

## 제 3 장

# 문제 해결에서의 고급 기법

### 제 1 절 비선형 방정식을 푸는 반복법

#### 1.1 개념 설명

중력 및 추가적인 힘의 작용하에서 액체 및 기체 중에서 낙하하는 고체 입자의 종말 속도 계산

#### 1.2 사용된 수치 해법

비선형 방정식을 푸는 연속 치환법의 단계별 사용과 도식적 근사해와의 비교

#### 1.3 문제 설명

유체에서 낙하하는 구형 고체 입자의 종말 속도는 다음 식으로 나타낼 수 있다.

$$v_t = \sqrt{\frac{4g(\rho_p - \rho)D_p}{3C_D\rho}} \quad (3.1)$$

여기서  $v_t$ 는 종말 속도(m/s),  $g$ 는 중력 가속도(m/s<sup>2</sup>),  $\rho_p$ 는 입자의 밀도(kg/m<sup>3</sup>),  $D_p$ 는 구형 입자의 지름(m),  $C_D$ 는 무차원 항력계수이다.

항력 계수는 Reynolds 수( $Re$ )에 따라 다음과 같이 변한다 (Perry et al. [1] 참조).

$$C_D = \frac{24}{Re} \quad \text{for } Re < 0.1 \quad (3.2)$$

$$C_D = \frac{24}{Re}(1 + 0.14Re^{0.7}) \quad \text{for } 0.1 \leq Re \leq 1000 \quad (3.3)$$

여기서  $Re = v_t D_p \rho / \mu$ ,  $\rho$ 는 유체의 밀도(kg/m<sup>3</sup>),  $\mu$ 는 유체의 점도(Pa·s)이다.

식 (3.1)의 우변에 나타나는  $C_D$  항은  $Re$ 의 함수이고,  $Re$ 는  $v_t$ 의 함수이므로, 식 (3.1)은  $v_t$ 에 대하여 음함수적이다 (양변에  $v_t$ 를 포함한다). 따라서 식 (3.1)은 다음과 같이 다시 쓸 수 있다.

$$v_t = F(v_t) \quad (3.4)$$

여기서  $F(v_t) = \sqrt{\frac{4g(\rho_p - \rho)D_p}{3C_D\rho}}$ 이다.

( $\rho = 1.23\text{kg/m}^3$ ,  $\mu = 1.79 \times 10^{-5}\text{Pa}\cdot\text{s}$ )인 공기중에서 종말 속도로 낙하하는  $D_p = 0.5\text{mm}$ ,  $\rho_p = 7860\text{kg/m}^3$ 인 균일한 구형 철 입자를 고려하자.

- (a)  $0.01 \leq v_t \leq 10\text{m/s}$  범위에서  $v_t$ 에 대하여  $F(v_t)$ 와  $v_t$  도시하고 식 (3.1)의 근의 대략적인 위치를 표시하라.
- (b) 연속 치환법을 사용하여 이 식의 근을 구하라. 초기 추산값을  $v_{t,0} = 2$ , 오차 한계를  $\epsilon_d = 10^{-3}$ 으로 하라.

## 1.4 해

### 간단한 도식적 해

식 (3.4)를 푸는 아주 간단한 방법은  $v_t$ 에 대하여  $F(v_t)$ 와  $v_t$ 를 도시하는 것이다. 해는 함수  $F(v_t)$ 와  $v_t$ 가 교차하는 곳에 존재하게 된다. 이 방법은 아주 높은 정밀도로 해를 구하는 수치해법을 사용할 때 문제의 해에 대한 초기 추산값을 구하는 아주 좋은 방법이다.

(a) 제시된  $v_t$  영역에서  $v_t$ 에 대하여  $F(v_t)$ 를 도시하기 위하여,  $v_t$ 는 0.01에서 1까지 연속적으로 변해야 한다. 이러한 경우에는 MATLAB 구문 “for ... end”를 사용한다. 계산 도중에  $Re$  값은 식 (3.2)와 (3.3)에서 제시된 두 영역을 거치게 된다. 적절한  $C_D$  항을 계산하기 위하여 MATLAB 구문 “if ... else ...end”를 사용한다.

이 문제를 풀기 위한 MATLAB 스크립트들은 다음과 같이 주어진다.

p301a.m

```
clear all
rho_p=7860;
Dp=0.5e-3;
rho=1.23;
mu=1.79e-5;
```

```

g=9.80665;
vt=[];
Fvt=[];
for v=0.01:0.01:10
Re=(Dp*v*rho)/mu;
C_D=drag(Re);
Fv=sqrt(4*g*(rho_p-rho)*Dp/(3*C_D*rho));
vt=[vt;v];
Fvt=[Fvt;Fv];
end
plot(vt,vt,':',vt,Fvt)
xlabel('vt')
ylabel('Fvt')

```

drag.m

```

function C_D=drag(Re)
if(Re<0.1)
    C_D=24/Re;
else
    C_D=24/Re*(1+0.14*Re^(0.7));
end

```

그림 3.1은  $v_t$ 에 따른  $F(v_t)$ 와  $v_t$ 의 도시를 보여준다. 방정식의 근은  $v_t$ 의 직선이  $F(v_t)$  곡선과 교차하는 약 7.5m/s에 존재한다. MATLAB에서 계산된 결과를 근거로한 도표를 자세히 보면 해는 약 7.57m/s에 존재함을 알 수 있다.

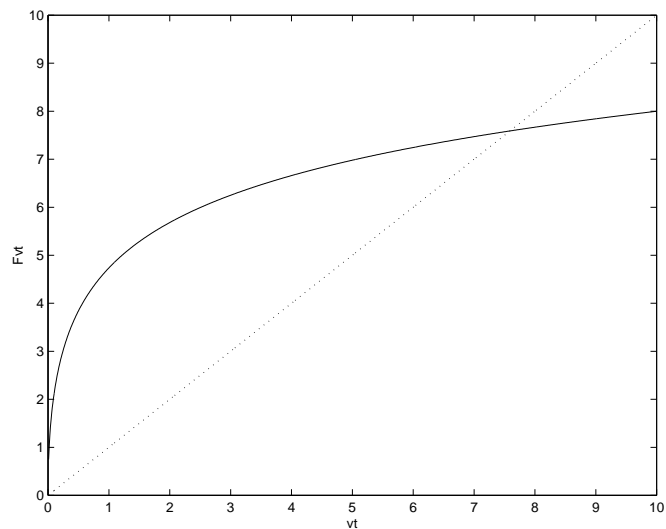


그림 3.1:  $v_t$ 에 따른  $F(v_t)$ 와  $v_t$ 의 도시

### 연속 치환법

식 (3.4)를 풀기 위한 연속 치환법은 이 문제에서는  $v_t = v_{t0}$ 로 표시되는 해에 대한 초기 추산치가 필요하게 된다. 이 추산치는 식 (3.4)의 우변에 대입되고 새로운 추산치  $v_{t1}$ 이 식 으로부터 계산된다.  $v_t$ 의 두 연속하는 값 사이에 차이가 원하는 오차 한계,  $\epsilon_d$ 이하가 될때 까지 이 과정을 반복한다. 일반화하면

$$v_{t,k} = F(v_{t,k-1}); \quad k = 1, 2, 3, \dots \quad (3.5)$$

여기서  $k$ 는 반복 단계 수이다. 해를 구하는 과정에서 오차는 두 연속하는  $v_t$ 의 차의 절대 값으로 추산된다. 따라서

$$\epsilon_{k-1} = |v_{t,k} - v_{t,k-1}| \quad (3.6)$$


이고, 반복 계산은  $\epsilon_{k-1} < \epsilon_d$ 가 되면 멈추게 된다.

(b) MATLAB의 “while ... end” 구문을 사용하여 식 (3.6)의 오차 기준과 식 (3.5)로 주어지는 반복 계산을 수행할 수 있다. 여기서 MATLAB은 연속 치환법을 보여주기 위하여 양함수적 함수를 계산하는 일만을 하게 된다. 물론, 식 (3.1)은  $f(v_t) = v_t - F(v_t)$  형태의 음함수적 방정식으로 바꾸기만 함으로써 풀릴수 있다. 이와 같은 접근법은 문제 1.1에서 제시되었다.

매 반복 단계마다 변수들  $v_t$ ,  $Re$ ,  $C_D$ 는 변하게 된다. 첨자들은 이 변수들에 가해진 반복 계산의 수를 나타낸다. 이 문제를 풀기위한 MATLAB 스크립트는 다음과 같이 주어진다.

p301b.m

```
clear all
rhop=7860;
Dp=0.5e-3;
rho=1.23;
mu=1.79e-5;
g=9.80665;
eps=[];
v=[];
```

 (a)에 대한 MATLAB 스크립트는 CHAP3 디렉토리의 p301a.m과 drag.m으로 주어진다.

```

Re=[];
C_D=[];
iter=[];
vold=2;
err=1;
it=0;
while(err>0.001)
Reold=(Dp*vold*rho)/mu;
C_Dold=drag(Reold);
vnew=sqrt(4*g*(rho_p-rho)*Dp/(3*C_Dold*rho));
err=abs(vnew-vold);
iter=[iter;it];
v=[v;vold];
Re=[Re;Reold]
C_D=[C_D;C_Dold];
eps=[eps;err];
vold=vnew;
it=it+1;
end
disp('    iter #      v      Re      C_D      epslon');
disp([iter,v,Re,C_D,eps]);

```

표 3.1에는 얻어진 결과들이 요약되어 있다. 결과들은 6번의 반복 계산 후에 추산된 오차는 원하는 오차 한계  $10^{-3}$ 보다 작게 되고 종말 속도는 7.5892m/s임을 보여준다.

표 3.1: 자유 낙하 속도에 대한 연속 치환 반복해

반복 단계수	$v_t$	$Re$	$C_D$	$\epsilon$
0	2.0000	68.7151	1.2938	3.6820
1	5.6820	195.2205	0.8135	1.4839
2	7.1659	246.2021	0.7416	0.3393
3	7.5052	257.8594	0.7283	0.0681
4	7.5733	260.2005	0.7257	0.0133
5	7.5866	260.6585	0.7252	0.0026
6	7.5892	260.7477	0.7251	0.0005

 (b)에 대한 MATLAB 스크립트는 CHAP3 디렉토리의 p301b.m으로 주어진다.

