaint(Sender: TObject);
    procedure About1Click(Sender: TObject);
    procedure SpeedButton2Click(Sender: TObject);
    procedure SpeedButton3Click(Sender: TObject);
    procedure Timer1Timer(Sender: TObject);
  end;
```

```

procedure SpeedButton1Click(Sender: TObject);

private
  { Private declarations }
public

  { Public declarations }
end;

var
  MainForm : TMainForm;
  PathAppl, ss,
  PathImages : String[80];
  ff,f : Textfile;
  i : integer;
  ch : Char;
  APCHAR : ARRAY[0..200] of char;
  A1 : array[0..255] of Real;
  A2 : array[0..255] of Real;
  A3 : array[0..255] of Real;
  A4 : array[0..255] of Real;
implementation

uses About, Unit_End, Unit2;

{$R *.dfm}

procedure TMainForm.FormCreate(Sender: TObject);
begin
  MainForm.Color:=$00A6FD7B;
  MainForm.Height:=480;
  MainForm.Width:=696;
  MainForm.Top:=30;
  Autosize:= False;
  PathAppl:=ExtractFilePath(Application.ExeName);
  SpeedButton1.Left:=round((ClientWidth-
  SpeedButton1.Width)/2);
  GETWINDOWSDIRECTORY(apchar,255);
  for i:=0 to 255 do
    begin
      ch:=apchar[i];

```

```

        Edit1.Text:=Edit1.Text+ch;
      end;
      (* ----- *)
    end;

    Lbl2.Caption := DatetoStr(now);
  end;

procedure TMainForm.FormPaint(Sender: TObject);
var i : integer;
begin
  With Canvas.Font do
    begin
      Name := 'Times New Roman';
      Size := 28;
      Color := clRed;
      for i:=1 to ClientHeight*4 do
        begin
          canvas.Pen.Color:=RGB(255+i, 200-i,255- i div 4);
          canvas.MoveTo( 0,i+50);
          canvas.LineTo(ClientWidth,i-90);
        end;
        end;
  Canvas.Brush.Color := Color;
  Canvas.TextOut(210, 76, 'program-pockage');
  Canvas.TextOut(288, 128, 'KNUT');
end;

procedure TMainForm.About1Click(Sender: TObject);
begin
  MainForm.Hide;
  frmAbout.Show;
end;

procedure TMainForm.SpeedButton2Click(Sender: TObject);
begin
  MainForm.Hide;
  fmCloseForm.Show;
end;

procedure TMainForm.SpeedButton3Click(Sender: TObject);
begin

```

```

        MainForm.Hide;
        Form2.Show; // fmCloseForm.Show;
end;

procedure TMainForm.Timer1Timer(Sender: TObject);
begin
    Lbl3.Caption:=TimetoStr(now);
end;

procedure TMainForm.SpeedButton1Click(Sender: TObject);
var i : integer;
    f : TextFile;
begin
    for i:=1 to ClientHeight*4 do
    begin
        canvas.Pen.Color:=RGB(255-i, 0,255- i div 4);
        canvas.MoveTo( 0,i+2);
        canvas.LineTo(ClientWidth,i-78);
    end;
    ss:= PathAppl+'/Data'+'/out.txt';
    AssignFile (F, ss);
    Rewrite (F);
    writeln (F,'VychCoef');
    VychCoef(a1 ,a2,a3,a4);
    CloseFile(F);
    end;
end.

/*****************************************/
/*****************************************/

```

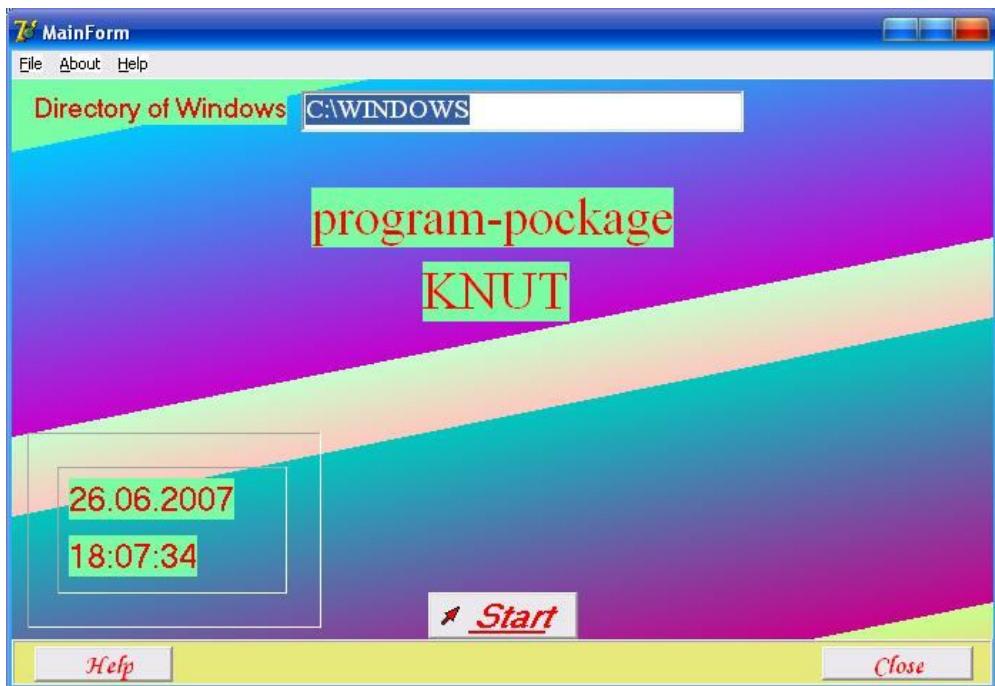
ТАБЛИЦА 1 и ТАБЛИЦА 2

$\tilde{\tau}$	X = 0,2	X = 0,4	X = 0,6	X = 0,8	$\Delta \max \cdot 10^3$	$\varepsilon_{\max} \%$
0,6	2,37557	3,62686	5,46623	8,19192	3,76	0,153
	2,37921	3,63062	5,46967	8,19427		
0,8	3,62686	5,46623	8,19192	I2,24558	5,29	0,146
	3,63216	5,47175	8,19669	I2,24936		
1,0	5,46623	8,19192	I2,24588	I8,28545	7,78	0,142
	5,47401	8,20007	I2,25339	I8,29060		
1,2	8,19192	I2,24588	I8,28545	27,28992	II,51	0,140
	8,20343	I2,25797	I8,29660	27,29755		

$\tilde{\tau}$	X = 0,2	X = 0,4	X = 0,6	X = 0,8	$\Delta \max \cdot 10^4$	$\varepsilon_{\max} \%$
0,0	3,77492	3,I8I28	2,69525	2,29732	0,00	0,00
	3,77492	3,I8I28	2,69525	2,29732		
0,2	4,50000	3,77492	3,I8I28	2,69525	0,12	2,6
	4,50012	3,77502	3,I8I36	2,69530		
0,4	5,38561	4,50000	3,77492	3,I8I28	0,27	5,0
	5,38588	4,50022	3,77509	3,I8I38		
0,6	6,46730	5,38561	4,50000	3,77492	4,45	6,9
	6,46775	5,38597	4,50026	3,77506		

Рис. 1.

Внешний вид модуля для запуска программы «KNUT» в среде DELPHI



