УДК 66.011 DOI: 10.6060/rcj.2019633.3

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ДИСКРЕТНЫХ ПОДХОДОВ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ОСНОВНЫХ ПРОЦЕССОВ ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

С. П. Бобков

СЕРГЕЙ ПЕТРОВИЧ БОБКОВ – профессор, доктор технических наук, профессор кафедры информационных технологий и цифровой экономики Ивановского государственного химико-технологического университета. Область научных интересов – математическое и компьютерное моделирование технических и технико-экономических систем с использованием дискретных и стохастических методов. E-mail: bsp@isuct.ru.

153300, Россия, Иваново, пр. Шереметевский, д. 7, Ивановский государственный химико-технологический университет (ИГХТУ).

Статья посвящена вопросам использования дискретных динамических моделей в качестве альтернативы классическим методам исследования базовых процессов химической технологии. Предлагается использовать модели в виде систем детерминированных клеточных автоматов. При этом сплошная среда рассматривается как совокупность взаимодействующих элементов, поведение которых полностью описывается локальными функциями. Описаны основные подходы и общая методология разработки дискретных моделей. Рассмотрены примеры использования систем клеточных автоматов для моделирования нелинейных процессов теплообмена с учетом неоднородности материала и наличия в нем объемных источников переменной мощности. Указаны достоинства и недостатки предлагаемого подхода и его возможности для изучения других процессов химической технологии.

Ключевые слова: дискретное моделирование, клеточные автоматы, теплопередача, нелинейные задачи теплопроводности.

USE OF DISCRETE APPROACHES FOR SIMULATION THE BASIC PROCESSES OF CHEMICAL TECHNOLOGY

S. P. Bobkov

7, Sheremetievskiy Avenue, Ivanovo, 153000, Russia. Ivanovo State University of Chemistry and Technology, E-mail: bsp@isuct.ru.

The article is devoted to the use of discrete dynamic models as an alternative to classical methods for studying the basic processes of chemical technology. It is proposed models in the form of deterministic cellular automata systems are used. In this case, a continuous medium is considered as a set of interacting elements whose behavior is completely described by local functions. The basic approaches and the general methodology for creating discrete models are described. An examples of cellular automata systems use for simulation of nonlinear heat transfer processes are considered, taking into account the heterogeneity of the material and the presence in the material of volumetric sources of variable power in it. The advantages and disadvantages of the proposed approach and its capabilities for studying other processes of chemical technology are indicated.

Key words: discrete simulation, cellular automata, heat transfer, nonlinear heat conduction problems.

Введение

Классические подходы к моделированиюосновных процессов химической технологии, таких, как тепловые, диффузионные, гидродинамические и пр. предполагают использование уравнений переноса или уравнений механики сплошной среды. Указанные уравнения являются математической формализацией фундаментальных законов переноса субстанции (энергии, массы) и обычно записываются в виде дифференциальных уравнений с частными производными параболического или гиперболического типа (уравнения математической физики) [1]. Законы переноса и их математические реализации внесли колоссальный вклад в становление и развитие химической инженерной науки. Тем не менее, в современных условиях выявились и недостатки классических моделей, связанные, в первую очередь, с использованными в них математическими схемами [2].

Практически все базовые уравнения химико-технологических процессов относятся к классу непрерывных (континуальных) моделей. Непрерывность моделей определяется наличием в них математически бесконечно малых (производных, дифференциалов) и означает безусловную применимость только к сплошной однородной среде. Далее, при выводе большинства упомянутых уравнений использовались градиентные законы переноса, связывающие соответствующие потоки и потенциалы. Последнее привело к тому, что большинство транспортных коэффициентов (диффузии, вязкости и пр.) представлены в классических уравнениях константами, хотя хорошо известно, что они таковыми не являются. Практика показала, что использование классических подходов не только может приводить к недостаточно адекватным результатам, но в ряде случаев затруднено, либо вообще нереально [3–6]. Сказанное касается следующих ситуаций.