## 제 2 절 Stiff 상미분 방정식의 해

### 2.1 개념 설명

회분 공정에서 반응물의 농도가 아주 낮을때 반응 속도는 아주 크게 되는 화학적 또는 생물학적 반응의 모사

### 2.2 사용된 수치 해법

적분 과정에서 stiff하게 되는 연립 상미분 방정식의 해

### 문제 설명

생물학적 공정에 Garritsen [2]이 연구한 것과 같은 기질로부터 바이오매스의 성장이 포함된다. 이 회분 공정에 대한 물질 수지는 다음과 같이 된다.

$$\frac{dB}{dt} = \frac{kBS}{(K+S)} \quad (3.7)$$

$$\frac{dS}{dt} = -\frac{0.75kBS}{(K+S)} \quad (3.8)$$

여기서  $B$ 와  $S$ 는 각각 바이오매스와 기질의 농도이다. 반응 동역학  $k = 0.3$ 과  $K = 10^{-6}$ 이고, 단위는 일치한다.

- (a)  $0.01 \leq v_t \leq 10\text{m/s}$  범위에서  $v_t$ 에 대하여  $F(v_t)$ 와  $v_t$  도식하고 식 (3.1)의 근의 대략적인 위치를 표시하라.
- (b) 연속 치환법을 사용하여 이 식의 근을 구하라. 초기 추산값을  $v_{t,0} = 2$ , 오차 한계를  $\epsilon_d = 10^{-3}$ 으로 하라.

### 2.3 해

위의 연립 방정식은 MATLAB 함수 m-file으로 구현할 수 있다. 만약 방정식들이 올바르게 구현되었다면,  $t_f = 16.34$  정도까지는 문제없이 적분이 진행된다. 하지만  $t_f$ 가 이 이상되는 경우에는 기질의 농도( $S$ )가 음이되는 물리적으로 타당하지 못한 결과를 준다. 이런 결과를 주는 이유는 적분의 오차 한계가 별다른 “option”을 주지 않으면 상대오차는  $10^{-3}$ , 절대오차는  $10^{-6}$ 으로 고정되기 때문이다. 따라서 이 기본값(default value)들을 변화시켜 가면서(줄여 가면서) 물리적으로 타당한 결과가 나올때 까지 적분을 진행한다. 하

지만 MATLAB이 제공하는 “non-stiff” 적분 기법인 ode45으로는 이 문제에 대해서 물리적으로 타당한 해를 구하기 어렵거나 시간이 아주 오래 걸린다. 이러한 경우에는 “stiff” 적분 기법인 ode15s를 사용해 보는 것을 추천한다. 만약 “stiff” 알고리즘을 사용하면 기질의 농도가 음이 되는 물리적으로 타당하지 못한 결과가 사라진다. 이러한 결과는 이 연립 방정식이  $t = 16.34$  근처에서 stiff하다는 것을 의미한다. Stiff 계 및 이를 푸는데 사용되는 방법에 대한 자세한 논의는 이 책의 범위를 벗어난다. 하지만 대부분의 수치해석 교과서 (예를 들면 Press et al. [3])에는 이에 대해 자세히 기술되어 있다.

특정 계가 stiff 한지 여부를 수학적으로 결정하기 위해서는 미분 방정식들을 각 종속 변수들에 대하여 편미분한 행렬이 계산되어야 한다. 이 행렬의 고유치들 중에 음이고 절댓값이 아주 큰 고유치가 있는 경우에는 계는 stiff하다고 여겨진다.

이 문제에 대하여, 편도함수들의 행렬은 식 (3.7)과 (3.8)을 간략화된 표기법과 알려진 속도 상수들을 대입하여 다음과 같이 다시 써서 계산될 수 있다.

$$f_1 = \frac{dB}{dt} = \frac{0.3BS}{10^{-6} + S} \quad (3.9)$$

$$f_2 = \frac{dS}{dt} = -\frac{0.225BS}{10^{-6} + S} \quad (3.10)$$

이 방정식들을  $B$ 와  $S$ 에 대하여 미분하면 다음과 같이 된다.

$$\frac{\partial f_1}{\partial B} = \frac{0.3S}{(10^{-6} + S)} \quad \frac{\partial f_1}{\partial S} = \frac{0.3 \times 10^{-6} B}{(10^{-6} + S)^2} \quad (3.11)$$

$$\frac{\partial f_2}{\partial B} = \frac{-0.225S}{(10^{-6} + S)} \quad \frac{\partial f_2}{\partial S} = \frac{-0.225 \times 10^{-6} B}{(10^{-6} + S)^2} \quad (3.12)$$

앞의 편도함수들 중에서 둘은  $S$ 가 작게 되지않는 한 음의 작은 값을 갖는다. 그러나,  $S$ 가 작은 값을 갖게되면, 도함수  $\partial f_2/\partial S$ 는 음이되고, 아주 큰 절댓값을 갖게된다(만약  $S = 10^{-6}$ 이면 도함수의 크기위수는  $10^6$ 이 된다). 이 점에서 계는 stiff하게 되고, MATLAB의 “non-stiff” 적분 알고리즘과 대부분의 일반적인 package들은 이 문제를 풀 수 없게 된다.

보통은 추가적인 stiff 알고리즘이 제공된다. MATLAB에는 stiff 문제를 풀기위한 “ode15s”가 있다. 이 바이오매스 문제에 위에서 언급된 option을 사용하여 계산된 바이오매스와 기질의 농도 결과가 그림 3.2에 주어져 있다. 그림에서 보듯이  $t \sim 16.3$  근처에서 기질의

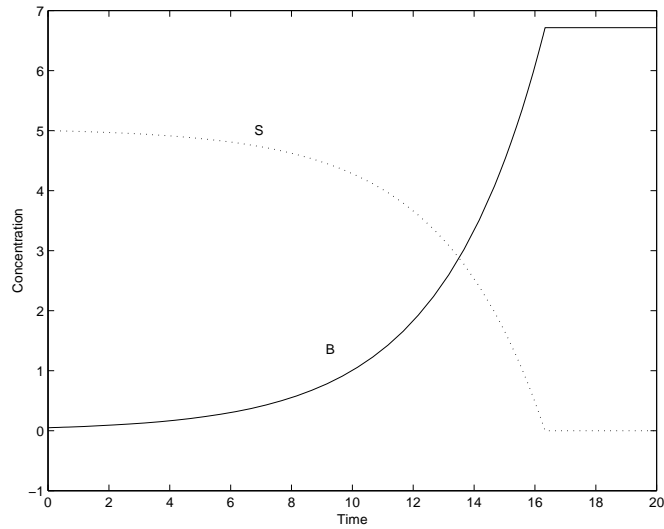


그림 3.2: 기질과 바이오매스의 농도의 변화

양은 거의 0이되고 바이오매스의 성장은 거의 일어나지 않게 된다. 따라서 이 예와 같은 문제에 대해서는 원하는 결과를 얻기 위해서는 stiff 적분 알고리즘이 필요하게 된다.

일반적으로 기본 non-stiff 적분 알고리즘이 이상한 error message를 내면서 문제를 풀지 못하거나, 해로 아주 늦게 수렴하는 경우에는 stiff 알고리즘을 사용할 것을 추천한다. 만약 기본 알고리즘과 stiff 알고리즘이 상미분 방정식을 풀지 못할 경우에는 아마도 모델 방정식, 상수값 또는 초기치에 실수가 있을 것이다.



## 제 3 절 화학 반응 속도론에서의 stiff 상미분 방정식의 해

### 3.1 개념 설명

비정상상태 회분 공정에 대한 반응 속도론의 해와 반응 속도식 모델의 타당성 조사.

### 3.2 사용된 수치 해법

연립 stiff 상미분 방정식의 해.

### 3.3 문제 설명

잘 알려진 stiff 상미분 방정식 해법을 개발한 Gear [4]는 stiff 상미분 방정식을 푸는 software를 시험하기 위하여 (“Chemistry Problem”이라고 명명한) 다음과 같은 문제를 제시하였다.

$$\begin{aligned}\frac{dy_1}{dt} &= -0.013y_1 - 1000y_1y_3 \\ \frac{dy_2}{dt} &= -2500y_2y_3 \\ \frac{dy_3}{dt} &= -0.013y_1 - 1000y_1y_3 - 2500y_2y_3\end{aligned}\tag{3.13}$$

초기조건들은  $y_1(0) = 1$ ,  $y_2(0) = 1$ ,  $y_3(0) = 0$ 이다. 이 방정식들이  $t_0 = 0$ 에서  $t_f = 50$ 까지 적분되어 진다.

이 예제는 자주 사용되고, 많은 문헌들에서 인용된다(예들들면 Press et al. [3]의 p. 734참조).

- (a) 주어진 초기조건을 사용하여 식 (3.13)으로 주어지는 방정식을 풀어라.
- (b)  $y_1$ ,  $y_2$ ,  $y_3$ 를 서로 다른 화학종들의 농도라고 한다면, 구해진 해가 타당하고 의미있다고 할 수 있는가?
- (c) 만약 식 (3.13)으로 정의된 계가 반응 속도식을 나타낸다고 한다면, 어떤 식자상의 오류가 실행 불가능한 결과를 줄 수 있는가? 이 식들에 의하여 나타낼 수 있는 반응 순서를 제안하고, 식자상이 오류를 수정하고 수정된 식을 다시 풀어라.

## 제 4 절 연립 상미분 방정식에서의 다중 정상상태

### 4.1 개념 설명

다중 정상상태 해를 줄 수 있는 유동층 반응기에 대한 비정상상태 모델에 대한 동적 물질 수지 및 에너지 수지.

### 4.2 사용된 수치 해법

비선형 연립 방정식의 해, 연립 stiff 상미분 방정식의 해, 량 조건 연립 대수 방정식 및 연립 상미분 방정식에서 반올림 오차의 효과.