```
/**************************/  
/**************************/
```

Рис. 2

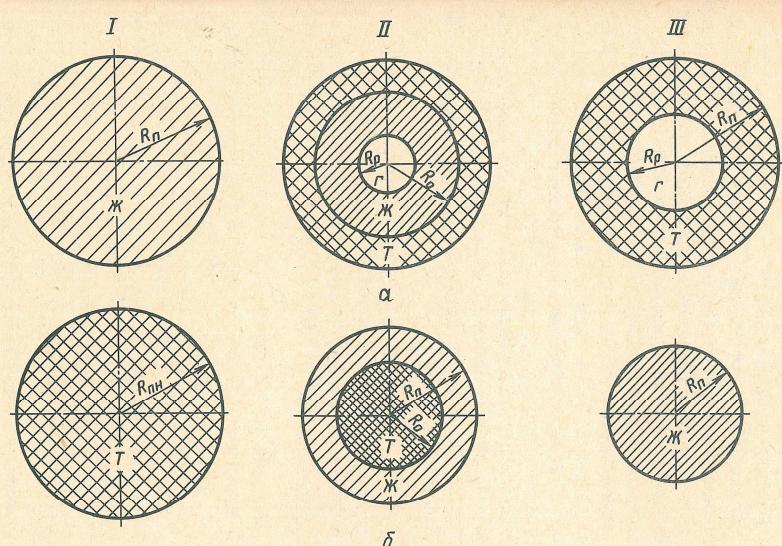
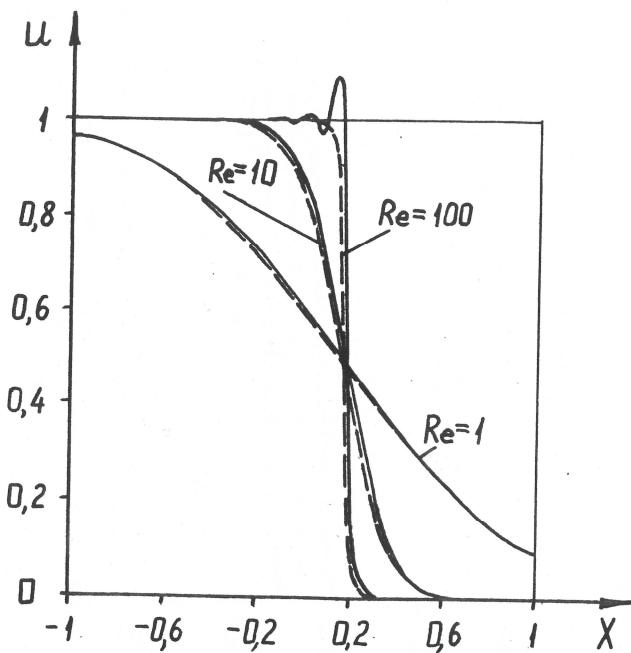


Схема образования термической усадки:

а - внутренней при кристаллизации частицы однокомпонентного плава; б - внешней при плавлении частицы шихты (сечение - большой круг частицы):

I - начальный момент; II - течение процесса; III - окончательное формирование

Рис. 3



Решение уравнения Бюргерса для различных значений  $Re$  при  $T=0,23$ .

- - - - точное решение;

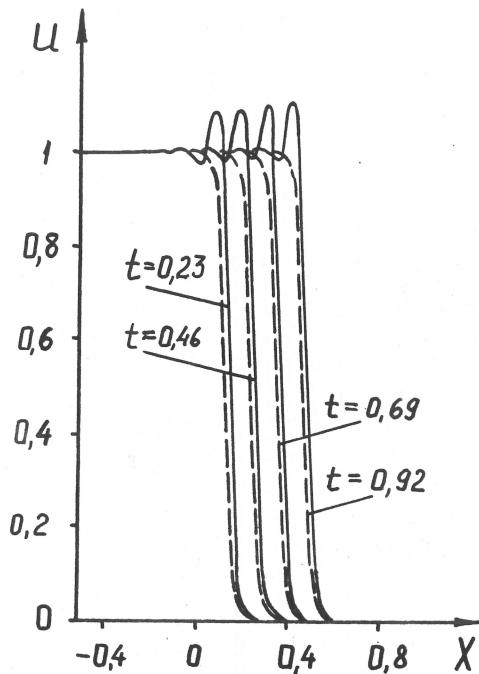
— численное решение при

$\Delta t = 0.005$  – шаг по временной координате;

$\Delta x = 0.04$  – шаг по пространственной координате;

$N_{\max} = 2$  – максимальное количество итераций на каждом временном слое.

Рис. 4



Решение уравнения Бюргерса при  $Re = 100$  для различных значений  $t$ .

- - - - точное решение;

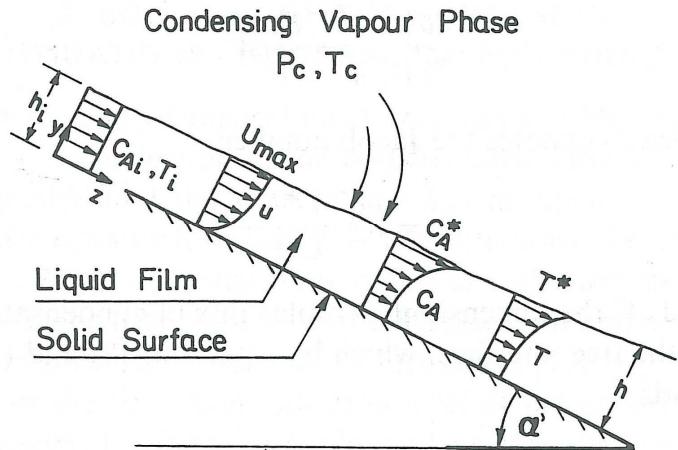
— численное решение при

$\Delta t = 0.005$  – шаг по временной координате;

$\Delta x = 0.04$  – шаг по пространственной координате;

$N_{\max} = 2$  – максимальное количество итераций на каждом временном слое.

Рис.5



Стекание плёнки по наклонной плоскости одновременно с конденсацией на её поверхности паровой фазы.

Рисунок приведен из работы Н. Браунер [103]

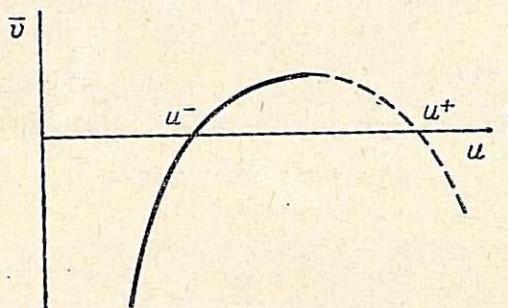
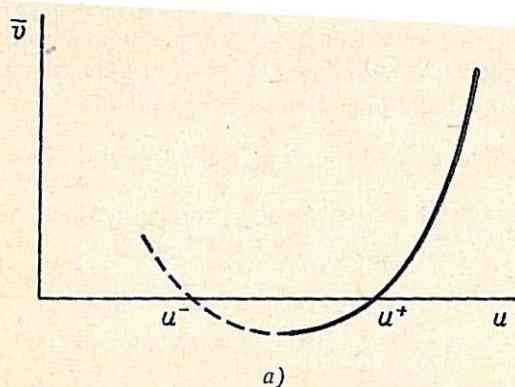


График функции  $\bar{v}(u)$ :  
 $a$ —при  $a_j > 0$ ;  $b$ —при  $a_j < 0$

метода

При интегрировании аппроксимации коэффициента теплопроводности ломаными линиями возникает вопрос, какую параболу использовать в расчётах. Подробные формулы по этому вопросу обсуждаются в работе [76].

## ПРИЛОЖЕНИЕ Г. Подробности некоторых вычислений.

### 1. Вычисление дифференциала Фреше.

Автор счёл своим долгом привести подробности вычисления дифференциала Фреше достаточно общего нелинейного одномерного нестационарного уравнения теплопроводности (хотя ранее и предупреждал, что такая работа по плечу студентам второго курса любого университета).

Пусть рассматривается уравнение :

$$\rho(u,x,\tau)U_\tau + w(u,x,\tau)U_x = [\lambda(u,x,\tau)U_x]_x + (m^* \lambda(u,x,\tau)/x)U_x + Q(u,x,\tau), \quad (\text{г.2.1})$$

где  $U_\tau$  - производная искомой функции  $U$  по временной координате  $\tau$ , а целочисленный фактор симметрии - коэффициент  $m$  принимает значения от 0 до 2-х, в зависимости от типа симметрии объекта (плоскость, цилиндр и шар).

Как видно из уравнения, все коэффициенты зависят от искомой функции, а следовательно – уравнение нелинейно.

Введём следующее обозначение:

$$\Phi \equiv \rho(u,x,\tau)U_\tau + [w(u,x,\tau) - \lambda_u U_x - \lambda_x - (m\lambda)/x]U_x - \lambda \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} - Q(u,x,\tau). \quad (\text{г.2.2.})$$

$$- \lambda \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} - Q(u,x,\tau).$$

Итак, рассматривается, вообще говоря, нелинейное уравнение

$$\Phi = 0 \quad (\text{г.2.3.})$$

Для вычисления дифференциала Фреше уравнения (г.2.3.) потребуются следующие вычисления :

$$\Phi \equiv \rho (u, x, \tau) U_\tau + [w(u, x, \tau) - \lambda_u U_x - \lambda_x - (m \lambda) / x] U_x - \lambda U_{xx} - Q(u, x, \tau). \quad (\text{г.2.4.})$$

В уравнении (г.2.4.) все величины вычисляются на временном слое  $s$ .

$$\frac{\partial \Phi}{\partial U_{xx}} (U_{xx}^{s+1} - U_{xx}^s) == -\lambda (U_{xx}^{s+1} - U_{xx}^s). \quad (\text{г.2.5.})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Phi}{\partial U_x} (U_x^{s+1} - U_x^s) &== [-2\lambda_u U_x + \\ &+ w - \lambda_x - \frac{m\lambda}{x}] (U_x^{s+1} - U_x^s), \end{aligned} \quad (\text{г.2.6.})$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial U_\tau} (U_\tau^{s+1} - U_\tau^s) == \rho (U_\tau^{s+1} - U_\tau^s), \quad (\text{г.2.7.})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Phi}{\partial U} (U^{s+1} - U^s) &== \rho_u U_\tau + \{ [\frac{\partial w}{\partial U} - \lambda_{xu} - \lambda_{uu} U_x - m \lambda_u / \\ &x] U_x - \lambda_u U_{xx} - Q_u \} (U^{s+1} - U^s), \end{aligned} \quad (\text{г.2.8.})$$

Складывая полученные выше выражения, будем иметь в левой части:

$$\Phi + \frac{\partial \Phi}{\partial U_{xx}} (U_{xx}^{s+1} - U_{xx}^s) + \frac{\partial \Phi}{\partial U_x} (U_x^{s+1} - U_x^s) + \frac{\partial \Phi}{\partial U_\tau} (U_\tau^{s+1} - U_\tau^s) + \frac{\partial \Phi}{\partial U} (U^{s+1} - U^s), \quad (\text{г.2.9.})$$

Аналогично сложим правые части предыдущих формул  
**(г.2.5.) - (г.2.8.).**

После приведения подобных получим следующее:

$$\rho^s U_\tau^s + (Z + \lambda_u^s U_x^s) U_x^s - \lambda^s U_{xx}^s - Q^s - \lambda^s (U_{xx}^{s+1} - U_{xx}^s) +$$

(г.2.10.)

$$+ Z(U_x^{s+1} - U_x^s) + \rho^s (U_\tau^{s+1} - U_\tau^s) + M(U^{s+1} - U^s)$$

Приводя подобные в выражении (г.2.10.), получим:

$$\rho^s \frac{\partial U^{s+1}}{\partial \tau} + Z \frac{\partial U^{s+1}}{\partial x} - \lambda^s \frac{\partial^2 U^{s+1}}{\partial x^2} + MU^{s+1} = G, \quad (\text{г.2.11.})$$

где  $Z$ ,  $M$  и  $G$  вычисляются по следующим формулам:

$$Z = -2\lambda_u^s \frac{\partial U^s}{\partial x} + w^s - \lambda_x^s - (m\lambda^s)/x;$$

$$M = \{ [w_u - \lambda_{xu}^s - \lambda_{uu}^s U_x^s - (m\lambda_u^s)/x] \frac{\partial U}{\partial x} - \frac{\partial \lambda}{\partial U} \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} - \frac{\partial F}{\partial U} \}$$

$$G = \{ \quad \}$$

### Апроксимация левого краевого условия 2-го рода.

Стремясь к получению более точных результатов, создадим достаточно высокую аппроксимацию краевого условия.

$$\frac{\partial U(x_n, t)}{\partial x} = A_3, \quad (\text{г.3.1.})$$

$$c \frac{\partial U}{\partial t} + z \frac{\partial U}{\partial x} - k \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + MU = G,$$

где  $x_n$  - начальная точка интервала по пространству.

Из разложения в ряд Тейлора искомой функции  $U(x, t)$  в окрестности узла сетки  $(x_n, t)$ , вытекает:

$$\begin{aligned} \frac{U_1(x_n, t) - U_0(x_n, t)}{h} &= \frac{\partial U(x_n, t)}{\partial x} + \\ &+ \frac{h}{2} \frac{\partial^2 U(x_n, t)}{\partial x^2} + O(h^2). \end{aligned} \quad (\text{г.3.2.})$$

Из второго уравнения системы (г.3.2.) при  $x = x_n$ , имеем:

$$\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} = \frac{1}{K} \left[ c \frac{\partial U}{\partial t} + z \frac{\partial U}{\partial x} + MU - G \right]. \quad (\text{г.3.3})$$

Подставляя (г.3.3) в (г.3.2), получим :

$$\begin{aligned} \frac{U_1 - U_0}{h} - \frac{h}{2K} \left[ c \frac{\partial U}{\partial t} + z \frac{\partial U}{\partial x} + MU - G \right] &= \frac{\partial U(x_n, t)}{\partial x} + \\ &+ O(h^2) \end{aligned} \quad (\text{г.3.4.})$$

Преобразуем правую часть ( г.3.4)

$$\begin{aligned} \frac{U_1 - U_0}{h} - \frac{h}{2K} [c \frac{\partial U}{\partial t} + z \frac{\partial U}{\partial x} + MU - G] = \\ = (1 + \frac{hz}{2K}) \frac{\partial U(x_n, t)}{\partial x} + O(h^2) \end{aligned} \quad (\text{г.3.5})$$