1. Задачи, при постановке которых в дифференциальные уравнения вводятся нелинейные или пороговые функции. В таких обстоятельствах получить аналитические решения практически невозможно, а численные методы либо плохо распараллеливаются (неявные схемы решений), либо ограничены условиями устойчивости и точности (явные схемы).

2. Задачи со сложной геометрией, при наличии несимметричных областей, криволинейных границ. Здесь проблемы возникают как с описанием самой исследуемой области, так и при постановке граничных условий в двух- и трехмерных случаях.

3. Задачи, в которых исследуются процессы в гетерогенных средах, а также случаи, когда свойства веществ меняются в пространстве или во времени.

Указанные проблемы существенно ограничивают применение классических континуальных подходов при современных исследованиях основных процессов химической технологии. Одним из направлений моделирования указанных процессов может быть использование дискретных динамических систем и, в частности, клеточно-автоматных моделей [7, 8].

Дискретные динамические модели

В последние годы многие исследователи при моделировании целого ряда процессов и систем обратились к новым подходам, в основу которых положен язык дискретных сред. Это клеточные автоматы, системы взаимодействующих тьюрмитов, агентные системы [9]. В настоящее время еще нет качественной теории этих объектов, однако имеетсямасса примеров их успешного применения при решении конкретных задач. Перспективность использования дискретных методов основывается на следующем предположении: существует множество отдельных элементов, между которыми происходят локальные взаимодействия, определяющие глобальную структуру. Остановимся на одной из разновидностей дискретных динамических моделей – на системах клеточных автоматов.

Клеточный автомат состоит из набора неделимых пространственных элементов (клеток, ячеек), которые взаимодействуют друг с другом. Каждая клетка функционирует по правилам, напоминающим законы работы абстрактного автомата. Отсюда понятно происхождение названия модели. Рассматривая поведение отдельной клетки [10], необходимо указать на следующее.

Каждая отдельная клетка представляет собой объект, функционирующий в дискретные моменты времени $t_0<t_1<t_2<...$, принадлежащие множеству T. В конкретный момент времени $t_k \in T$ клетка находится в одном из возможных состояний $z(t_k)$, принадлежащих множеству Z. На клетку могут осуществляться внешние воздействия $x(t_k)$, на которые она реагирует, изменяя свое состояние в соответствии с одношаговой функцией переходов:

$$z(t_{k+1}) = F[z(t_k), \sum x(t_k)] \quad (1)$$

Реакция клетки заканчивается за один шаг дискретного времени.

Поскольку каждая клетка имеет соседей, с которыми она контактирует, именно соседи осуществляют на нее внешние воздействия. В свою очередь, сама клетка воздействует на соседей.

Таким образом, поведение клеточного автомата в целом, как совокупности клеток, полностью определяется локальными взаимодействиями отдельных составляющих элементов, что и является основной особенностью рассматриваемого метода моделирования.

Однако локальное пространственное взаимодействие характерно не только для клеточных автоматов, но и для большогокласса непрерывных динамических систем, к которым относятся основные процессы химической технологии. Это дает возможность рекомендовать клеточные автоматы для моделирования процессов переноса вещества и энергии.

Рассмотрим основные подходы и общую методологию моделирования с использованием клеточных автоматов [11].

Прежде всего, непрерывное модельное пространство разбивается на клетки (ячейки) по функциональному признаку. Разбиение может быть равномерным, с получением одинаковых элементов, но это не обязательно и часто делается лишь для удобства моделирования. Основной целью дискретизации пространства является получение таких клеток, пространство внутри которых функционально однородно. То есть, размеры полученных клеток должны быть такими, чтобы параметры процессов внутри них можно было считать не зависящими от пространственных координат. При этом единственной независимой переменной для описания поведения каждой клетки останется время. Следует заметить, что описанный подход к разбиению модельного пространства позволяет заполнить небольшими клетками зоны произвольной формы. Поэтому значительно уменьшаются трудности, возникающие при моделировании объектов с криволинейными границами.