### 4.3 문제 설명

Luss와 Amunson [5]은 비가역 기상 반응  $A \rightarrow B$ 가 일어난다고 가정되는 유동층 촉매 반응기의 동역학에 대한 간략화된 모델을 연구하였다. 이 계에 대한 물질 및 에너지 보존 방정식이 반응속도론적 속도 상수와 함께 식 (3.14)로 주어진다. 이 식을 Set I이라 하자.

$$\begin{aligned}
 \frac{dP}{d\tau} &= P_e - P + H_g(P_p - P) \\
 \frac{dT}{d\tau} &= T_e - T + H_T(T_p - T) + H_w(T_w - T) \\
 \frac{dP_p}{d\tau} &= \frac{H_g}{A}[P - P_p(1 + K)] \\
 \frac{dT_p}{d\tau} &= \frac{H_T}{C}[(T - T_p) + FKP_p] \\
 K &= 0.0006 \exp(20.7 - 15000/T_p)
 \end{aligned} \tag{3.14}$$

여기서  $T$  = 유체 내의 반응 물질의 절대 온도(R),  $P$  = 유체 내의 반응 물질의 압력(atm),  $T_p$  = 촉매 표면에서의 반응물의 온도(R),  $P_p$  = 촉매 표면에서의 반응물질의 분압(atm),  $K$  = 무차원 반응속도 상수,  $\tau$  = 무차원 시간, 하첨자  $e$ 는 입구 조건을 나타낸다. 무차원 상수들은  $H_g = 320$ ,  $T_e = 600$ ,  $H_T = 266.67$ ,  $H_w = 1.6$ ,  $T_w = 720$ ,  $F = 8000$ ,  $A = 0.17142$ ,  $C = 205.74$ ,  $P_e = 0.1$ 이다.

Aiken과 Lapidus [6]는 이어서 Set I을 그들이 개발한 프로그램에 대한 예로 사용하였다. 하지만, 그들은 수치값을 식에 대입하고 몇몇 계수를 반올림하여 방정식을 새로 작성

하였다. 결과가 다음의 식 (3.15)로 주어진다. 이 방정식들을 Set II라 하자.

$$\begin{aligned}
 \frac{dP}{d\tau} &= 0.1 + 320P_p - 321P \\
 \frac{dT}{d\tau} &= 1752 - 269T + 267T_p \\
 \frac{dP_p}{d\tau} &= 1.88 \times 10^3 [P - P_p(1 + K)] \\
 \frac{dT_p}{d\tau} &= 1.3(T - T_p) + 1.04 \times 10^4 K P_p \\
 K &= 0.0006 \exp(20.7 - 15000/T_p)
 \end{aligned} \tag{3.15}$$

- (a) Luss와 Amunson이 제공하는 값들을 Set I에 대입하고 Set I과 Set II 사이의 차이점을 찾아보라.
- (b)  $500R \leq T \leq 1300R$  범위에서 Set I과 Set II에 대한 정상상태 해를 모두 구하라.
- (c)  $\tau = 0$ 에서  $P = 0.1$ ,  $T = 600$ ,  $P_p = 0$ ,  $T_p = 761$ 을 초기조건으로 사용하여 Set I과 Set II를 풀어라. 최종값은  $\tau = 1500$ 이 될 것이다.
- (d) 원래의 Set I과 수정된 Set II를 사용하는 과정에서 얻어지는 정상상태 해와 동적 해에서의 차이를 설명하라.

#### 4.4 (부분) 해

(a) 정상상태 해는 Set I과 Set II에 있는 네개의 미분 방정식에서 시간에 대한 도함수를 0으로 두면 쉽게 결정된다. 각 방정식 묶음은 0으로 되어야할 단일 음함수적 비선형 방정식과 양함수적 표현으로부터 계산될 수 있는 나머지 변수들로 재수식화 될 수 있다. 상수들의 수치값들을 Set I에 대입하고 재수식화하면 다음과 같이 된다.

$$\begin{aligned}
 f(T) &= 1.296(T - T_p) + 10369K P_p \\
 T_p &= (269.267T - 1752)/266.667 \\
 P_p &= 0.1/(1 + 321K) \\
 P &= (320P_p + 0.1)/321 \\
 K &= 0.0006 \exp(20.7 - 15000/T_p)
 \end{aligned} \tag{3.16}$$

비선형 연립 방정식을 단일 음함수적 방정식으로 변환하는 것이 특정 구간에서 어떤 계에 대한 모든 해를 구하는 가장 간단한 방법이다.

## 제 5 절 일변수 최적화

### 5.1 개념 설명

평판의 한쪽 면에서는 주위로의 복사가 일어나고 있고 평판 내부의 열전도도가 변하는 경우에 1차원 평판에서의 열전달.

### 5.2 사용된 수치 해법

계를 기술하는 변수 하나는 할선법(secant method)이나 false position 법으로 최적화 되어야 하는 상미분 방정식의 수치해.

### 5.3 문제 설명

그림 3.3에 보이는 것과 같은 1차원 평판에서 열전도가 일어나고 있다. 평판 내부의 열전도도는 변한다. 평판의 한쪽 면은  $T_0$ 로 유지되고, 다른쪽 면에서는 온도  $T_S$ 에서  $T_B$ 인 흑체로 거동하는 주위로 복사 열전달이 일어난다. 평판의 두께는  $L$ 로 주어진다. 평판과 주위 사이에는 진공이므로 대류는 무시된다. 여러 열전달 기구에 대한 자세한 사항은 Geankoplis [7]와 Thomas [8]를 참고하라. 또한 6장에도 주요 방정식, 경계 조건 및 대표적인 단위들에 대한 설명이 주어져 있다.

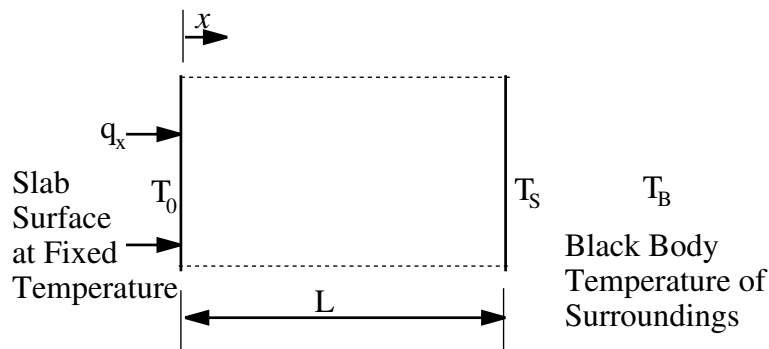


그림 3.3: 전도 및 표면에서 복사가 일어나는 평판

평판 내부의 미분 요소에 대한 정상 상태 에너지 수지는 평판 내부에 열원이 없기 때문에 열속은 일정하다는 사실을 알려준다. 따라서  $x$  방향에 대하여 Fourier 법칙을 적용하면 다

음과 같은 결과를 얻는다.

$$\frac{dT}{dx} = -\left(\frac{q_x}{A}\right)/k \quad (3.17)$$

여기서  $T$ 는 K 단위로 주어지고,  $q_x$ 는  $x$  방향에서의 열전달 속도(W 또는 J/s),  $A$ 는 열전도 방향과 수직인 단면적( $m^2$ ),  $k$ 는 매질의 열전도도 ( $W/m \cdot K$ ),  $x$ 는 거리(m)이다.

이 문제에 대하여 매질의 열 전도도는 온도의 함수로 다음과 같이 주어진다.

$$k = 30(1 + 0.002T) \quad (3.18)$$

평판 표면으로부터의 복사는 복사능이 1이고 관측인자가 1인 흑체에 대하여 Stefan-Boltzman 법칙으로 주어진다. 평판 표면(또는 평판 내의 임의의 위치)에서의 열속은 다음과 같다.

$$\frac{q_x}{A}\Big|_{x=L} = \sigma(T_S^4 - T_B^4)\Big|_{x=L} \quad (3.19)$$

여기서  $\sigma = 5.676 \times 10^{-8} W/m^2 \cdot K^4$ 는 Stefan-Boltzman 상수이다.

평판의 표면은  $T_0 = 290K$ 로 유지되고, 주위의 흑체 온도는  $T_B = 1273K$ 이다.  $L = 0.2m$ 이다.

(a) 평판 내에서 일정한 열속을 최적화하기 위하여 할선법을 사용하여 평판 내의 온도 분포를 계산하고 도시하라.

(b) False positon 법을 사용하여 (a)를 다시 풀라.

#### 5.4 해

이 문제에서는 식 (3.17)로 주어지는 상미분 방정식의 해가 필요하다. 상미분 방정식의 해를 구하는 과정에서 열전도도는 식 (3.18)에 의하여 계산된다.  $T$ 에 대한 초기조건은 이미 주어진  $T_0$ 이다. 최종조건은 식 (3.19)에 의하여 주어진다.

이 문제는 최종조건이 만족되도록 열속  $q_x/A$ 의 값을 최적화하면서 풀릴 것이다. 이 경우에 최종조건에서의 오차로 주어지는 목적함수는 다음과 같이 나타내어 진다.

$$\epsilon(q_x/A) = \epsilon(Q_x) = [Q_x - \sigma(T^4 - T_B^4)]\Big|_{x=L} \quad (3.20)$$

여기서 열속은  $Q_x$ 로 나타내었고,  $T$ 는 수치 적분을 통하여 얻어지는  $x = L$ 에서 최종 값이다. 식 (3.20)은 정확한 열속 값이 결정되면 0이 되어야 한다.

서로 다른 많은 방법들이 이 1변수 최적화를 수행하는데 사용될 수 있다.

(a) **할선법** 할선법(Himmelblau [10] 또는 Hanna and Sandall [11] 참조)은 다음과 같은 Newton 공식에서

$$Q_{x,new} = Q_x - \epsilon(Q_x)/\epsilon'(Q_x) \quad (3.21)$$

도함수를 다음과 같이 근사하여 적용한다.

$$\epsilon'(Q_x) \cong \frac{\epsilon(Q_x + \delta Q_x) - \epsilon(Q_x)}{\delta Q_x} \quad (3.22)$$

여기서  $\delta$ 는 현재의  $Q_x$  값에 미소 증분을 주기위하여 0.0001로 둔다.  $Q_{x,new}$ 를 결정하는데 필요한 식들은  $\epsilon(Q_x)$ 를 계산하기 위한 상미분 방정식의 수치해, 식 (3.22)에서 계산되는  $\epsilon'(Q_x)$ 에 대한 근사, 각 반복 계산의 마지막에서 식 (3.21)로 주어지는  $Q_{x,new}$ 에 대한 새로운 추산으로 동시에 계산된다.