Продолжая преобразование уравнения ( г.3.5), будем иметь:

$$\begin{aligned} \frac{2K}{2K + hz} \left\{ \frac{U_1 - U_0}{h} - \frac{h}{2K} [c \frac{\partial U}{\partial t} + z \frac{\partial U}{\partial x} + MU - G] \right\} = \\ = \frac{\partial U}{\partial x} + O(h^2). \end{aligned} \quad (\text{г.3.6})$$

Подставляя аппроксимацию производной искомой функции по пространственной координате из уравнения ( 5.3.6) в уравнение ( 5.3.1), имеем:

$$S_1 \left\{ \frac{U_1 - U_0}{h} - \frac{h}{2K} [c \frac{\partial U}{\partial t} + MU - G] \right\} = A_3, \quad (\text{г.3.7.})$$

где

$$S_1 = \frac{2K}{2K + hz}.$$

Умножая уравнение ( г.3.7.) на сомножитель **2Khд** и вводя дополнительные переменные **S<sub>2</sub>** и **S<sub>3</sub>**, получим соотношение:

$$S_3 = S_1 h^2 (cU_0^j + dG) - 2Khд A_3. \quad (\text{г.3.8.})$$

Аппроксимация правого краевого условия 3-го рода.

Как и в предыдущем пункте, мы постараемся здесь получить достаточно высокую аппроксимацию краевого условия.

Итак, вновь рассмотрим линеаризованное уравнение

$$c \frac{\partial U}{\partial t} + z \frac{\partial U}{\partial x} - k \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + MU = G, \quad (\text{г.4.1.})$$

совместно с правым краевым условием

$$-K \frac{\partial U(x_k, t)}{\partial x} = A_2 U(x_k, t) - B_2. \quad (\text{г.4.2.})$$

Как и в предыдущем пункте, мы используем разложение искомой функции  $U(x, t)$  в точке  $(x_k - h, t) = U_{k-1}$ .

Где  $k$  – конечная точка пространственной координаты.

## Список литературы.

1. Беллман, Р. Калаба. Квазилинеаризация и краевые задачи. Издательство "Мир", Москва, с. 183, 1968
- 1-е. Richard E. Bellman, Robert E. Calaba. Quazilinerization and Nonlinear boundary-value problems. New -York, 1956
2. Л.В. Канторович. ДАН СССР, LIX, № 7, с. 1237-1240, 1948.
3. Л.В. Канторович. Успехи матем. Наук, III, № 6, с.89-185, 1948.
4. Л.В. Канторович. Труды матем. инст. им. Стеклова т. 28, с.104-144, 1948.
5. И.П. Мысовских. Труды матем. инст. им. Стеклова т. 28, с.145-147, 1948
6. Г.П. Акилов. ДАН СССР, LXVIII, № 4, с. 645-648, 1949.
7. Л.В. Канторович, В.И. Крылов. Приближенные методы высшего анализа. Изд.3, 1949. 696 с.
- 7-е. Kantorovich L. V., Krylov V.I., V.1. 1958, Approximate Methods of Higher Analysis (The Netherlands, P. Noordhoff).
8. А.И. Кошелев. ДАН СССР, XCI, № 6, с. 1263-1266, 1953.
9. Ю.А. Соколинский., Кинетика и катализ, 8. No. 4, с.140, 1967.
10. Г. Я. Миронова, Ю.А. Соколинский, В.М. Олевский., Расчёт противоточного процесса массообмена в ламинарно стекающей плёнке жидкости. Теор. основы. хим.технол.Том 6, №1, с. 3-9, 1972.
11. Л. В. Канторович. Вестник ленинградского университета., № 7, с.68-103,1957.
12. В.Е. Шаманский. Методы численного решения краевых задач на ЭЦВМ, ч.2, Киев, «Наукова думка», 1966 .
13. А. М. Вайнберг, В.К. Конторович, Р.З. Хитерер. Теор. Основы хим.Технологии. Том 25. с.805-813.1991.
- 13-е. A. M. Vainberg, V.K. Kontorovich, R.Z. Khiterer. Solution of Nonstationary Heat and Mass Transfer Problems in Nonlinear Media by the

- Newton-Kantorovich Method. «Theoretical Foundations of Chemical Engineering». Vol.25, No. 6, pp. 667-774, 1991.
14. Ж.П. Обен, И. Экланд. Прикладной нелинейный анализ. М.Мир,1988
  15. Ж. Л. Лионс, Э. Мадженес. Неоднородные граничные задачи и их применения . М. «Мир», 1971.
  16. Э.М.Галеев, В.М. Тихомиров Краткий курс теории экстремальных задач. Изво Московского университета, 1989.
  17. М.П. Курин. Хим пром-сть, № 5, с.1.1953.
  18. J. Vernerde . Nitrogen, 60, № 4, p.29, 1969.
  19. Г. Холин, Д.А. Серовский, Б.Я. Татьянченко. Теор. основы хим. технол., № 5, с.778, 1974.
  20. А.А. Самарский, П.Н. Вабищевич. Численные методы решения задач конвекции- диффузии. М. Эдиториал УРСС, 247 с.1999.
  21. А.А. Самарский, П.Н. Вабищевич, Вычислительная теплопередача. Издательство: Едиториал УРСС. 2003.
  22. С.Н. Бернштейн. Собрание сочинений. т.3, Изд-во АН СССР,1960.
  23. В.В. Гудков, Ю.А. Клоков, А.Я. Лепин, В.Д. Пономарёв. Двухточечные краевые задачи для обыкновенных дифференциальных уравнений. Латвийский государственный университет, 135 с. 1973.
  24. Ю.В. Аксельрод, В.В. Дильтман, А.М. Вайнберг, Ю.В. Фурмер, Теор. основы хим. технол., 4, № 6, с. 845, 1970.
  25. Ю.В. Аксельрод, В.В. Дильтман, А.М. Вайнберг, Тр. ГИАП, вып 6, с. 283, 1971.
  26. P.V. Dankwerts Chem. eng. Sci., 2, № 1, p.1, 1953.
  27. G. Houghton., Canad. J.Chem. Eng., 40, p.188, 1962.
  28. A. Acrivos, Chem. Eng. Sci., 13, p.1, 1960.
  29. Adler I., Vortmyer P., Chem. Eng. Sci., 18, p. 99, 1963.
  30. Т.Р. Терловская, М.Б. Кац, Л.С. Генин., Теор. основы хим. технол., № 1, с. 86, 1977.
  31. В.А. Реутский., В сб. «Процессы и аппараты химической технологии», т.4, с. 5, М., ВИНИТИ, 1976.
  32. В.В. Дильтман, Ю.В. Аксельрод, Л.В. Алекперова, О.Л. Лебедев, Хим. пром-сть, № 7, с.532, 1967.

33. В.В. Кафаров, Е.Н. Марина, В.В. Шестопалов, Хим. пром-сть, № 9, с.135, 1967.
34. R.D. Mhaskar, Chem.Eng. Sci., 29, № 4, p.897, 1974.
35. В.М. Рамм, Абсорбция газов. М. «Химия», 1976.
36. D.W. Van Krevelen, P.J. Hoftijzer Rec.trav.chim. 7, № 9-10, p. 563, 1948.
37. P.L. Brian, J.F. Hurley, E.H. Hasseltine. A.I. Ch. J. 7, № 2, p. 226, 1961.
38. М.Х. Кишиневский, Теор. основы хим. технол. 1, № 6, с. 759, 1967.
39. D.W. Van Krevelen, P.J. Hoftijzer, Chem. Eng. Sci., 2, №4, p.145, 1953.
40. А.М. Вайнберг, Методы и техника современного проектирования. Секретариат СЭВ, приложение 10, с. 51, 1972.
41. Л.В. Алекперова., Канд. дисс. М. ГИАП, 1972
42. С.Г. Михлин, Х.Л. Смолицкий Приближённые методы решения дифференциальных и интегральных уравнений. СМБ. Изд-во «Наука», 1965.
43. Х. Гаевский, К. Грёгер, К. Захариас. Нелинейные операторные уравнения и операторные дифференциальные уравнения. Из-во «Мир», 1978.
44. [М.Е. Иванов, В.М. Линдн] А.М. Вайнберг, К.М. Захарова. Анализ и расчёт теплопереноса в гранулах. Труды ГИАП, вып. 14, стр.181-191, 1972.
45. А.М. Вайнберг. Тр. ГИАП, вып. 57, с.102 – 110, 1980.
46. З.Р. Горбис. Теплообмен дисперсных сквозных потоков, М., «Энергия», 1964.
47. А.М. Вайнберг. Расчёт нестационарного теплообмена внутри гранул в грануляционных башнях. Методы дизайна. СЭВ, № 13-14, р.91, 1973.
48. А.М. Розен, А.И. Беззубова. Теор. основы хим. технол., том 2, № 6, с.850, 1963.
49. A. Einstein, Annal. Physik, **19**, p. 289, 1906.
50. О.А. Ладыженская, Тр. IV Всес. матем. съезда. М.Физматгиз, т 1,1964.
51. С.Л. Каменомостская, Канд. дисс., МГУ, 1958.
52. С.Л. Каменомостская, Матем. сборник,53 (95), № 4, с.489, 1961.

53. Б.М. Будак, Е.Н. Соловьёв, А.Б. Успенский, Ж. вычисл. математики и матем. физики, 5, с. 828, 1965.
54. А.А. Самарский, В.Д. Моисеенко, Ж. вычисл. математики и матем. физики, 5, с. 816, 1965.
55. А.М. Вайнберг., Канд. дисс. М. ГИАП, 1977.
56. А.М. Вайнберг, Метод расчёта тепло - и массопереноса для объектов с сильно изменяющимися физическими свойствами. Труды ГИАП, № 40, 38, 1976.