После разбиения модельного пространства следует описать поведение полученных клеток с помощью функциональных зависимостей вида (1). Для этого следует указать явный вид функции F. Зависимости должны формально связывать состояния клеток и воздействия на них. При этом применяются общие законы конкретного моделируемого процесса. В качестве состояний клеток целесообразно взять интенсивные величины потенциальные фазовые переменные соответствующего процесса. Так, для тепловых процессов состояние клетки может однозначно определяться температурой. При моделировании диффузионных процессов состояние клетки задается концентрацией целевого компонента. В гидродинамике в роли состояния следует использовать среднюю скорость движения и т.д. В такой постановке внешними воздействиями будут являться соответствующие экстенсивные величины поток тепла, поток массы, механическая сила и т.д.

Таким образом, после дискретизации пространства будет получен взаимосвязанный массив клеток, поведение которых во времени (в данном случае дискретном) будет подчиняться законам моделируемого процесса.

Построение дискретной модели

Рассмотрим процедуру построения клеточно-автоматной модели процесса теплопереноса по молекулярному механизму в двухмерной постановке [12]. Возьмем пластину произвольной формы и разобьем ее на дискретные элементы с шагом h (рис. 1).

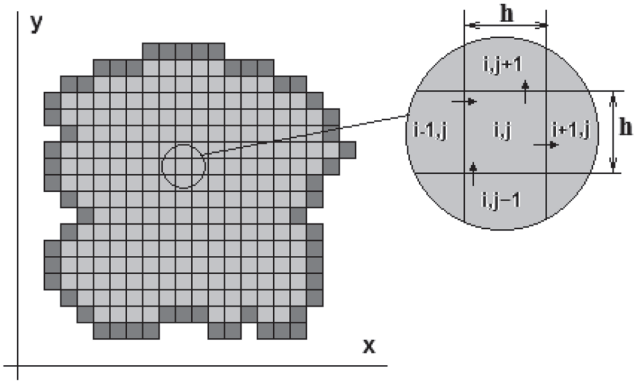

Рис. 1. Схема дискретизации объекта моделирования

Для определения явного вида функции переходов в выражении (1) воспользуемся достаточно простым положением физики.

Согласно закону Фурье вектор потока тепла (количество энергии, проходящей в единицу времени через единицу площади) пропорционален градиенту температуры. Рассматривая каждую клетку, как куб, можно записать закон теплопроводности в интегральной форме следующим образом:

$$q = \frac{\lambda \Delta T}{h^2} \qquad (2),$$

где q – удельная мощность теплового потока; λ – коэффициент теплопроводности; T – температура; h – сторона куба (шаг по координатам).

Рассмотрим поведение клетки i,j в момент времени t_k. Рассматриваемая клетка обменивается с соседними клетками потоками тепла (показаны на выделенном фрагменте рис 1).

В рамках дискретной модели поток тепла, получаемый клеткой i,j от клетки i-1,j запишется так:

$$q_1(t_k) = \lambda_{i-1,j} \frac{[T_{i-1,j}(t_k) - T_{i,j}(t_k)]}{h^2} \quad (3),$$

где $\lambda_{i-1,j}$ – коэффициент теплопроводности материала клетки i-1,j;

$T_{i-1,j}(t_k)$ и $T_{i,j}(t_k)$ – температуры (состояния) клеток в момент времени t_k.

Для потока тепла от клетки i,j к клетке i+1,j справедливо уравнение:

$$q_2(t_k) = \lambda_{i,j} \frac{[T_{i,j}(t_k) - T_{i+1,j}(t_k)]}{h^2} \quad (4),$$

где $\lambda_{i,j}$ – коэффициент теплопроводности материала клетки i,j; $T_{i+1,j}(t_k)$ – температура клетки i+1,j.