임의의 초기 추산값  $Q_x = -100000$ 으로 하는 할선법을 사용하여 반복 계산을 수행하는 MATLAB 스크립트는 다음과 같이 주어진다.

p305a.m

```
clear all
global Qx
sigma=5.676e-8;
x0=0;
xf=0.2;
T0=290;
TB=1273;
delta=0.0001;
Qx0=-100000;
err=1;
derr=1;
while(abs(err/derr)>1e-3)
    Qx=Qx0;
    [x,T]=ode45('p305af',[x0 xf],T0);
    n=length(T);
    err=Qx-sigma*(T(n)^4-TB^4);
    Qx=Qx0*(1+delta);
    [x,T]=ode45('p305af',[x0 xf],T0);
    n=length(T);
    err1=Qx-sigma*(T(n)^4-TB^4);
    derr=(err1-err)/(delta*Qx0);
    Qx0=Qx0-err/derr;
```

```

end
plot(x,T)
xlabel('Position from Cooled Slab Surfaces [m]')
ylabel('Temperature [k]')

```

p305af.m

```

function dTdx=p305af(x,T)
global Qx
k=30*(1+0.002*T);
dTdx=-Qx/k;
return

```

첫번째 반복 계산을 수행한 결과는  $Q_{xNew}$  값은  $J/m^2 \cdot s$  단위로 -133,944이다. 여기서 음의 부호는 열속은 음의  $x$  방향임을 나타낸다. 두번째 반복 계산의 결과는  $Q_{xNew}$  값이 -133,014이고 세번째 반복 계산의 결과는  $Q_{xNew}$  값이 -133,013이다. 이는 거의 수렴된 결과를 얻었다는 것을 나타낸다.  $T$ 의 최종값  $T_s$ 는 729.17K가 된다. MATLAB 해로부터 계산된 온도 분포는 그림 3.4에 주어져 있다. 이 그림에서 비선형 분포는 열전도도의 온도의존성 때문에 생긴 결과이다.

이 문제에 대해서는 할선법은 아주 빠르게 수렴한다. 하지만 초기 추정치는 상당히 정확해야만 한다. 이 방법의 주된 단점은 해를 구하는 과정에서 도함수 표현에 대한 식을 계산하여야 한다는 것이다. 열속  $Q_x$ 에 대한 초기 추정치를 얻기위하여 약간의 예비 해 또는 간략화된 계산이 필요하다.

**(b)Flase position 법** 일변수 최적화를 위한 이 방법은 최소화하려는 함수의 함수값이 서로 반대 부호를 갖는 구간을 결정하는 두 점을 구하는 예비 해로 시작한다 (자세한 사항은 Himmelblau [10] 또는 Carnahan et al. [12]을 참조하라). 이 문제에 대하여 음의 함수 값은  $FQ_{xN} = \epsilon(Q_{xN})$ 으로, 양의 함수 값은  $FQ_{xP} = \epsilon(Q_{xP})$ 로 두자, 여기서  $Q_{xN}$ 과  $Q_{xP}$ 는 각각 음의 값과 양의 값을 준다.

새로운 계산 단계를 위한 새로운 추산 값은 다음과 같이 주어지고,

$$Q_{x,new} = Q_{xN} - \frac{(Q_{xN} - Q_{xP})(FQ_{xN})}{(FQ_{xN} - FQ_{xP})} \quad (3.23)$$

결정되어야할 함수 값은  $FQ_{xNEQ}$ 이다. 새로운 변수 값은  $FQ_{xNEW}$ 의 부호에 따라  $Q_{xN}$ 이나  $Q_{xP}$ 를 대체하고, 함수 값은  $FQ_{xN}$ 이나  $FQ_{xP}$ 를 대체한다.

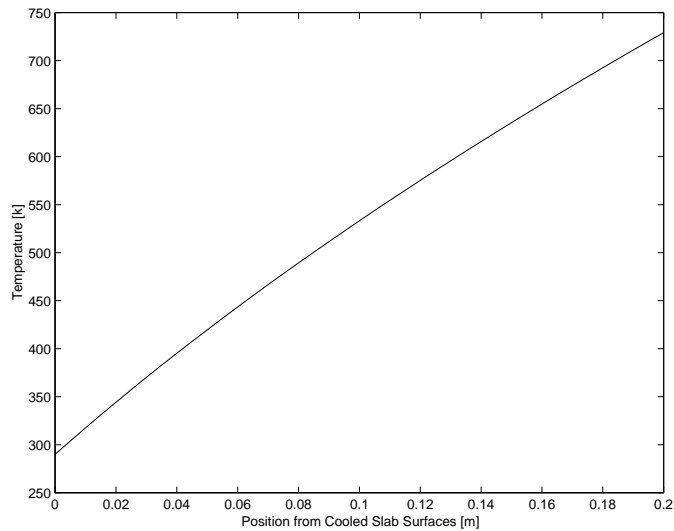



그림 3.4: 평판에서의 온도 분포

 (a)에 대한 MATLAB 스크립트는 CHAP3 디렉토리의 p305a.m과 p305af.m으로 주어진다.

초기 예비 계산에 의하여  $Q_x = -100000$ 는  $\epsilon(Q_{xP}) = 39,764$ 를 주고,  $Q_x = -150000$ 는  $\epsilon(Q_{xN}) = -21,355$ 를 줌을 알 수 있다. 이 값들이 해 구간을 형성하고 식 (3.23)을 이용하여 반복 계산을 하는 시작점으로 쓰여진다. False position 법으로 이 문제를 푸는 MATLAB 스크립트는 다음과 같이 주어진다.

p305b.m

```
clear all
global Qx
sigma=5.676e-8;
x0=0;
xf=0.2;
T0=290;
TB=1273;
QxP=-100000;
QxN=-150000;
FQxNew=1;
while(FQxNew>1e-3)
    Qx=QxP;
    [x,T]=ode45('p305af',[x0 xf],T0);
    n=length(T);
    FQxP=Qx-sigma*(T(n)^4-TB^4);
    Qx=QxN;
```



```


[x,T]=ode45('p305af',[x0 xf],T0);
n=length(T);
FQxN=Qx-sigma*(T(n)^4-TB^4);
QxNew=QxN-(QxN-QxP)*(FQxN)/(FQxN-FQxP);
Qx=QxNew;
[x,T]=ode45('p305af',[x0 xf],T0);
n=length(T);
FQxNew=Qx-sigma*(T(n)^4-TB^4);
if(FQxP*FQxNew>0)
    QxP=QxNew;
else
    QxN=QxNew;
end
end
plot(x,T)
xlabel('Position from Cooled Slab Surfaces [m]')
ylabel('Temperature [k]')

```

첫 세번의 반복 계산 결과가 표 3.2에 요약되어 있다. 수렴된 세번째 반복 계산 결과는 (a)의 결과와 일치하며 온도 분포는 동일하다. 이 방법은 계산과정에서 도함수가 필요하지 않고 따라서 MATLAB 스크립트가 복잡한 문제에 대해서도 좀 더 간단하다는 장점이 있다. 이 방법은 초기 시작점이 해에 가깝지 않고 함수가 아주 비선형인 경우에는 수렴하지 않을 수도 있다.

표 3.2: False position 법 의한 반복 계산

반복 횟수	QxP	FQxP	QxN	FQxN	QxNew	FQxNew	T <sub>s</sub>
1	-100000	39764	-150000	-21355	-132530	597.849	727.86
2	-132530	597.849	-150000	-21355	-133006	8.7448	729.15
3	-133006	8.7448	-150000	-21355	-133013	-0.1614	729.17

 (b)에 대한 MATLAB 스크립트는 CHAP3 디렉토리의 p305b.m과 p305af.m으로 주어진다.

## 제 6 절 두점 경계치 문제를 풀기위한 사격법

### 6.1 개념 설명

이동 현상과 반응 동역학에서 사용되는 2계 상미분 방정식의 두 점 경계치 문제의 해법.

### 6.2 사용된 수치 해법

2계 상미분 방정식을 두개의 1계 연립 상미분 방정식으로의 전환, 상미분 방정식을 풀기 위한 사격법, 두 점 경계치 문제를 풀기위한 할선법의 사용.

### 6.3 문제 설명

반응물 A와 생성물 B만을 포함하는 단일 상에서 확산 및 이와 동시에 일어나는 1차 비가역 반응은 다음과 같은 2계 상미분 방정식으로 기술된다.

$$\frac{d^2 C_A}{dz^2} = \frac{k}{D_{AB}} C_A \quad (3.24)$$

여기서  $C_A$ 는 반응물 A의 농도(kg-mol/m<sup>3</sup>)이고,  $z$ 는 거리 변수(m),  $k$ 는 균질 반응 속도상수(s<sup>-1</sup>),  $D_{AB}$ 는 이성분 확산계수(m<sup>2</sup>/s)이다. 식 (3.24)를 위한 대표적인 기하학적 형태는 한쪽 표면은 기지의 농도에 노출되어 있고, 밀면을 가로질러서는 확산이 일어나지 않는 1차원 유체 층이다. 따라서 경계 조건들은 다음과 같다.

$$C_A = C_{A0} \quad \text{for } z = 0 \quad (3.25)$$

$$\frac{dC_A}{dz} = 0 \quad \text{for } z = L \quad (3.26)$$

여기서  $C_{A0}$ 는 표면( $z = 0$ )에서의 일정한 농도이고, 밀면 ( $z = L$ )을 통해서는 전달이 일어나지 않으므로 도함수가 0이 된다.

위의 미분 방정식의 해석 해는 다음과 같이 주어진다.

$$C_A = C_{A0} \frac{\cosh[L\sqrt{(k/D_{AB})}(1 - z/L)]}{\cosh(L\sqrt{k/D_{AB}})} \quad (3.27)$$

- (a)  $C_{A0} = 0.2\text{kg-mol/m}^3$ ,  $k = 10^{-3}\text{s}^{-1}$ ,  $D_{AB} = 1.2 \times 10^{-9}\text{m}^2/\text{s}$ 인 경우에 식 (3.25)와 (3.26)으로 주어지는 경계조건 하에서 식 (3.24)를 수치적으로 풀어라. 해를 구하는 과정에서 식 (3.26)으로 주어지는 경계조건에 수렴시키기 위하여 할선법을 사용하고, 사격법을 사용하는 상미분 방정식 해법을 사용해야 한다.
- (b) (a)에서 구해진 전 영역에 걸친 농도 분포를 식 (3.27)로 주어지는 해석 해와 비교하라.
- (c) 식 (3.24)의  $C_A$  항이 제곱이되는 2차 반응의 경우에 수치 해를 구하라. 2차 반응 속도 상수는  $k = 0.02\text{m}^3/(\text{kg-mol}\cdot\text{s})$  이다.