57. А.М. Вайнберг, Специфика применения метода квазилинеаризации к нелинейным уравнениям параболического типа в процессах тепло- и массопереноса. Четвёртая конференция по дифференциальным уравнениям и их применению. Тезисы докладов. РУСЕ, НРБ, с.47-51, 1989.
- 58 А.М. Вайнберг, Обобщение постановки задачи Стефана. Четвёртая конференция по дифференциальным уравнениям и их применению. Тезисы докладов. РУСЕ, НРБ, с. 123-128, 1982.
59. А.М. Вайнберг, В. К. Конторович. Решение нелинейных уравнений переноса методом квазилинеаризации. Рукопись депонирована в ВНИИНТПИ, с. 29 1991 г.
60. С.Л. Каменомостская Мат.сб. 53, № 4 с. 488, 1961.
61. Л.И. Рубинштейн. Проблема Стефана, Рига, изд - во «Звяззне», 1967.
62. Б.М. Будак, Ф.П. Васильев, А.Б. Успенский. Разностные методы решения некоторых краевых задач типа Стефана. В сб.работ ВЦ МГУ: «Численные методы в газовой динамике», т. 4. Изд-во МГУ, М. 1965.
63. Н.Р. Берман, Автореферат канд. дисс., Москва, МОПИ им. Крупской, 1968.
64. В. А. Галактионов, С. П. Курдюмов, А. А. Самарский, О методе стационарных состояний для квазилинейных параболических уравнений, Метем. сб., 180:8, с. 995–1016, 1989.

65. М.Е. Иванов, В.М. Линдин, А.М. Вайнберг, К.М Захарова. Труды ГИАП, вып. XIV., с 181, 1972.
66. А.М. Вайнберг., Автореферат канд. дисс., Москва, ГИАП, 1977.
67. D. Rayleigh, Proc. Lond. Math. Soc. 10, п. 4, 1978.
68. А.С. Лышевский., Закономерности дробления жидкостей механическими форсунками давления, Новочеркасск, 1961.
69. E.G. Foster, F. Daniels., Ind. Eng. Chem. 43, p.986, 1951.
70. Э.Б. Красный, Автореферат кандид. дисс., Казань, 1962.
71. Е. А. Казакова, Р.З. Хитерер., и др. Труды ГИАП, вып. XI, с.186, Изд-во Госхимиздат, 1960.
72. Е. А. Казакова, Р.З. Хитерер, Н.С. Савостьянова., Хим пром-сть, № 2, с.18, 1970.
73. Г.И. Розенберг, Кандид. диссертация, Каз. ХТИ, 1968
74. И. Е. Неймарк, Ю.Р. Шейнфайн, Силикагель, его получение, свойства и применение, «Наукова Думка», Киев, 1973.
75. А.М. Вайнберг. IV конф. по дифференциальным уравнениям и их применением. Болгария. с.47, 1989.
76. А.М. Вайнберг. Применение математических методов и вычислительной техники при проектировании химических производств. Труды ГИАП, выпуск 40, с 38-48, 1976.
77. И.Г. Петровский. Лекции об уравнениях с частными производными. Госуд. Издат. Физ.- мат. литературы, Москва, 1961.
78. J.D. Cole. On a quasilinear parabolic equation occurring in aerodynamic // Q. Appl. Math. v . 9.p. 225. 1951.
79. E. Hopf. The partial differential equation  $u_t + uu_x = \mu u_{xx}$  // Comm. Pure Appl. Math. v. 3. p. 201, 1950.
80. Дж. Уизем. Линейные и нелинейные волны. М. Мир. 1977.
81. А.Ш. Беркович, А.М. Вайнберг, М.Е. Иванов, Е.В. Яновский, Труды ГИАП, Вып. 33, с. 63, 1975.

82. А.М. Вайнберг. Информационный бюллетень по химической промышленности, Секретариат СЭВ, № 2, (59), с. 102, 1976.
83. А.М. Вайнберг, В.И. Мукосей. Применение метода квазилинеаризации для численного решения задачи Стефана и некоторых нелинейных уравнений теплопроводности. Конференция « Математические проблемы химии». Новосибирск. часть 1, с.140-151, 1973.
84. А.М. Вайнберг, В.И. Мукосей. Эффективные численные методы решения квазилинейных уравнений теплопроводности. Новосибирск, часть 1, с. 57- 63, 1975.
85. Б.Г. Холин. Центробежные и вибрационные грануляторы плавов и распылители жидкости. Издательство «Машиностроение», с. 182, 1977.
86. М. Олевский, В.Р. Ручинский , А.М. Кашников, В.И. Чернышёв. Плёночная тепло- и массообменная аппаратура. «Химия», М. 1988.
87. Р. Рихтмайер, Л. Мортон. Разностные методы решения краевых задач. Издательство «Мир» 1972.
88. И.М. Гельфанд, О.В. Локутевский. Метод «прогонки» для решения разностных уравнений. Дополнение к книге: С.К. Годунов, В.С. Рябенький. Введение в теорию разностных схем. Изд-во «Физматгиз», 1962.
89. Б.В. Алексеев, А.М. Гришин. «Физическая газодинамика реагирующих сред». Высш. школа, Москва, 1985.
90. Е.М. Ландис. Уравнения второго порядка эллиптического и параболического типа. Издательство «Наука» 1971.
91. И.А. Гиндельблат., Теор. основы. хим. технол., 2, № 4, с.637, 1968.
92. А.А. Самарский. Введение в теорию разностных схем. М. Наука, 1971.
93. Функциональный анализ, СМБ. М., «Наука», 1972.
94. С.К. Годунов, В.С. Рябенький. Разностные схемы. Москва, из-во «Наука», 1977.
95. Л.С. Понтрягин. Дифференциальные уравнения и их приложения. в серии Знакомство с высшей математикой. Москва, из-во Наука, 1988 .

96. СБ. Численные методы решения задач переноса. Часть I. Минск 1971.
97. М.Е. Иванов, И.С. Михельсон. Математическая модель процесса доупаривания плавов минеральных удобрений. Труды ГИАП, вып. 39, с. 69-76, 1976.
98. М. Фленов. Библия Delphi, 2-е издание, из-во «БХВ-Петербург», Санкт- Петербург, 2008.
99. С.К. Годунов, В.С. Рябенький. Введение в теорию разностных схем. Москва, из-во «Физматгиз», 1962.
100. K. Feind, Stromung suntersuchungen bei Gegenstorm von Rieselfilmen und Gas in loterechten Rohern. VDI – Forschungsheft, Vol. B 26, № 481, 1960.
101. V. Ya.Mikkal,E.K. Siirde, The influence of Surface Curvature on Thickness of falling liquid film/ Trudy Tallinnsk. Politehn.Inst.Ser. A,№ 211, p. 213-225, 1964.
102. Б.А. Кадер, Теор. основы хим. технол., «Турбулентный перенос импульса, тепла и массы в гладких и шерховатых трубах», том XII, № 5, с.795, 1978.
103. N. Brauner, Non- isothermal vapour absorption into falling film in Int. J. Heat and Mass Transfer.Vol.34, № 37, pp.767-784, 1991.
104. N.Brauner, H.Thiele, Kompaktes berieseltes Rohrbrundel mit Vorrichtungend fur den Zulauf and Ablauf von Flussigkeiten. Chem. Anlagen + Verfahren, № 4, pp28-30, 1975.
105. А.Я. Раскин, Ю.А. Соколинский, В.И. Мукосей, М.Э. Аэров, Математическая модель и алгоритм расчёта радиальных адиабатических реакторов, ТОХТ, 2, 2, 220, 1968.
106. Д. Андерсон, Дж. Таннхилл, Р. Плетчер. Вычислительная гидромеханика и теплообмен. В 2-х томах. «Мир» 1990.
107. Н.В. Арделян. О применении метода Ньютона при реализации неявных разностных схем газовой динамики. Сб. «Вычислительные методы и программирование» 35. М. Московский университет, с. 136-144, 1981.
108. Э.М. Глаголев, В.М. Тихомиров. Краткий курс экстремальных задач. Из -во Московского университета, 1989.

109. М.Е. Иванов, А.М. Вайнберг, В.М. Линдин, К.М. Захарова. Нестационарный теплообмен, осложнённый фазовыми превращениями для гранул, выбрасываемых в охлаждающую среду. Теор. основы хим. технол., том VIII, № 6, с.880-888, 1974.
- 109-е. M.E. Ivanov, A.M. Vainberg, V.M. Lindin, K.M. Zakharova. Theoretical Foundation of Chemical Engineering "NONSTEADY HEAT EXCHANGE COMPLICATED BY PHASETRANSITIONS, FOR GRANULES EJECTED INTO A COLLING MEDIUM", vol. VIII, № 6, c.821-828, 1974.
110. В.И. Чернышов, А.М. Вайнберг, В.М. Олевский. Исследование дисперсии перераспределяемых субстанций в тепломассообменных процессах. Теор. основы хим. технол. Том 12. № 5 с. 658-666, 1978.
111. А.М. Вайнберг, В.И. Мукосей, В.С. Бесков,. Математическое моделирование процесса грануляции из расплавов и его применение при проектировании грануляционных башен. М. Труды ГИАП, 1976.