Аналогично для потоков от клетки i,j–1 к i,j, а также от клетки i,j к i,j+1:

$$q_3(t_k) = \lambda_{i,j-1} \frac{[T_{i,j-1}(t_k) - T_{i,j}(t_k)]}{h^2} \quad (5),$$

$$q_4(t_k) = \lambda_{i,j} \frac{[T_{i,j}(t_k) - T_{i,j+1}(t_k)]}{h^2} \quad (6),$$

Таким образом, с учетом (3)–(6), суммарный поток микроскопического переноса тепла для клетки i,j в момент дискретного времени t_k будет иметь вид:

$$\sum q_{i,j}(t_k) = q_1(t_k) - q_2(t_k) + q_3(t_k) - q_4(t_k) \quad (7)$$

Рассматривая изменение температуры клетки за промежуток времени **Δt,** можно записать следующее выражение:

$$\frac{T_{i,j}(t_{k+1}) - T_{i,j}(t_k)}{\Delta t} = \frac{\sum q_{i,j}(t_k)}{C_{i,j}\rho_{i,j}},$$

где $C_{i,j}$ и $\rho_{i,j}$ – теплоемкость и плотность материала клетки i,j соответственно.

Окончательно получим:

$$T_{i,j}(t_{k+1}) = T_{i,j}(t_k) + \frac{\Delta t}{C_{i,j}\rho_{i,j}} \sum q_{i,j}(t_k) \quad (8),$$

Выражение (8) является функцией переходов клетки и, совместно с (7), позволяет вычислять изменение температуры клетки (ее состояние) на каждом шаге дискретного времени.

Уравнения (7)–(8) справедливы для внутренних клеток автомата, т. е. для клеток, имеющих соседей со всех сторон. Однако при моделировании реальных процессов в телах конечных размеров в рассмотрении должны находиться также особые клетки [13]. К ним относятся:

1. Клетки, имеющие меньшее число соседей, т.е. находящиеся на краю рассматриваемой области (на рис. 1 – они выделены темным цветом);

2. Клетки источники или поглотители тепла;

3. Аномальные клетки, свойства которых резко отличаются от свойств основной массы клеток.

Вполне объяснимо, что особые клетки будут иметь свои специфические функции перехода. Кратко рассмотрим их.

1. Рассматривая особые клетки, находящиеся на краю рассматриваемой области, следует отметить, что функции перехода для них нетрудно получить, используя методику, приведенную выше. Рассматривая потоки тепла для краевых клеток, можно установить, что при отсутствии теплообмена с окружающей средой, поток на границе отсутствует, т.е. соответствующее слагаемое выражения (7) равно нулю. При наличии теплообмена с внешним пространством соответствующий поток следует учитывать, но его величина определится из уравнений теплоотдачи на границе.

2. Отдельную группу особых клеток модели составляют клетки, моделирующие участки объекта, где возникает или поглощается. Это клетки – локальные источники (стоки) тепла. Их использование в модели наиболее удобно, если для них известен закон изменения состояния (температуры) во времени:

$$T_{m,n}(t_k) = \Psi(t_k) \quad (9)$$

где m,n – номер клетки, $\Psi(t_k)$ – заданная функция дискретного времени, в общем случае также функция свойств материала.

Правая часть выражения (9) в ряде случаев может быть равна константе. Размеры локального источника (стока) тепла могут не ограничиваться одной клеткой, а простираться на несколько клеток.

Довольно часто в объектах моделирования содержатся не локальные, а распределенные источники (стоки) тепла, например при объемных химических реакциях. Тогда целесообразно в правую часть уравнения (8) ввести дополнительное слагаемое**,** учитывающее выделение (поглощение) тепловой энергии:

$$T_{i,j}(t_{k+1}) = T_{i,j}(t_k) + \frac{\Delta t}{C_{i,j}\rho_{i,j}} \left[\sum q_{i,j}(t_k) + \gamma(t_k) \right] \quad (10),$$

где $\gamma(t_k)$ – удельная мощность источника (стока) тепла в момент времени t_k.

Безусловно, величина удельной мощности бу-

дет зависеть от параметров процесса, свойств материала и пр. Некоторые конкретные виды данной зависимости будут рассмотрены ниже в примерах.

3. Описание поведения клеток, имеющих другие физические параметры, нежели основная масса клеток, в рамках рассматриваемой модели не вызывает никаких сложностей. Нетрудно заметить, что в выражения (3)–(8) уже входят конкретные характеристики материала клетки (плотность, теплоемкость, теплопроводность). В данной постановке задачи моделирование процесса в однородном материале будет являться частным случаем.