## 6.4 (부분) 해

### 고계 미분 방정식의 해

대부분의 수학적 소프트웨어들은 연립된 1계 미분 방정식 만을 풀 수 있다. 다행스럽게도,  $n$ 계 상미방의 해는 경계조건과 함께 주어지는 일련의 연속되는 1계 상미분 방정식으로 나타내어서 구할 수 있다. 이와 같은 접근법이 고계 상미방의 적분에 사용되는 대표적인 방법이다.

(a) 식 (3.24)는 2계 상미방이다. 하지만 고계 도함수에 새로운 변수를 대입하면 연립 1계 미분 방정식으로 변환될 수 있다. 이 문제의 경우에,  $z$ 에 대한  $C_A$ 의 1계 도함수를 새로운 변수  $y$ 로 정의하자. 그러면 식 (3.24)는 다음과 같이 쓰여질 수 있다.

$$\begin{aligned} \frac{dC_A}{dz} &= y \\ \frac{dy}{dz} &= \frac{k}{D_{AB}} C_A \end{aligned} \quad (3.28)$$

이 1계 미분 방정식 묶음은 MATLAB 상미분 방정식 해법으로 풀릴 수 있다. 하지만  $C_A$ 와  $y$ 에 대한 초기 조건이 필요하다.  $y$ 에 대한 초기조건이 주어지지 않기 때문에, 식 (3.26)으로 주어지는 경계조건을 만족하는  $y$ 에 대한 정확한 초기값을 찾아내기 위하여 (사격법으로 알려져 있는) 반복법이 사용될 수 있다.

### 사격법-시행 오차법

사격법은 초기치 문제의 해를 반복하여 구함으로써 경계치 문제를 푸는 방법이다. 알려진 초기치는 사용되고, 알려지지 않은 초기치는 해당하는 경계 조건을 맞추기 위하여 최적화 된다. 경계조건에 수렴시키기 위하여 시행-오차법이나 다양한 최적화 기법이 사용되어야 한다.

이 문제에 대하여, 우선  $y$ 의 초기 조건에 대한 시행-오차값 (예를 들면,  $y_0 = -150$ )이 적분을 하고,  $\epsilon$ 으로 나타내어지는 경계조건에 대한 오차를 계산하는데 사용된다. 따라서,  $z = L$ 에서  $y$ 의 계산된 값과 원하는 최종 값사이의 차이는 다음과 같이 주어진다.

$$\epsilon(y_0) = y_{f,calc} - y_{f,desired} \quad (3.29)$$

이 예제에서 원하는 경계조건이 0이기 때문에  $y_{f,desired} = 0$ 이고 따라서  $\epsilon(y_0) = y_{f,calc}$ 이다.

초기 시행-오차 해를 위한 MATLAB 스크립트들은 다음과 같이 주어진다.

#### p306a1.m

```
clear all
global DAB k
DAB=1.2e-9;
k=0.001;
z0=0;
zf=0.001;
CA0=0.2;
dCA0=input('Input! the guessed value of dCA0/dz')
[z,C]=ode45('p306af',[z0 zf],[CA0 dCA0]);
n=length(z);
err=C(n,2)
```

#### p306af.m

```
function dCdz=p306af(z,C)
global DAB k
dCdz=zeros(2,1);
y=C(2);
dCdz(1)=y;
dCdz(2)=k/DAB*C(1);
return
```

MATLAB을 사용한 계산에서 식 (3.29)에 해당하는 오차의 계산은 상미방 해의 마지막 점에서만 유효하다. 시행-오차법에서는  $y$ 에 대한 서로 다른 초기 조건을 사용하여 이 MATLAB 스크립트들을 반복하여 수행시켜  $\epsilon(y_0)$  또는  $err = 0$ 인  $y_0$ 에 대한 원하는 경계 조건에 수렴시킨다.  $y_0$ 의 다양한 값에 대한 몇몇 결과들이 표 3.3에 요약되어 있다.  $y_0$ 에 대한 원하는 초기값은 -130과 -140 사이에 존재한다. 이 시행-오차법은  $y_0$ 에 대한 좀 더 정확한 값을 얻거나, 최적화 기법이 적용될 수 있을때 까지 계속된다.



(a)에 대한 MATLAB 스크립트는 CHAP3 디렉토리의 p306a1.m과 p306af.m으로 주어진다.

표 3.3: (a)번 문제에서 식 (3.28)에 대한 경계조건의 연습값

$y_0(z=0)$	-120	-130	-140	-150
$y_{f,calc}(z=L)$	17.23	2.764	-11.70	-26.16
$\epsilon(y_0)$	17.23	2.764	-11.70	-26.16

### 경계조건 수렴을 위한 할선법

적절한 초기조건을 최적화하기위한 아주 유용한 방법은 이 문제를 함수의 근을 찾는 문제로 고려하는 것이다. 이 문제의 표기법에서 변수는  $y_0$ 이고 함수는  $\epsilon(y_0)$ 이다. 일변수를 최적화하는데 아주 유용한 방법인 할선법은 문제 3.5에 기술되어 있고, 이 문제에 적용할 것이다.

이 방법에 따르면,  $y_0$ 에 대한 개선된 추산값은 다음의 식을 사용하여 계산된다.

$$y_{0,new} = y_0 - \epsilon(y_0)/\epsilon'(y_0) \quad (3.30)$$

여기서  $\epsilon'(y_0)$ 는  $y = y_0$ 에서  $\epsilon$ 의 도함수이다. 도함수  $\epsilon'(y_0)$ 는 유한 차분 근사를 사용하여 다음과 같이 추산된다.

$$\epsilon'(y_0) = \frac{\epsilon(y_0 + \delta y_0) - \epsilon(y_0)}{\delta y_0} \quad (3.31)$$

여기서  $\delta y_0$ 는  $y_0$  값의 미소 증분이다. 연속되는 계산을 통하여 식 (3.31)을 사용하여  $\epsilon'(y_0)$  값을 계산하고, 식 (3.30)으로부터  $y_0$ 에 대한 새로운 추산값을 계산한다.

이 예제에 대하여  $\delta = 0.0001$ 를 사용하는 MATLAB 스크립트들은 다음과 같이 주어진다.

p306a2.m


```
clear all
global DAB k
DAB=1.2e-9;
k=0.001;
z0=0;
L=0.001;
zf=L;
CA0=0.2;
y0=-130;
delta=0.0001;
err=1;
derr=1;
while(abs(err/derr)>1e-3)
[z,C]=ode45('p306af',[z0 zf],[CA0 y0]);
n=length(z);
err=C(n,2);
y0=y0*(1+delta);
[z,C]=ode45('p306af',[z0 zf],[CA0 y0]);
n=length(z);
err1=C(n,2);
y0=y0*(1-delta);
derr=(err1-err)/(delta*y0);
y0=y0-err/derr;
end
CAanal=0.2*cosh(L*sqrt(k/DAB)*(1-z/L))/cosh(L*sqrt(k/DAB));
plot(z,C(:,1),'o',z,CAanal)
```

위의 스크립트를 사용하여 첫번째 반복 계산의 결과가 표 3.4에 요약되어 있다. 여기서  $y_0$ 에 대한 새로운 추산값은 MATLAB 변수 `ynew`의 최종 값인 -131.911로 주어진다. 할선법을 사용한 다음 반복 계산은  $y$ 에 대한 초기 조건인  $y_0$ 에 대한 개선된 값을 사용하여 수행된다. 두번째 반복 계산 결과 `err`은 대략  $3 \times 10^{-4}$  정도가 되고, `ynew`는 거의 변하지 않으므로 수렴했다고 할 수 있다.

이 문제의 해는 분리된 경계조건 문제에 대한 근사해를 얻는 것을 강조한다. 적절한 출발점에서 시작하는 할선법은 해를 구하는데 아주 효율적이지만 적절하지 못한 출발점에서 시작하면 수치적 어려움에 봉착하게 되고 해를 구하지 못할 수도 있다.

표 3.4: 첫번째 할선법 계산 과정에서 몇몇 변수들에 대한 부분 해

변수	초기 값	최대 값	최소 값	최종 값
z	0	0.001	0	0.001
y	-130	2.76438	-130	2.76438
CA	0.2	0.2	0.140428	0.140461
err	-130	2.76438	-130	2.76438
y1	-130.013	2.74558	-130.013	2.74558
CA1	0.2	0.2	0.140446	-0.142229
err1	-130.013	2.74558	-130.013	2.74558
derr	1	1.44642	1	1.44642
ynew	-5.22675e-5	-5.22675e-11	-131.911	-131.911

 이 문제에 대한 MATLAB 스크립트는 CHAP3 디렉토리의 p306a2.m과 p306af.m으로 주어진다.

## 제 7 절 연립 비선형 대수 방정식의 해의 탐색

### 7.1 개념 설명

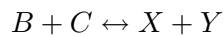
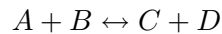
복잡한 화학 평형 계산

### 7.2 사용된 수치 해법

비선형 연립 방정식의 해, 유용한 해를 구하는 기법, 연립 방정식 계의 가능한 다중 해를 찾아내는 기법.

### 7.3 문제 설명

다음과 같은 반응이 일정 부피 기상 회분 반응기에서 진행된다.



위의 반응의 평형은 연립 대수 방정식으로 기술된다. 비선형 평형 관계는 열역학적 평형 표현을 이용하고 선형 관계들은 반응의 양론관계에서 얻어진다.

$$\begin{aligned} K_{C1} &= \frac{C_C C_D}{C_A C_B} & K_{C2} &= \frac{C_X C_Y}{C_B C_C} & K_{C3} &= \frac{C_Z}{C_A C_X} \\ C_A &= C_{A0} - C_D - C_Z & C_B &= C_{B0} - C_D - C_Y & & \\ C_C &= C_D - C_Y & C_Y &= C_X + C_S & & \end{aligned} \quad (3.32)$$

이 식들에서  $C_A, C_B, C_C, C_D, C_X, C_Y$ 와  $C_Z$ 는 초기에  $C_{A0}$ 와  $C_{B0}$ 에서 시작한 평형 상태에서의 다양한 화학종들의 농도이다. 평형 상수들  $K_{C1}, K_{C2}$ 와  $K_{C3}$ 의 값들은 알려져 있다.



$C_{A0} = C_{B0} = 1.5$ ,  $K_{C1} = 1.06$ ,  $K_{C2} = 2.63$ ,  $K_{C3} = 5$  일때, 다음의 세 초기조건들에서 출발하여 이 연립 방정식들을 풀어라.