112. С.Патанкар. Численные методы решения задач теплообмена и динамики жидкости. М. «Энергоатомиздат», 1984.
- 112-е. S.Patankar. Numerical Heat Transfer and Fluid Flow. Hemisphere Publishing Corporation, New York. 1980.
113. С.В. Патанкар. Численное решение задач теплопроводности и конвективного теплообмена при течении в каналах; М. Изд. МЭИ; 2003.
114. Е.А. Казакова. Гранулирование и охлаждение в аппаратах с кипящим слоем. «Химия», 1973.
115. Е.А. Казакова. Гранулирование и охлаждение азотосодержащих удобрений (Грануляция и охлаждение азотосодержащих удобрений), Москва, Химия 1980.
116. Е.А. Казакова, А.Л. Таран, А.В.Таран, Методы для экспериментального и теоретического анализа кристаллизации гранул в потоке охладителя., Теор. основы хим. технологии, том. 18, н. 6, с. 761. 1984.

117. А.Б. Пиановский. "Оптимальное управление случайными последовательностями в задачах с ограничениями" Москва, "Научная книга", с.304 . 1996.
- 117-е, A.B. Piunovskiy. "Optimal control of random sequels in problems with constraints" Kluwer, Dordrecht-London, pp 345. 1997.
118. Л.П. Холпанов, В.Я. Шкадов, В.А. Малюсов, Н.М. Жаворонков. Теор. основы хим.технол., т.1, №1 с.73, 1967.
119. Л.П. Холпанов, В.Я. Шкадов, В.А. Малюсов, Н.М. Жаворонков. Теор. основы хим. Технол., т.3, №3 с.465, 1969.
120. J.W. Hibi "Proc. 2-nd Conf.appl. phys.chem., Vesprem, Budapest, v.2" p. 91, 1971.
121. В.Г. Ганчев, В.М. Козлов. Теор.основы хим.технол. т.7, № 5, с.727, 1973.
122. А.М. Вайнберг. Журнал «Информационный бюллетень по химической промышленности», Секретариат СЭВ, № 2, с.120, 1976
123. Б. И. Броунштейн, В. В. Щеголев. Гидродинамика, массо- и теплообмен в колонных аппаратах.- Л.: Химия,с.336, 1988.
124. Н.И. Гельперин, В.Л. Пебалк, А.Е. Костанян, Структура потоков и эффективность колонных аппаратов химической промышленности, М., 1977.
125. В.В. Кафаров. Методы кибернетики в химии и химической технологии, 4 изд., М., 1985.
126. И. А. Гильденблат, А.Ю. Закгейм. Структура потоков. М., 1985.
127. М.С. Сафонов Теор. основы. хим. технол., 6, с.127, 1972
128. М.С. Сафонов, Н.М. Воскресенский. XI Менделеевский съезд по химии, М. из-во «Наука», с.85, 1975.

129. В.И. Чернышёв, В.М. Олевский, А. Я. Галитский.,  
Теор.основы. химич. технологии., ., 6, No 3, с.426,  
1972.
- 130 В.И. Чернышёв. Кандидатская диссертация. М. ГИАП,  
1972.
130. А.М. Вайнберг, В.И. Чернышёв, В.М. Олевский, В.А.  
Герцовский, Т.Л. Кадер. Труды ГИАП, вып 31, с. 62,  
1975.
132. В.И. Чернышёв, А.М. Вайнберг, В.М. Олевский. Теор.  
основы. химич. технологии., 12, No 5 p. 658 1979.
133. Х. Бояджиев, В. Бешков. Массоперенос в движущихся  
пленках жидкости: Пер с англ. Механика. Вып.43  
с.136, 1988.
134. Л.И. Рубинштейн. Проблема Стефана. Рига. Изд. - во  
«Звайгзне». 1967.
135. Д. А., Франк-Каменецкий., Диффузия и теплопередача  
в химической кинетике, изд., М., 1987.
136. В. Г. Левич. Физико-химическая гидродинамика. —  
Издание 2-е, дополненное и переработанное. — М.:  
ГИФМЛ, с.700, 1959.
137. Л.В. Канторович, А.П. Акилов. Функциональный  
анализ, Изд-во БХВ-Петербург, 2004 .

138. А.А. Самарский, В.П. Михайлов. Математическое моделирование: Идеи. Методы. Примеры. Изд-во Физматлит. 2005.
139. Введение в математическое моделирование., Изд-во Университетская книга, Логос, 2007.
140. Мтематическое моделирование. Нелинейные дифференциальные уравнения математической физики. М. «Наука», 280 с. 1987.
141. Нуен Дык Фиен. Точные оценки метода Ньютона — Канторовича и их приложения. Автореферат кандидатской диссертации. Минск, 1989.
142. Б.А. Кадер, А.М. Яглом. Физические и вычислительные аспекты конвективного теплопереноса, УФН, том. 146, (5) 1985.
143. Г.И. Марчук. Методы вычислительной математики. М. «Наука», 608 с. 1989.
144. Kahn, Peter B. Mathematical methods for scientists and engineers: linear and nonlinear systems. New-York, Wiley, 1990.
145. Greenberg W., Polewczak J..Modern mathematical methods in transport theory. Operator theory, advanced and application v.51, 1991.
146. Ж.. Л. Лионс. Некоторые методы решения нелинейных краевых задач. С.588 1972.

147. В.В. Дильман, А.Д. Полянин, Методы модельных уравнений и аналогий в химической технологии, М. 1988.
148. А.Д. Полянин, В. Ф. Зайцев, Справочник по нелинейным уравнениям математической физики, М.: ФИЗМАТЛИТ, 453 с. 2002.
149. А.Д. Полянин, А.И. Журов, В.Ф. Зайцев Методы решения нелинейных уравнений математической физики и механики, 2005 г., 256 с.
150. Г.И Лаптев, Г.Г. Лаптев. Уравнения математической физики. М.: 2003
151. Сайт А.Д. Полянина. Мир математических уравнений  
<http://eqworld.ipmnet.ru/ru/forums.htm>
152. А.Куфнер , С. Фучик. Нелинейные дифференциальные уравнения 1988 г. 2005 г.
153. Б.П Безручко, А.А. Короновский, Д.И. Трубецков, А.Е. Храмов. Путь в синергетику: Экскурс в десяти лекциях.2010, 304 с.
154. Н. М. Беляев, А.А. Рядно. Методы теории Теплопроводности. М. Высшая школа, 1982, В двух частях.
155. К. Ланцш. Практические методы прикладного анализа. М. Из-во Физматлит. 1961, с. 524

## Предметный указатель.

- А Абсорбией называют **процесс** поглощения газовой фазы распределяющейся в жидкости в виде пузырьков и струек.

**Адиабатическая** система – это система, которая не получает теплоты извне и не отдает ее.

Адиабатическая температура ансамбля гранул это температура ансамбля в адиабатической системе.

Анизотропия (от греч. *ánisos* — неравный и *trópos* — направление) — неодинаковость **физических** (физико-химических) свойств среды. Например, **теплопроводности** и др. по различным направлениям внутри этой среды.

Автомодельные решения – самоподобные решения.

- Б Барботирование – пропускание мелких пузырьков газа через слой жидкости.  
Барботажные процессы - процессы, использующие барботирование в разнообразных аппаратах химической технологии.
- Г **Гетерогенная система** (от греч. *heterogenes* – разнородный) - неоднородная **система**, состоящая из однородных частей (фаз), разделенных поверхностью раздела.

**Гомогенная система** (от греч. - равный, одинаковый) – **система**, химический состав и физические свойства которой во всех частях одинаковы или меняются непрерывно, без скачков (между частями **системы** нет поверхностей раздела).

Грануляционная башня – вертикально расположенный закрытый с боковых сторон короб, внутри которого в верхней части происходит диспергирование струй расплава (через металлические лейки).

- Д Диспергирование – продавливание жидкой фазы (расплава) через дюзы гранулятора – лейки, которые образуют струи. Струи затем распадаются на капли за счёт аэродинамического взаимодействия охлаждающей среды и струй.

Дифференциал – главная часть приращения функции.

- 1) Действительная функция  $y = f(x)$  действительного переменного называется дифференцируемой в точке  $x$ , если она определена в некоторой окрестности этой точки и существует такое число  $A$ , что приращение  $\Delta y = f(x + \Delta x) - f(x)$  (при условии, что точка  $x + \Delta x$  лежит в упомянутой окрестности) может быть представлено в виде