Примеры использования дискретного подхода

Конкретизируем поставленную задачу. Пусть мы имитирует процесс горения, что приводит к необходимости ввести в рассмотрение объемный источник тепла. Это позволяет нам использовать выражение (10). Модельным объектом возьмем плоскую пластину, для простоты, правильной формы, которую разобьем на 1681 (41×41) клеток, размером 1 мм. В исходном состоянии начальная температура среды и пластины принята равной 0 условных градусов. Для инициации горения центральная точка пластины «поджигается» мгновенным тепловым импульсом, температура которого превышает исходную температуру пластины. Теплофизические характеристики материала принимались следующими: удельная теплоемкость 1000 Дж/(кг·К); плотность 1500 кг/м^3; теплопроводность 1,5 Вт/(м·К). Величина шага моделирование по времени равнялась 0,005 с.

Пример 1.

Рассмотрим квазилинейную задачу, в которой удельная мощность источников зависит от температуры. Примем, что для любого момента времени и для любой клетки выполняется следующая зависимость:

$$\gamma(T) = kT \qquad (11),$$

где k – константа.

Такие условия характерны для теплопереноса осложненного экзотермическими явлениями.

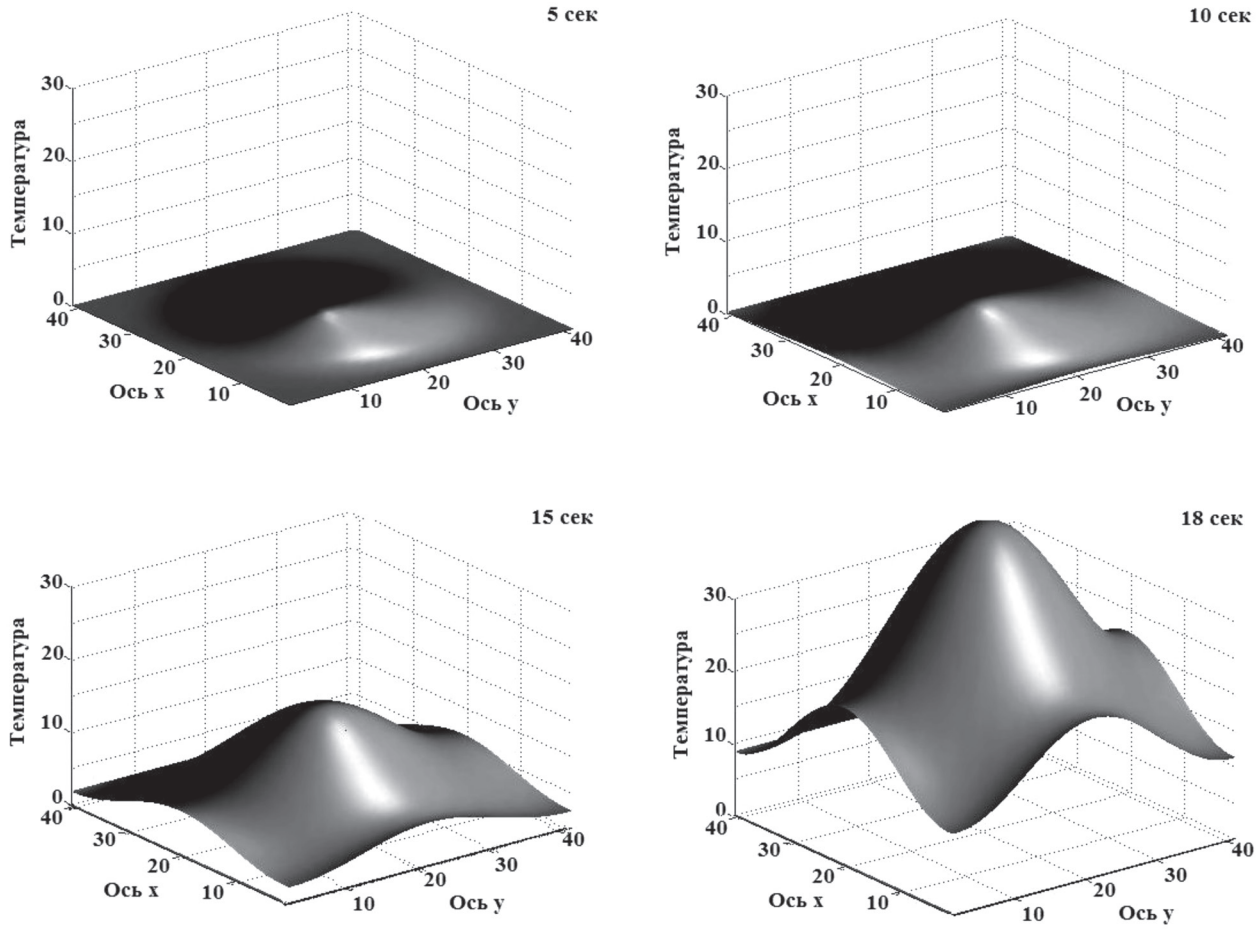

Рис. 2. Прогрев пластины при наличии источников, удельная мощность которых зависит от температуры экзотермически

При имитации процесса предполагалось, что материал пластины однородный, а теплоотдача в окружающую среду отсутствует.

Результаты моделирования приведены на рис. 2, где показаны профили температуры в последовательные моменты времени при k = 0,025.