(a)  $C_D = C_X = C_Z = 0$

(b)  $C_D = C_X = C_Z = 1$

(c)  $C_D = C_X = C_Z = 10$

#### 7.4 해

식 (3.32)로 주어지는 방정식들은 MATLAB에서 Newton-Raphson법을 사용하여 풀 수 있다. Newton-Raphson 법을 위한 함수 m-file을 작성하는 과정에서 비선형 평형 표현은  $f(x) = 0$  형태로 표현되어야 한다. 평형 표현을 원하는 형태로 변환하는 간단한 형태는 다음과 같다.

$$\begin{aligned} f(C_D) &= \frac{C_C C_D}{C_A C_B} - K_{C1} \\ f(C_X) &= \frac{C_X C_Y}{C_B C_C} - K_{C2} \\ f(C_Z) &= \frac{C_Z}{C_A C_X} - K_{C3} \end{aligned} \quad (3.33)$$

변환된 비선형 방정식들을 풀기위한 MATLAB 스크립트들은 다음과 같이 주어진다.

p307a1.m

```
clear all;
global KC1 KC2 KC3 CA0 CBO
KC1=1.06;
KC2=2.63;
KC3=5;
CA0=1.5;
CBO=1.5;
CD0=0;
CX0=0;
CZ0=0;
C=[CD0; CX0; CZ0];
rerr=1;
while(rerr>1.e-10)
    F=feval('p307f1',C);
    J=Jac('p307f1',C);
    err=J\F;
```

```

    C=C-err;
    rerr=max(abs(err./C));
end
CD=C(1);
CX=C(2);
CZ=C(3);
CY=CX+CZ;
CC=CD-CY;
CA=CA0-CD-CZ;
CB=CBO-CD-CY;
disp('      CA      CB      CC      CD      CX      CY      CZ');
disp([CA CB CC CD CX CY CZ]);

```

#### p307f1.m

```

function f=p307f1(C)
global KC1 KC2 KC3 CA0 CBO
f=zeros(3,1);
CY=C(2)+C(3);
CC=C(1)-CY;
CA=CA0-C(1)-C(3);
CB=CBO-C(1)-CY;
f(1)=CC*C(1)./(CA*CB)-KC1;
f(2)=C(2)*CY./(CB*CC)-KC2;
f(3)=C(3)./(CA*C(2))-KC3;
return

```

위의 스크립트를 MATLAB에서 실행시키면 (a), (b), (c)에서 지정된 초기 추산치들에 대하여 해를 구할 수 없게된다. Warning: Divide by zero. [(a)의 경우]나 Warning: Matrix is singular to working precision. [(b)와 (c)의 경우] 라는 message가 출력된다. MATLAB 및 비선형 방정식을 풀기위한 다른 프로그램에서의 이와 같은 실패는 미지수로 방정식을 나누는 것이 방정식을 아주 비선형으로 만들거나 또는 가끔은 정의할 수 없게 만들기 때문에 발생한다. (Newton-Raphson 법과 같은) 선형화에 근거한 방법들은 비선형성이 아주 강한 계에 대해서는 발산하고 함수가 정의되지 않는 경우에는 더 이상 계산을 진행할 수 없다.

#### 비선형 방정식들의 해의 탐색

단지 함수를 미지수들로 나누는 것을 피하기만 함으로써, 비선형 방정식의 간단한 변환은 많은 함수들을 덜 비선형적이고 더 쉽게 풀릴수 있게 만든다. 이 경우에, 식 (3.33)은

다음과 같이 수정된다.

$$\begin{aligned} f(C_D) &= C_C C_D - K_{C1} C_A C_B \\ f(C_X) &= C_X C_Y - K_{C2} C_B C_C \\ f(C_Z) &= C_Z - K_{C3} C_A C_X \end{aligned} \quad (3.34)$$

(a), (b), (c)에서 주어지는 초기 조건들에 대해서, 위의 수정된 비선형 방정식을 사용하여 MATLAB에서 계산한 결과는 표 3.5에 요약되어 있다. (a)에서 주어진 초기조건은 모두 양의 농도로 수렴함에 주목하라. 하지만 (b)와 (c)에서 주어진 초기조건은 농도의 몇 값이 음의 값에 수렴한다. 따라서 표 3.5에 대하여 물리적 가능성에 근거한 “타당성 검토”에 의하여 (b)와 (c)에서의 음의 농도는 이 해들이 물리적으로 타당한 경우를 나타내지 못하기 문에 해로 채택하지 않을 수 있는 근거가 된다.

이 문제는 미지의 변수들이 아주 비선형성이 큰 거동을 보이거나 0으로 나누지 않도록 비선형 함수를 입력하는 것이 바람직함을 설명하여 준다. 연립 대수 방정식의 해를 구하기 쉽게하는 또다른 방법은 연립 방정식을 음함수적 방정식 하나와 그 이외의 변수들은 양함수적으로 계산될 수 있도록 변환하는 것이다. 이 문제에는 적용할 수는 없지만, 이와 같은 접근법은 문제 3.4에서 설명되었다.


부가적으로, 이 문제는 적절하게 정의된 문제에 대한 정확한 수치 해도 실행 불가능한 해일 수도 있고, 따라서 (음의 농도와 같은) 비현실적인 해로 버려야 한다. 연립 비선형 방정식의 해가 요구되는 모든 경우에서 초기조건을 타당한 영역, 가능하면 궁극적인 해와 가깝도록 지정하는 것이 아주 중요하다.

표 3.5: 화학 평형 문제의 다중해

변수	(a)	(b)	(c)
CA	0.420689	0.36237	-0.700638
CB	0.242897	-0.234849	-0.377922
CC	0.153565	-1.62374	0.262286
CD	0.705334	0.0555561	1.0701
CX	0.177792	0.59722	-0.322716
CY	0.551769	1.67929	0.807818

CZ    0.373977    1.08207    1.13053

---

 (a)에 대한 MATLAB 스크립트는 CHAP3 디렉토리의 p307a2.m과 p307f2.m으로 주어진다.

## 제 8 절 미분-대수 방정식의 해법

### 8.1 개념 설명

이상 이성분(ideal binary) 혼합물의 회분 증류

### 8.2 사용된 수치 해법

제어 적분 기법을 사용한 상미분 방정식과 음함수적 대수 방정식이 연립된 방정식의 해.

### 8.3 문제 설명

1, 2로 표시되는 두가지 성분을 포함하는 이성분 증류공정에 대하여, 액상의 몰수,  $L$ 은 성분 2의 몰분율,  $x_2$ 의 함수로 다음 식에 의하여 표현된다.

$$\frac{dL}{dx_2} = \frac{L}{x_2(k_2 - 1)} \quad (3.35)$$

여기서  $k_2$ 는 성분 2의 기-액 평형 비이다. 만약 계를 이상적이라고 고려될 수 있으면, 기-액 평형 비는  $k_i = P_i/P$ 로 계산된다, 여기서  $P_i$ 는 성분  $i$ 의 증기압이고,  $P$ 는 전압이다.

흔히 사용되는 증기압 상관관계는 성분  $i$ 에 대하여  $A, B, C$ 를 매개인자로 사용하는 다음에 주어지는 것과 같은 Antoine 식이다.

$$P_i = 10^{(A + \frac{B}{T+C})} \quad (3.36)$$

여기서  $T$ 는 °C 단위의 온도이다.

회분 증류기에서의 온도는 기포점 곡선을 따른다. 기포점 온도는 음함수적 대수 방정식으로 정의되고, 이 방정식은 기-액 평형 비를 사용하여 다음과 같이 주어진다.

$$k_1x_1 + k_2x_2 = 1 \quad (3.37)$$

이상적으로 거동하는 벤젠(성분 1)과 톨루엔 (성분 2)의 2성분 혼합물을 고려하자. 벤젠에 대한 Antoine 식 상수는  $A_1 = 6.90565, B_1 = -1211.033, C_1 = 220.79$ 이다. 톨루엔의 경우에는  $A_2 = 6.95464, B_2 = -1344.8, C_1 = 219.482$  (Dean [?]).  $P$ 는 mm Hg로 주어지는 압력이고,  $T$ 는 °C로 주어지는 온도이다.

벤젠 (성분 1)과 톨루엔 (성분 2) 혼합물의 회분 증류가 1.2기압의 압력에서 진행된다. 초기에는 (몰 분율 기준으로) 60%의 벤젠과 40%의 톨루엔으로 구성된 100몰의 액체가 증류기에 있었다. 다음절에서 논의되는 두가지 방법을 사용하여 톨루엔의 농도가 80%가 되었을 때 증류기에 남아있는 액체의 양을 계산하고 결과들을 비교하라.

#### 8.4 (부분) 해

이 문제의 해는 식 (3.35)와 계산이 진행되는 동안에 식 (3.37)에 내포되어 있는 기포점에 대한 고려로부터 계산되는 온도를 동시에 계산하여 구해진다. 미분 방정식과 음함수적 대수 방정식으로 구성되는 방정식 계를 미분-대수 방정식(differential algebraic equation)이라 부르며 DAE라 한다. DAE를 풀기위한 수치 해법은 몇개가 있다. MATLAB을 포함한 대부분의 수학 문제 풀이 software package에는 DAE만을 풀기위한 해법을 가지고 있지 않다.

**방법 1** 첫번째 방법은 Shacham et al. [?]에 의하여 제안된 제어 적분 기법(controlled integral technique)을 사용할 것이다. 이 방법을 사용하면, 비선형 방정식 (3.37)은 다음과 같이 주어지는 오차의 향으로 다시 쓰여진다.

$$\epsilon = 1 - k_1x_1 - k_2x_2 \quad (3.38)$$

여기서 이 방정식으로부터 계산되는  $\epsilon$ 은 기포점에서 증류액의 농도를 찾는 단서가 된다. 비례 제어기의 작용과 비슷하게 온도를 오차에 비례하도록 변하게 하여 온도를 찾게 된다. 따라서 이 방법은 다음과 같은 또다른 미분 방정식으로 구현된다.

$$\frac{dT}{dx_2} = K_c \epsilon \quad (3.39)$$

여기서 비례 상수  $K_c$ 를 적절하게 선택하면 오차가 원하는 오차한계 내에 떨어지게 된다.