$$\Delta y = A \Delta x + \alpha,$$

где  $\alpha / \Delta x \rightarrow 0$  при  $\Delta x \rightarrow 0$ . При этом  $A \Delta x$  обозначается через  $dy$  и называется дифференциалом функции  $f(x)$  в точке  $x$ . Дифференциал  $dy$  при фиксированном  $x$  пропорционален  $\Delta x$ , то есть является линейной функцией от  $\Delta x$ . Дополнительный член  $\alpha$  при  $\Delta x \rightarrow 0$  является, в силу определения, бесконечно малой более высокого порядка по сравнению с  $\Delta x$  (и по сравнению с  $dy$ , если  $A \neq 0$ ).

Именно в этом смысле дифференциал называют главной частью приращения функции.

Для функции, дифференцируемой в точке  $x$ ,  $\Delta y \rightarrow 0$  при  $\Delta x \rightarrow 0$ , то есть функция, дифференцируемая в некоторой точке, непрерывна в ней.

Функция  $f(x)$  дифференцируема в точке  $x$  в том и только в том случае, если она имеет в этой точке конечную производную

$$f'(x) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\Delta y}{\Delta x} = A;$$

при этом

$$dy = f'(x) \Delta x. \quad (1)$$

Существуют непрерывные но не дифференцируемые функции.

Кроме обозначения  $dy$  используется обозначение  $df(x)$ ; тогда предыдущее равенство (1) принимает вид

$$df(x) = f'(x) \Delta x \quad (2)$$

- 2) Определение дифференцируемости и дифференциала естественным образом обобщается на действительные функции от n действительных переменных.
- 3) Определения дифференцируемости и дифференциала почти без изменения распространяются на комплексные функции одного или нескольких переменных.

- И Изотермический процесс — процесс, происходящий в физической системе при постоянной температуре.
- К Квадратичная сходимость, согласно монографии [1] имеет вид:

$$\text{Max} |U_{m+1} - U_m| \leq K * (\text{Max} |U_m - U_{m-1}|)^2,$$

где  $K$  – некая константа,  $m$  – очередное приближение функции  $U$ , а максимум берётся по независимым переменным функции  $U - (x,t), (x,y)$  и т.д.

Это соотношение показывает, что если есть сходимость процесса итераций, то она квадратичная.

- Л Линейные пространства. Пусть  $E$  множество, в котором введена бинарная операция, ставящая в соответствие каждой паре  $x, y$  из  $E$  элемент из  $E$ , называемый суммой этих элементов и обозначаемый  $x + y$ , причём выполнены следующие аксиомы для всех

$x, y, z \in E$ :

1.  $x + y = y + x$  (коммутативность сложения).
2.  $(x + y) + z = x + (y + z)$  (ассоциативность сложения).
3. Существует единственный элемент  $0$  из  $E$ , называемый нулём, такой, что  
 $x + 0 = x$  для всех  $x \in E$ .
4. Каждому элементу  $x \in E$  существует единственный противоположный элемент из  $E$ , обозначаемый  $-x$ , такой, что

$$x + (-x) = 0. \text{ (Вместо } x + (-y) \text{ пишут } x - y\text{.)}$$

Пусть, кроме этого, введена операция умножения элементов из  $E$  на числа из поля  $K$ , удовлетворяющая следующим аксиомам:

Для любых  $\alpha, \beta \in K$  и  $x, y \in E$ :

5.  $\alpha(\beta x) = (\alpha \beta)x$  (ассоциативность умножения).
6.  $\alpha(x + y) = \alpha x + \alpha y$  (законы дистрибутивности).
7.  $(\alpha + \beta)x = \alpha x + \beta x$  (законы дистрибутивности).
8.  $1x = x$ .

Множество  $E$  с операциями, удовлетворяющими перечисленным аксиомам, называется линейным или векторным пространством над полем  $K$ , а его элементы – векторами или точками пространства  $E$ . Пространство  $E$  называется вещественным, если  $K$  – поле вещественных чисел  $R$ , и комплексным, если  $K$  – поле комплексных чисел  $C$ .

М МММ - методы математического моделирования.  
Определение Ю.А. Соколинского МММ дано в главе 2 пункт 1.

Метод второго порядка – метод, имеющий квадратичную сходимость.

Метрическое пространство. Метрическим пространством называется пара  $(E, \rho)$

где  $E$  – некоторое множество и  $\rho(x, y)$  вещественная функция, удовлетворяющая для всех  $x, y, z \in E$  следующим условиям:

1.  $\rho(x, y) \geq 0$  и  $\rho(x, y) = 0 \Leftrightarrow x = y$ ;
2. (аксиома симметрии)  $\rho(x, y) = \rho(y, x)$ ;
3. (аксиома треугольника)  $\rho(x, y) \leq \rho(x, z) + \rho(z, y)$ .

Функция  $\rho$  называется расстоянием или метрикой на  $E$ .

- Н Нормированные пространства. Линейное пространство  $E$  над  $R$  или  $C$  называется нормированным, если каждому вектору  $x \in E$  поставлено в соответствие вещественное число, называемое нормой вектора  $x$  и обозначаемое  $\|x\|$ , причём выполнены следующие аксиомы (справедливые для всех  $x, y \in E$  и всех скаляров  $\alpha$ ):
1.  $\|x\| \geq 0$ , причём  $\|x\| = 0 \Leftrightarrow x = 0$ .
  2.  $\|\alpha x\| = |\alpha| \|x\|$ .
  3.  $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$ .
- О Оператор (математ.) – отображение одного множества на другое. В данной работе рассматриваются операторы в линейных нормированных пространствах.
- П Дифференциальные уравнения параболического типа – это уравнения
- $$\frac{\partial u}{\partial t} + Au = f$$

где  $u$  – неизвестная (искомая) функция,  $A$  - положительно определённый эллиптический оператор.  
 $f$  — известная функция пространственных координат и времени.

Псевдоожиженый слой – слой какого-то сыпучего продукта который находится на каком-то плотном листе с перфорацией и под этот лист подаётся воздух или любой подходящий газ, заставляющий этот продукт как бы кипеть.

- C Скорость витания капли-гранулы (частицы) – устоявшаяся скорость падения частицы, когда сила притяжения земли уравновешивается силой сопротивления воздуха. Это обычно происходит через 1-3 сек после распада струи на капли в зависимости от размера частицы (а значит их веса и лобового сопротивления).

Сеточный метод (или метод сеток) способ приближённой аппроксимации (дискретизации) членов дифференциального уравнения в попытке найти приближённое решение. Сжатых отображений (со) принцип.

Произвольное отображение  $A$  метрического пространства  $M$  в себя, которое каждой точке  $x$  из  $M$  сопоставляет некоторую точку  $y = Ax$  из  $M$ , порождает в пространстве  $M$  уравнение

$$Ax = x. \quad (*)$$

Действие отображения  $A$  на точку  $x$  можно интерпретировать как перемещение её в точку  $y = Ax$ . Точка  $x$  называется неподвижной точкой отображения  $A$ , если выполняется равенство

(\*). Т. о. вопрос о разрешимости уравнения (\*) является вопросом о нахождении неподвижных точек отображения  $A$ .

Отображение  $A$  метрического пространства  $M$  в себя называется сжимающим, если существует такое положительное число  $0 < a < 1$ , что для любых точек  $x$  и  $y$

из  $M$  выполняется неравенство

$$\rho(Ax, Ay) \leq a\rho(x, y),$$

где символ  $\rho(x, y)$  означает расстояние между точками  $x$  и  $y$  метрического пространства  $M$ .

- Функционал – отображение  $f$  произвольного множества  $X$  в множество  $R$  действительных чисел или  $C$  комплексных чисел. Если  $X$  наделено структурой векторного пространства, топологического пространства, упорядоченного множества, то возникают соответственно важные классы линейных, непрерывных, монотонных функционалов.