Моменты модельного времени на рис. 2 и последующих рисунках проставлены в правом верхнем углу. По горизонтальным осям отложены размеры пластины, по оси аппликат – температура в условных единицах.

Анализ рисунка 2 показывает, что на начальном этапе развития процесса тепло распространяется от более нагретых участков достаточно медленно. Но затем, в области точки воздействия начального импульса температура резко возрастает, образуя своего рода «факел». Такая картина в реальных условиях характерна для начальных периодов процесса горения.

Пример 2.

Изменим предыдущую задачу следующим образом.

Пусть пластина имеет зону, материал которой имеет другие теплофизические свойства по сравнению с основной массой. Остальные параметры задачи оставим прежними.

Расположение аномальной зоны, теплопроводность в которой ниже на порядок будет хорошо заметно на рис. 3.

Из рисунка 3 видно, что температура аномального участка резко выделяется на общем тепловом поле, которое в данном случае неравномерное. Кроме того, сам процесс прогрева происходит медленнее, чем в примере 1.

Следует отметить, что моделирующая программа, по сравнению с предыдущим примером практически не менялась, были только введены координаты аномальной области и другие характеристики материала в ней. Расчетный алгоритм остался без изменений. Этот момент является очень важным при использовании методов компьютерного моделирования.

Обсуждая полученные результаты, можно указать, что принятая в примерах 1 и 2 линейная зависимость удельной мощности внутренних источников теплоты от температуры является слишком грубым приближением при формализации законов теплопереноса при горении. Кроме того, в данных