간단한 시행-오차법으로  $K_c$ 를 계산하게 된다. 초기에는  $K_c$ 를 작은 값 (예를들면  $K_c = 1$ )으로 고정하고 방정식 계를 적분한다. 만약  $\epsilon$ 이 너무 크면,  $K_c$ 를 증가시키고 적분을 다시한다. 이와 같은 시행 오차법이 오차가 적분 범위 전체에 걸쳐서 원하는 오차 한계 내에 떨어질 때까지 계속된다.

이 문제에서 시작점에서의 온도는 정해지지 않았다. 하지만 초기 혼합액의 기포점에서 해를 구하는 것이 필요하다. 이 초기 온도는 식 (3.37)에서  $x_1 = 0.6$ ,  $x_2 = 0.4$ 로 두고 MATLAB fzero를 사용하여 Antoine 식을 풀어서 구해진다. 이렇게하여 계산된 초기 온도는  $T_0 = 95.5851$ 이 된다.

회분 증류 문제를 풀기위한 MATLAB 스크립트들은 다음과 같이 주어진다.  $K_c = 0.5 \times 10^6$ 을 사용하였다. 해의 부분적인 결과가 표 3.6에 요약되어 있다.

p308a.m

```
clear all
global A1 B1 C1 A2 B2 C2 Kc
A1=6.90565;
B1=-1211.033;
C1=220.79;
A2=6.95464;
B2=-1344.8;
C2=219.482;
Kc=0.5e6;
x0=0.4;
xf=0.8;
L0=100;
T0=95.5851;
[x y]=ode45('p308af',[x0 xf],[L0 T0]);
L=y(:,1);
T=y(:,2);
x1=1-x;
x2=x;
k1=10^(A1+B1./(C1+T))/(760*1.2);
k2=10^(A2+B2./(C2+T))/(760*1.2);
err=1-k1.*x1-k2.*x2;
```

p308af.m


```
function dydx=p308af(x,y)
global A1 B1 C1 A2 B2 C2 Kc
dydx=zeros(2,1);
L=y(1);
T=y(2);
x1=1-x;
x2=x;
k1=10^(A1+B1/(C1+T))/(760*1.2);
k2=10^(A2+B2/(C2+T))/(760*1.2);
err=1-k1*x1-k2*x2;
dydx(1)=L/(k2*x2-x2);
```

```
dydx(2)=Kc*err;
return
```

표 3.6: 이 성분 증류 문제에 대한 부분 해

변수	초기값	최대값	최소값	최종값
x1	0.6	0.6	0.2	0.2
x2	0.4	0.8	0.4	0.8
L	100	100	14.0474	14.0474
T	95.5851	108.5916	95.5851	108.5916
k1	1.3105	1.8595	1.3105	1.8595
k2	0.5320	0.7863	0.5320	0.7863
err	-3.64589e-7	2.0654e-3	-2.0489e-3	-5.4118e-4

표에서 보듯이 톨루엔의 농도가 80% 되었을 증류기에는 액체가 14.05mol이 남아 있음을 알 수 있다. 증류가 일어나는 동안에 온도는 95.6°C에서 108.6°C로 상승한다. 식 (3.38)로부터 계산되는 오차의 절대값은 수치 적분 과정에서  $3.64589 \times 10^{-7}$ 에서  $2.0654 \times 10^{-3}$ 으로 증가하나, 이 값은 해가 원하는 오차 한계 내에 있다고 할 수 있을 정도로 작은 값이다.

 (a)에 대한 MATLAB 스크립트는 CHAP3 디렉토리의 p308a.m과 p308af.m으로 주어진다.

**방법 2** 식 (3.37)을  $x_2$ 에 대하여 미분하여 다음과 같은 미분 방정식을 유도할 수 있기 때문에, 다른 방법으로 이 문제를 풀 수 있다.

$$\frac{dT}{dx_2} = \frac{(k_2 - k_1)}{\ln(10) \left[ x_1 k_1 \frac{-B_1}{(C_1+T)^2} + x_2 k_2 \frac{-B_2}{(C_2+T)^2} \right]} \quad (3.40)$$

이 방정식을 식 (3.35)와 동시에 적분하여 문제를 푸는 과정에서 기포 점 온도를 주게 된다.



## 제 9 절 편미분 방정식을 풀기 위한 직선군법(method of lines)

### 9.1 개념 설명

한쪽 면은 단열이 되어있는 일차원 평판에서 열 확산 계수가 일정한 경우의 비정상 상태 열전도.

### 9.2 사용된 수치 해법

연립 상미분 방정식과 양함수적 대수 방정식의 해를 포함하는 수치적 직선군 방법을 편미분 방정식의 해를 구하기 위하여 적용.

### 9.3 문제 설명

평판에서  $x$  방향으로의 비정상 상태 열전달은 다음과 같은 편미분 방정식에 의하여 기술된다(자세한 유도는 Geankoplis [7]를 참고하라).

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (3.41)$$

여기서  $T$ 는 온도(K),  $t$ 는 시간(s),  $k/\rho c_p$ 로 주어지는  $\alpha$ 는 열확산 계수 ( $\text{m}^2/\text{s}$ )이다. 이 문제에서 열전도도  $k$  ( $\text{W}/\text{m}\cdot\text{K}$ ), 밀도  $\rho$  ( $\text{kg}/\text{m}^3$ ), 열 용량  $c_p$  ( $\text{J}/\text{kg}\cdot\text{K}$ )은 일정하다고 가정한다.

두께 1.00m의 평판이 단열재에 의하여 지지되는 Geankoplis [7]가 제시한 예제를 고려하자. 이 평판은 그림 3.5에 주어져 있다. 수치해를 구하기 위하여 이 평판은  $N + 1$ 개의 노드를 가지는  $N$ 개의 구간으로 나뉜다. 이 평판을 초기에 균일한 온도  $100^\circ\text{C}$ 에 있었다. 이러한 사항은  $t = 0$ 에서 모든 내부 노드의 온도가 알려진 값을 갖는다는 초기조건이 된다.

$$T_n = 100 \quad \text{for } n=2, \dots, (N+1) \text{ at } t=0 \quad (3.42)$$

만약 시간 0에서 노출된 표면이 갑자기 온도  $0^\circ\text{C}$ 로 고정된다면, 이는 노드 1에서의 경계 조건을 준다.

$$T_1 = 0 \quad \text{for } t \geq 0 \quad (3.43)$$

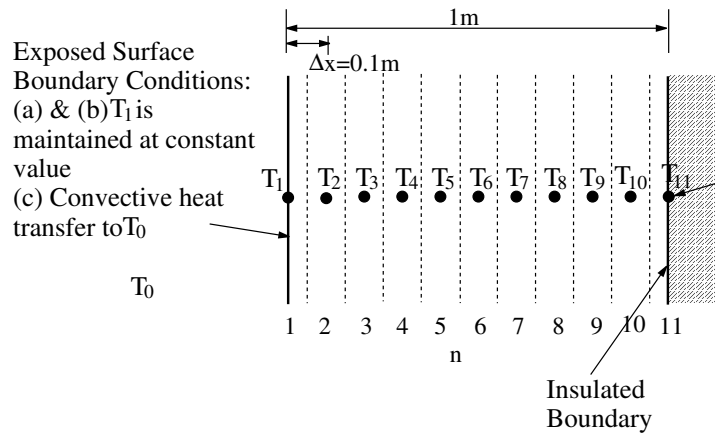


그림 3.5: 1차원 평판에서의 비정상 상태 열 전도

또다른 경계조건은 노드  $N + 1$ 에서의 단열 경계를 통해서 열이 전달되지 않으므로 다음과 같이 된다.

$$\frac{\partial T_{N+1}}{\partial x} = 0 \quad \text{for } t \geq 0 \quad (3.44)$$

이 문제는 두께가 두배인 평판의 양쪽면이 초기 온도에 노출된 경우의 문제와 동일함에 주목하라.

대류를 단지 평판의 표면으로의 열전달 모드로 고려될 때, 계면에서 대류에 의한 에너지 입력과 전도에 의한 에너지 출력을 연관시키는 에너지 수지를 세울 수 있다. 따라서 임의의 시간에,  $x$  방향으로 평판 표면에 수직인 전달에 대해서는 다음과 같이된다.

$$h(T_0 - T_1) = -k \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=0} \quad (3.45)$$

여기서  $h$ 는 대류 열전달 계수 ( $\text{W}/\text{m}^2 \cdot \text{K}$ )이고  $T_0$ 는 주위의 온도이다.

- (a)  $\alpha = 2 \times 10^{-5} \text{m}^2/\text{s}$ 이고 평판 표면은  $T_1 = 0^\circ\text{C}$ 로 고정된 경우에 식 (3.41)을 초기 및 경계조건들 식 (3.42), (3.43), (3.44)를 사용하여 수치적으로 풀어라. 해는 10개의 구간을 사용하는 수치적 직선군법을 이용하여 구해야만 한다.  $T_2, T_3, T_4$ 와  $T_5$ 를 시간의 함수로 6000s 까지 도시하라.
- (b) (a)를 20개의 구간을 사용하여 다시 풀어라. 결과를 (a)의 결과와 비교하여, (a)의 결과가 정밀함을 입증하라.
- (c) 평판 표면에서 대류가 존재하는 경우에 대하여 (a), (b)를 다시 풀라. 열전달 계수는  $h = 25.0 \text{W}/\text{m}^2 \cdot \text{K}$ 이고, 열전도도는  $k = 10.0 \text{W}/\text{m} \cdot \text{K}$ 이다.