Фреше производная, сильная производная, наиболее распространённая (наряду с Гато производной, наз. иногда слабой производной) производная функционала или отображения. Производная Фреше в точке  $x_0$  отображения  $f : X \rightarrow Y$  нормированного пространства  $X$  в нормированное пространство  $Y$  называют линейный непрерывный оператор  $\Lambda : X \rightarrow Y$ , удовлетворяющий условию

$$f(x_0 + h) = f(x_0) + \Lambda h + \varepsilon(h),$$

где

$$\lim_{\|h\| \rightarrow 0} \|\varepsilon(h)\| / \|h\| = 0.$$

Оператор  $\Lambda$ , удовлетворяющий этим условиям, единственен и обозначается

$f'(x_0)$ . Линейное отображение

$h \rightarrow f'(x_0)h$  называется

дифференциалом Фреше.

Если отображение  $f$  имеет в точке  $x_0$  производную Фреше, то оно называется дифференцируемым по Фреше.

Для производной Фреше выполнены основные теоремы дифференциального исчисления и, прежде всего, относительно дифференцирования сложной функции.

Если есть непрерывная дифференцируемость отображения  $f$  по Фреше в некой точке  $x_0$ , то имеет место теорема об обратном отображении.

Э Эллиптический оператор имеет вид

$(\nabla, p\nabla) + q$ , где  $p, q$  — функции классов соответствующей гладкости.

## Список обозначений.

- $\alpha$  – коэффициент теплоотдачи, Вт / м<sup>2</sup> к;
- $\alpha_c$  – абсорбционный фактор;
- $\beta$  – коэффициент массоотдачи, с / м;
- $\beta_\sigma$  – средний коэффициент массоотдачи дисперсной фазы с / м;
- $\gamma$  – коэффициент ускорения при хемосорбции;
- $\Gamma$  – периметр сечения грануляционной башни, м;
- $\delta$  – средняя толщина плёнки жидкости; коэффициент термодиффузии;
- $\delta_i$  – средний диаметр частицы во фракции  $m_i$ , насчитывающей  $\Delta n_i$  штук частиц в м;
- $\varepsilon$  – критерий фазового превращения при парообразовании;
- $\varsigma$  – тепловой эквивалент механической энергии, кал / Дж;
- $\theta = \sqrt{(D_b / D_a)}$  – диффузионный комплекс;
- $\lambda$  – коэффициент теплопроводности, Вт / м.К;
- $\mu$  – динамическая вязкость, Н.с / м<sup>2</sup>;
- $\nu$  – кинематическая вязкость, м<sup>2</sup> / с ;
- $\xi$  – коэффициент сопротивления ;
- $\xi_1$  – медиана распределения;
- $\Pi$  – частный коэффициент проницаемости, зависящий от формы и доли транспортных пор; смоченный периметр;
- $\rho$  – плотность, кг / м<sup>3</sup> ;
- $\rho_{os}$  – плотность абсолютно сухого материала  $s$  – й фазы;
- $\sigma$  – поверхностное натяжение; дисперсия распределения Н / м;
- $\tau_0$  – касательное напряжение жидкости на стенке Н / м<sup>2</sup> ;

$\varphi$  – относительная влажность газовой фазы; угол между направлением

силы тяжести и направлением движения жидкой или дисперсной

фазы;

$\omega$  – пористость;

$A$  – степень извлечения;

$A_u$  – коэффициент поперечного переноса субстанции в

плёнке

жидкости,  $\text{м}^2 / \text{с}$ ;

$a$  – удельная поверхность контакта фаз; коэффициент температуропроводности; изотерма;

$A_k$  – коэффициент переноса субстанции за счёт поперечных пульсаций скорости при ламинарно-волновом режиме течения,  $\text{м}^2 / \text{с}$ ;

$a_s$  – доля превращения  $s$ -й фазы;

$b$  – эквивалентный гидравлический диаметр, м;

$C$  – концентрация влаги в растворе, парогазе,  $\text{кг} / \text{м}^3$ ;

$C_p$  – равновесная концентрация;

$c_p$  – удельная теплоёмкость материала при  $p = \text{const}$ ,  $\text{Дж} / \text{кг.К}$ ;

$D$  – коэффициент диффузии,  $\text{м}^2 / \text{с}$ ;

$D_a$ ,  $D_b$  – коэффициенты молекулярной диффузии абсорбируемого компонента и активной части хемосорбента в жидкости;  $\text{м}^2 / \text{с}$ ;

$D_h$  – коэффициент продольного перемешивания,  $\text{м}^2 / \text{с}$ ;

$D_r$  – коэффициент поперечного перемешивания,  $\text{м}^2 / \text{с}$ ;

$d$  – диаметр капли, струи и др. в зависимости от индекса, м;

$d_{32}$  – средний объёмно-поверхностный диаметр по Заутеру, м;

$d_{cp}$  – средний диаметр пор, м;

$E$  – продольная дисперсия субстанции (тепла, массы),  $\text{м}^2 / \text{с}$ ;

$F$  – площадь миделева сечения,  $\text{м}^2$  ;  
 $F_\xi$  – сила сопротивления, учитывающая трение и разность  
 давления в лобовой и кормовой частях при движении  
 тела,  $\text{Н}$ ;  
 $G$  – массовый расход охладителя или парогазовой фазы,  $\text{кг}/\text{с}$   
 $g$  – ускорение свободного падения,  $\text{м}^2/\text{с}^2$  ;  
 $g_{\varepsilon-\text{ж}}$  – удельный поток перераспределяемого компонента,  
 переходящего из фазы в фазу,  $\text{кг}/\text{м}^3\text{с}$  ;  
 $H$  – высота аппарата,  $\text{м}$  ;  
 $j_u$  – удельный продольный поток перераспределяемого  
 компонента  
 в фазе,  $\text{кг}/\text{м}^2\text{с}$  ;  
 $K_c, K_t$  – коэффициенты массо- и теплопередачи,  $\text{м}/\text{с}, \text{Вт}/$   
 $\text{м}^2\text{К}$  ;  
 $K_h$  – линейный коэффициент теплопередачи стенки  
 аппарата,  $\text{Вт}/\text{м К}$  ;  
 $\bar{l}$  – средняя длина траекторий движения ансамбля капель,  
 $\text{м}$  ;  
 $l$  – длина траектории движения капли,  $\text{м}$  ;  
 $L$  – массовый расход жидкой фазы,  $\text{кг}/\text{с}$  ;  
 $L_b$  – удельная теплота испарения влаги (парообразования),  
 $\text{Дж}/\text{кг}$  ;  
 $L_{s-1}$  – удельные теплоты фазовых превращений при переходе  
 $s-1$ - й фазы в  $s$ - тую ( $L_0$  –  
 скрытая удельная теплота кристаллизации),  $\text{Дж}/\text{кг}$  ;  
 $M$  – молекулярный вес; капельная производительность  
 диспергатора;  
 $m$  – масса вещества,  $\text{кг}$  ;  
 $m_c$  – константа фазового равновесия для системы  
 абсорбируемый компонент –  
 растворитель;  
 $M_c$  – стехиометрический комплекс ;  
 $N$  – количество струй в диспергаторе ;

$N_1$  – производительность капель в единицу времени в пересчёте на капли

диаметром  $d_{32}$  ;

$N_4$  – количество гранул в адиабатируемом ансамбле;

$N_e, N_{\infty}$  – число единиц переноса в газовой и жидкой фазах ;

$N_{oe}$  – общее число единиц переноса при хемосорбции ;

$n_c$  – стехиометрический коэффициент ;

$P_a$  – лапласовское давление, Н / м<sup>2</sup> ;

$P_v$  – деформирующее давление, обусловленное

движением тела, Н / м<sup>2</sup> ;

$P_p, P_\delta$  – парциальное давление паров влаги, равновесное к содержанию

влаги на массообменной поверхности, Н / м<sup>2</sup> ;

$p_{nz}$  – парциальное давление паров влаги в парогазовом потоке, Н / м<sup>2</sup> ;

$p$  – атмосферное давление, Н / м<sup>2</sup> ;

$\tilde{Q}_{at}$  – тепло адиабатического торможения ;

$R_y$  – универсальная газовая постоянная ;

$R$  – радиус капли, струи и пр. в зависимости от индекса ;

$R_0 = \sqrt{(r_c x_{\infty} D_r) / \beta_{\infty}}$  – кинетический комплекс для  
массообменного аппарата ;

$r$  – текущий радиус ;

$r_c$  – константа скорости химической реакции, м<sup>3</sup> / к моль.  
с ;

$S_\sigma$  – площадь поверхности полидисперсного распыла, м<sup>2</sup> ;

$S$  – площадь поверхности капли, струи, и пр, м<sup>2</sup> ;

$T$  – температура материала, К ;

- $T_s$  – температура  $s$ - того фазового превращения, К;
- $T_{bc}$  – температура вне аппарата, К ;
- $t$  – время, с ;
- $\kappa$  – индекс капли;
- $m$  – индекс турбулентной величины;
- $mol$  – индекс молекулярной величины;
- $pg$  – индекс парогазовой смеси;
- $yr$  – индекс усадочной раковины;
- $U$  – объёмный расход хладоагента,  $m^3 / c$  ;
- $u$  – средняя расходная скорость охладителя  $m / c$  ;  
переносимая  
субстанция (тепло или масса) ;
- $V$  – объём,  $m^3$  ;
- $v$  – абсолютная (относительно аппарата) скорость  
движения частиц дисперсной фазы,  $m / c$  ;
- $w$  – средняя расходная скорость движения фазы,  $m / c$  ;  
 $\sim$
- $w'$  – удельная объёмная скорость,  $m^3 / (m^2 \cdot c)$  ;
- $w_{xa}$  – скорость дисперсной фазы относительно  
охладителя,  $m / c$  ;
- $w(y)$  – осреднённая по времени и длине локальная  
скорость потока,  $m / c$  ;
- $X$  – безразмерная концентрация активной части  
хемосорбента в жидкой фазе;
- $x_s$  – радиус фазового фронта, м ;
- $Y$  – безразмерная координата – концентрация  
абсорбируемого компонента в жидкой фазе;
- $y$  – поперечная координата потока (для плёночных  
аппаратов отсчитывается по внутренней нормали  
к плёнконесущей поверхности) ;
- $y_{ma}$  – координата максимума значения  $A_u$  по оси ОY;
- $z$  – вертикальная координата, совпадающая с  
направлением силы тяжести ;
- $Z$  – безразмерная вертикальная координата ;
- $B = Hw / E$  – число Боденштейна ;

$Nu = \alpha b / \lambda$  – число Нуссельта ;  
 $Pr = \nu / a$  – число Прандтля ;  
 $Re = wb / \nu$  – число Рейнольдса ;  
 $We = w^2 b \rho / \sigma$  – число Вебера ;  
 $\Omega_{hl} = \Omega_h \times \Omega_l$ ; – разностная сетка в рассматриваемой  
области  $E_r$  ;

$\Omega_h = \{x_i, x_0 < \dots < x_{N1} = x_k, h_i = x_i - x_{i-1}\}$ ;  
 $\Omega_l = \{\tau_j, \tau_0 < \dots < \tau_{N2} = \tau_k, l_j = \tau_j - \tau_{j-1}\}$ .  
 $E_r = [0, \delta] \times [0, H]$ ;  $\delta = h * N_{11}$ ;  $H = d * N_{22}$ ;  
 $h, d$  – шаги разностной сетки по координатам  $y$  и  $z$   
соответственно ;

$v = v_{ij} = v(y_i, z_j)$  – функция, заданная на  $\Omega_{hl}$  ;  
 $v_{y,i} = (v_{i+1} - v_i) / h$  – правая разностная производная в  
точке  $y_i$  ;  
 $v_{\bar{y},i} = (v_i - v_{i-1}) / h$  – левая разностная производная в  
точке  $y_i$  ;

## ИНДЕКСЫ

а - адиабатическая величина;  
г - газ;  
ж - жидкость;  
к - капля, капля-гранула, конечное значение величины;  
м - массообменная величина; молекулярная величина;  
н - начальное значение величины;  
па – пар;  
пг – парогаз;  
п - поверхность;  
р - равновесная величина;  
с - струя;  
т - теплообменная величина; турбулентная величина;

твёрдая фаза, текущее время;  
тр – трассёрная величина;  
ц - центр ;  
s - номер фазового превращения или модификации фазы  
(s=0 соответствует жидкой фазе);  
номер итеррации;  
**x, y, z** – проекции на оси координат; частные производные;  
 $\delta$  – значение на поверхности плёнки; дельта функция Дирака;  
**1** - значение величины на входе фазы ;  
**2** - значение величины на выходе фазы;  
 $\bar{}$  - черта сверху – осреднение величины по плоскому  
профилю скоростей в потоке;  
среднеобъёмная величина;  
 $\tilde{}$  - волна сверху(тильда) – осреднение величины с учётом  
скоростей в потоке;  
 $'$  - штрих сверху – величина , относящаяся к жидкой фазе;  
 $''$  - два штриха сверху – величины, относящиеся к  
парогазовой фазе;  
 $*$  - звёздочка сверху – равновесная величина; значение  
величины в области фазового или модификационного  
перехода;

## Послесловие.

В этой книге рассмотрены приёмы решения ряда линейных и нелинейных краевых задач переноса.

При этом автор прекрасно осознаёт, что предложенные приёмы не исчерпывают всего многообразия методов высоких порядков для решения нелинейных краевых задач.

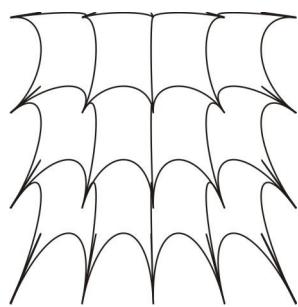
Кроме того, автор абсолютно уверен, появятся новые методы решения нелинейных краевых задач, потому что прогресс в науке невозможно остановить. Дерзайте и ищите новые, ещё более эффективные подходы !

Есть особая категория исследователей, которая утверждает, что их методы лучше. Но когда предлагаешь им сравнить результаты на одинаковых компьютерах, они отказываются.

Так, полтора десятилетия назад, автор предложил профессору института математики им. Вейцмана в г. Реховот, профессору Achi Brandt сравнить результаты расчётов по его алгоритму и нашему алгоритму решения нелинейных краевых задач, но он, к сожалению, сразу отказался, подарив мне, правда, на прощание пару оттисков своих публикаций...

Делитесь найденными новыми подходами со своими коллегами .

Ищите и дерзайте, да обрящете !



## Часть 6



## **Часть 6. CD – ROM с фрагментами программ и сайтом по системе DELPHI автора монографии.**

### **Сайт «My Delphi»**

Воспользоваться прилагаемым CD – диском не представляется сложным делом, так как он является загрузочным и сразу, по нажатии на иконку синей дискеты, показывает все папки, имеющиеся на диске.

Дальше – Ваш выбор интересующего материала – интересующей Вас папки. У каждой папки указан в качестве последних символов язык программы.

Просмотр сайта по «My Delphi» начинается с запуска файла index.htm. Дальше в меню выбирается нужная опция языка и пункта меню.

Если у Вас возникли проблемы, то пишите на указанный в начале книги (конец предисловия) e-mail : [vam20@yandex.ru](mailto:vam20@yandex.ru)

Успешного Вам освоения книги, оптимизма и, главное, продвижения вперёд !

Инструкцию по практическому использованию приведенных в книге пакетов программсмотрите на следующей странице

Инструкция по использованию пакетов  
программ для решения нелинейных задач  
теплопроводности и диффузии.  
для книги А.М. Вайнберга

Математическое моделирование процессов переноса.  
Решение нелинейных краевых задач.  
Москва-Иерусалим, 2009 г.

1. Решение подобных задач вещь отнюдь не тривиальная и необходимо запастись терпением.
2. Прежде всего, необходимо задачу обезразмерить, т. е. сами уравнения и начально-краевые условия сделать безразмерными.  
Это очень важно!
3. Необходимо внимательно изучить алгоритм решения на рисунке в приложении.  
Этот рисунок дан для наиболее сложной задачи.
4. На CD-ROM приведены процедуры решения задачи на различных языках-  
«Си» , «PASCALe» и «PL / 1». По языку Delphi приведен только запускающий модуль.
5. Наиболее полное отражение нашёл язык PL / 1.  
В этой папке приведена распечатка готовой программы и результатов расчёта в виде 4-х листов файлов в формате JPG в возрастающем порядке ( ! ).  
Названия процедур интуитивно должны быть понятны, да кроме того они снабжены комментариями.

Если есть вопросы – черкните на мыло  
( то есть пошлите на мой электронный адрес) ->  
[vam20@yandex.ru](mailto:vam20@yandex.ru)

P.S. Сайт запускается файлом index.htm