### 수치적 직선군법

Schiesser [?]에서 논의된 바와 같이, 공간 도함수에 대하여 유한 차분법을 적용하여 시간 도함수에 대한 상미분 방정식을 얻는 직선군법은 편미분 방정식을 푸는 일반적인 방법이다. 이 문제에서는  $\Delta x = 0.1\text{m}$ 인 10개 구간을 사용하여, 식 (3.41)을 2계 도함수에 대한 [부록 A의 식 (A.9)의] 중앙 차분 공식을 사용하여 다음과 같이 근사한다.

$$\frac{\partial T_n}{\partial t} = \frac{\alpha}{(\Delta x)^2}(T_{n+1} - 2T_n + T_{n-1}) \quad \text{for } (2 \leq n \leq 10) \quad (3.46)$$

식 (3.43)으로 주어지는 경계조건은 다음과 같이 표현된다.

$$T_1 = 0 \quad (3.47)$$

식 (3.44)로 주어지는 두번째 경계조건은 [부록 A의 식 (A.7)의] 2차 후방 차분식을 사용하여 다음과 같이 근사한다.

$$\frac{\partial T_{11}}{\partial x} = \frac{3T_{11} - 4T_{10} + T_9}{2\Delta x} = 0 \quad (3.48)$$

위 식을  $T_{11}$ 에 대하여 정리하면 다음과 같이 된다.

$$T_{11} = \frac{4T_{10} - T_9}{3} \quad (3.49)$$

### 표면 경계조건

식 (3.45)로 주어지는 평판 표면에서의 에너지 수지식은 평판 표면 온도  $T_1$ , 주위 온도  $T_0$ 와 내부 노드 점들에서의 온도 사이의 관계를 결정하는데 사용된다. 이 경우에 [부록 A

의 식 (A.5)의] 1계 도함수에 대한 2차 전방 차분 식이 다음과 같이  $T_1$ 에 적용될 수 있고,

$$\frac{\partial T_1}{\partial x} = \frac{(-T_3 + 4T_2 - 3T_1)}{2\Delta x} \quad (3.50)$$

식 (3.45)에 대입하면 다음과 같은 식을 얻을 수 있다.

$$h(T_0 - T_1) = -k \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=0} = -k \frac{(-T_3 + 4T_2 - 3T_1)}{2\Delta x} \quad (3.51)$$

위의 식을  $T_1$ 에 대하여 풀면 다음과 같은 결과를 얻을 수 있고,

$$T_1 = \frac{2hT_0\Delta x - kT_3 + 4kT_2}{3k + 2h\Delta x} \quad (3.52)$$

이 식은 직선군 법을 이용하여 해를 구하는 과정에서  $T_1$ 을 계산하는데 사용될 수 있다.

## 9.4 해

(a) 이 문제에 대한 해는 식 (3.46), (3.47) 및 (3.49)로 주어지는 9개의 연립 상미분 방정식과 11개의 온도 노드들에 대한 2개의 양함수적 대수 방정식의 해로부터 구할 수 있다. 이 문제를 풀기위한 MATLAB 스크립트들은 다음에 주어진다. MATLAB에서 반복되는 식들을 처리하는데 “for ... end”는 아주 편리하다.

p309a.m

```
clear all
global alpha deltax T1
alpha=2e-5;
deltax=0.1;
t0=0;
tf=6000;
T1=0;
T20=100;
T30=100;
T40=100;
T50=100;
T60=100;
T70=100;
T80=100;
T90=100;
T100=100;
[t,T]=ode45('p309af',[t0 tf],[T20 T30 T40 T50 T60 T70 T80 T90 T100]);
T2=T(:,1);
T3=T(:,2);
T4=T(:,3);
```

```

T5=T(:,4);
T6=T(:,5);
T7=T(:,6);
T8=T(:,7);
T9=T(:,8);
T10=T(:,9);
T11=(4*T10-T9)/3;
plot(t,T2,t,T3,'-.',t,T4,':',t,T5,'--');
xlabel('Time (s)')
ylabel('Temperature (C)')

```

p309af.m

```

function dTdt=p309af(t,T)
global alpha deltax T1
dTdt=zeros(9,1);
T11=(4*T(9)-T(8))/3;
dTdt(1)=alpha/deltax^2*(T(2)-2*T(1)+T1);
for i=2:8
dTdt(i)=alpha/deltax^2*(T(i+1)-2*T(i)+T(i-1));
end
dTdt(9)=alpha/deltax^2*(T11-2*T(9)+T(8));
return

```

첫 네개의 구간, 노드 점 2, ... 5에서의 온도는 그림 3.6에 주어져 있다. 온도가 과도 상태에서 정상상태로 수렴함을 보여준다. 시간  $t=6000s$ 에서 계산 결과를 Geankoplis [7]가 유한 차분법을 사용하여 손 계산으로 구한 결과와 비교한 것이 표 3.7에 주어져 있다. 이 결과들은 일반적으로는 잘 일치함을 보여주나, 평판의 단열 경계에 가까워질수록 온도들 사이의 차이가 커짐을 보여준다.

표 3.7:  $t=6000s$ 에서 1차원 비정상 상태 열전달의 결과

평판 표면으로 부터의 거리 (m)	Geankoplis [7]		직선군법 (a)		직선군법 (b)	
	$\Delta x = 0.2m$ n	T(°C)	$\Delta x = 0.1m$ n	T(°C)	$\Delta x = 0.05m$ n	T(°C)
0	1	0.0	1	0.0	1	0.0
0.2	2	31.25	3	31.71	5	31.68
0.4	3	58.59	5	58.49	9	58.47
0.6	4	78.13	7	77.46	13	77.49

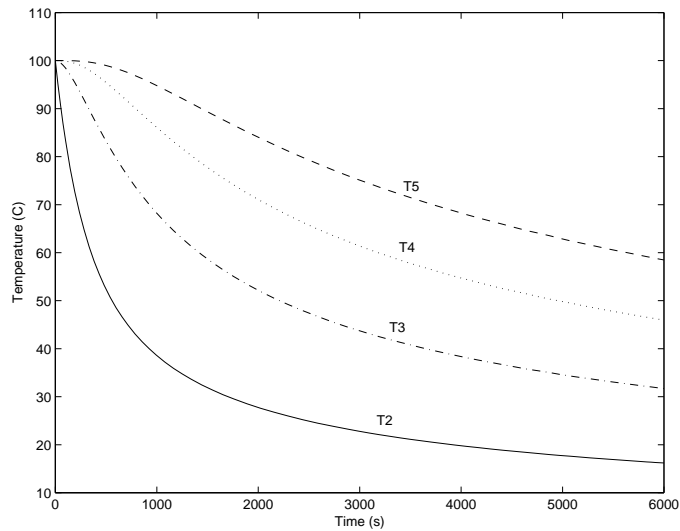




그림 3.6: 1차원 평판에서 비정상상태 열전도 문제에 대한 온도 분포들

0.8	5	89.84	9	88.22	17	88.29
1.0	6	93.75	11	91.66	21	91.72

 (a)에 대한 MATLAB 스크립트는 CHAP3 디렉토리의 p309a.m과 p309af.m으로 주어진다.

(b) 수치해의 정밀도는 수치적 직선군 법에 사용되는 구간의 수를 2배로 하여 고찰될 수 있다. 구간을 배가하는 것은 식 (3.46)에서 주어지는 관계에 10개의 방정식을 더하고  $T_{21}$ 를 계산하기 위하여 식 (3.49)를 수정하기만 하면 된다. 구간의 배가한 결과는 표 3.7에 정리되어 있다. 표에서 보듯이 수치해는 앞의 (a)에서 계산된 해와 거의 차이가 없다. 따라서 10개의 구간을 사용한 첫번째 선택의 타당성이 다시 한번 확인된다. 온도 분포는 거의 변화가 없다.

 (b)에 대한 MATLAB 스크립트는 CHAP3 디렉토리의 p309b.m과 p309bf.m으로 주어진다.


(c) 이 경우에는 노드 1에서의 온도  $T_1$ 의 계산에는 대류 경계조건이 사용되어야 하고, 식 (3.52)이 주위 온도  $T_0$ 에 대한 식과 함께 (a)의 주어진 방정식에 더해져야 한다. 열전

달에 대한 추가적인 저항에 있기때문에 이 경우에는 평판 내의 온도의 응답은 좀 더 느려져야 된다.

결과들이 Geankoplis [7]의 근사적인 손 계산과 표 3.8에서 비교되어 있다. 이 경우에는 수치적 직선군 법에 의한 결과들은 잘 일치하나 간략화된 손 계산 결과는 수치적 직선군 법에 의한 결과와 약간의 오차가 있다.

표 3.8:  $t=1500s$ 에서 대류가 있는 1차원 비정상 상태 열전달의 결과

평판 표면으로 부터의 거리 (m)	Geankoplis [7]		직선군법 (a)		직선군법 (b)	
	$\Delta x = 0.2m$ n	T(°C)	$\Delta x = 0.1m$ n	T(°C)	$\Delta x = 0.05m$ n	T(°C)
0	1	64.07	1	64.40	1	64.99
0.2	2	89.07	3	88.13	5	88.77
0.4	3	98.44	5	97.38	9	97.73
0.6	4	100.00	7	99.61	13	99.72
0.8	5	100.00	9	99.96	17	99.98
1.0	6	100.00	11	100.00	21	100.00

 (a)에 대한 MATLAB 스크립트는 CHAP3 디렉토리의 p309c.m과 p309cf.m으로 주어진다.





## 참고문헌

- [1] Perry, R.H., Green, D.W. and Marorey, J.D., Eds, *Perry's Chemical Engineers Handbook*, 7th ed., New York: McGraw Hill, 1997.
- [2] Garritsen, A.W., University of Technology, Delft, Netherlands, 1992.
- [3] Press, W.H., Teukolsky, S.A., Vetterling, W.T. and Flannery, B.P., *Numerical Recipes*, 2nd ed., Camnridge, MA: Cambridge University Press, 1992.
- [4] Gear, C.W., "Automatic Integration of Stiff Ordinary Differential Equations," *Proc. of the IP68 Conf.*, North-Holland, Amsterdam, 1969.
- [5] Luss, D. and Amunson, N.R., "Stability of Batch Catalytic Fluidized Beds," *AICHE J.*, 14(2), 211 (1968).
- [6] Aiken, R.C. and Lapidus, L., " An Effective Integration Method for Typical Stiff Systems," *AICHE J.*, 20(2), 368 (1974).
- [7] Geankoplis, C.J., *Transport Process and Unit Operations*, 3rd ed., Englewood Cliffs, N.J.: Prentice Hall, 1993.
- [8] Thomas, L.C., *Heat Transfer*, Englewood Cliffs, N.J.: Prentice Hall, 1992.
- [9] Welty, J.R., Wicks, C.E. and Wilson, R.E. *Fundamentals of Momentum, Heat and Mass Trnafer*, 3rd ed., New York: Wiley, 1984.
- [10] Himmelblau, D.M., *Basic Principles and Calculations in Chemical Engineering*, 6th ed., Englewood Cliffs, NJ: Prentice Hall, 1996.

- [11] Hanna, O.T. and Sandall, O.C., *Computational Method in Chemical Engineering*, Englewood Cliffs, NJ: Prentice Hall, 1995.
- [12] Carnahan, B., Luther, H.A. and Wilkes, J.O., *Applied Numerical Method*, New York: Wiley, 1969.