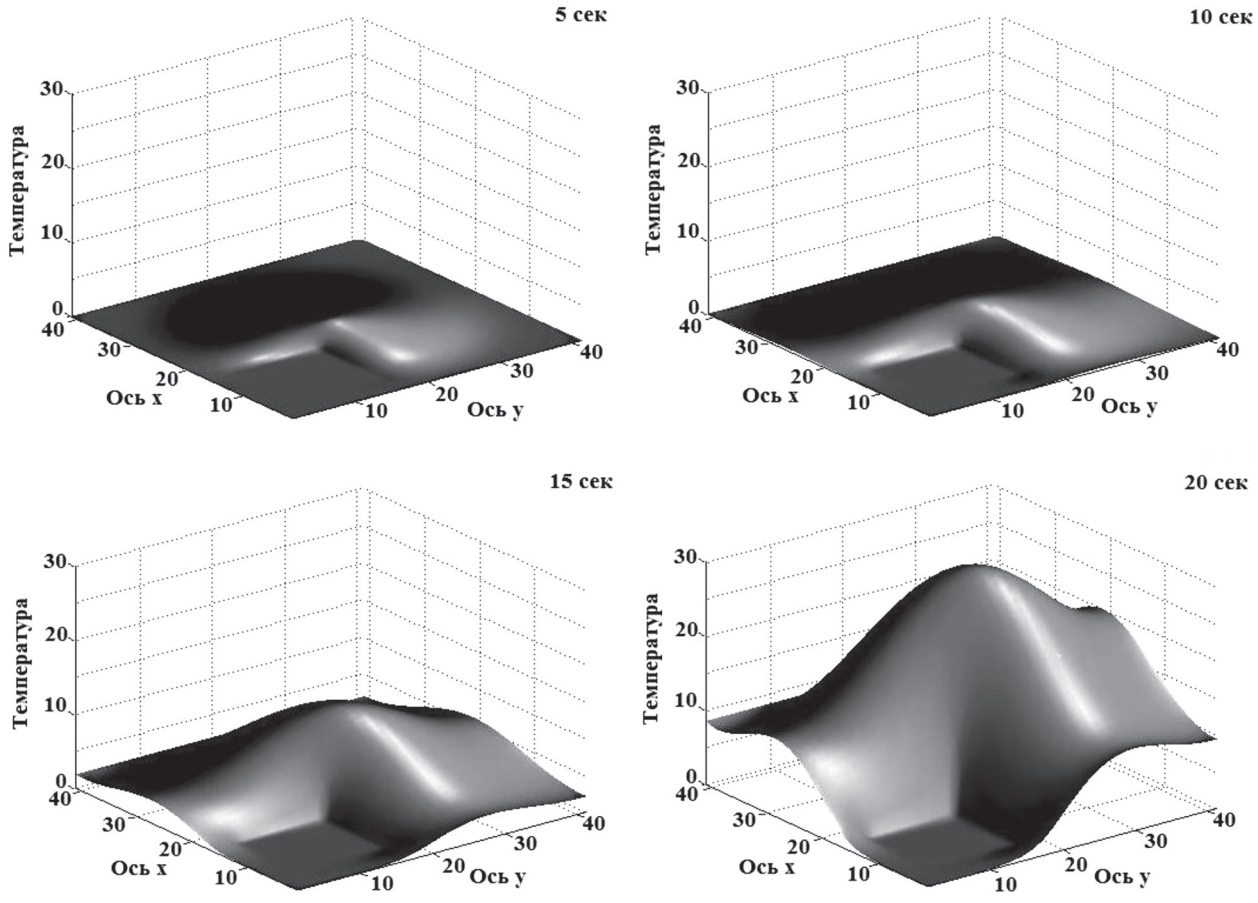

Рис. 3. Прогрев пластины при наличии источников и зоны аномальной теплопроводности

примерах коэффициент теплопроводности принимался постоянным, хотя в реальности он существенно зависит от температуры.

Пример 3.

Рассмотрим существенно нелинейную постановку задачи.

Во-первых, учтем изменение коэффициента теплопроводности при увеличении температуры. Для этого будем рассчитывать его следующим образом:

$$\lambda(T) = \lambda_0 \alpha T \quad (12),$$

где λ_0 – начальная теплопроводность материала; α – константа.

Во-вторых, учитывая, что в реальных условиях достаточно часто присутствуют эндотермические эффекты, введем вместо выражения (11) нелинейный закон изменения мощности объемного источника [14]:

$$\gamma(T) = kT\beta T^3 \quad (13),$$

где β – константа.

Здесь также предусмотрена отдача тепла в окружающую среду, температура которой принимается постоянной.

Результаты моделирования при k = 0,025; α = 0,05; β= 0,01 иллюстрируются рисунком 4.

Эти данные значительно отличаются от полученных ранее. Прежде всего, видно, что распространение теплоты обладает достаточно ярко выраженным широким фронтом. Кроме того, по мере развития процесса рост температуры пластины замедляется, и она стремится к предельному значению. В реальных процессах такая ситуация может иметь место, например, при выгорании топлива.

В целом можно отметить, что приведенные результаты, полученные с использованием дискретной динамической модели, вполне соответствуют принятым представлениям о протекании рассмотренных процессов.

Обсуждение и выводы

Описанный в данной работе дискретный подход представляется более простым в реализации с точки зрения вычислительных методов по срав-

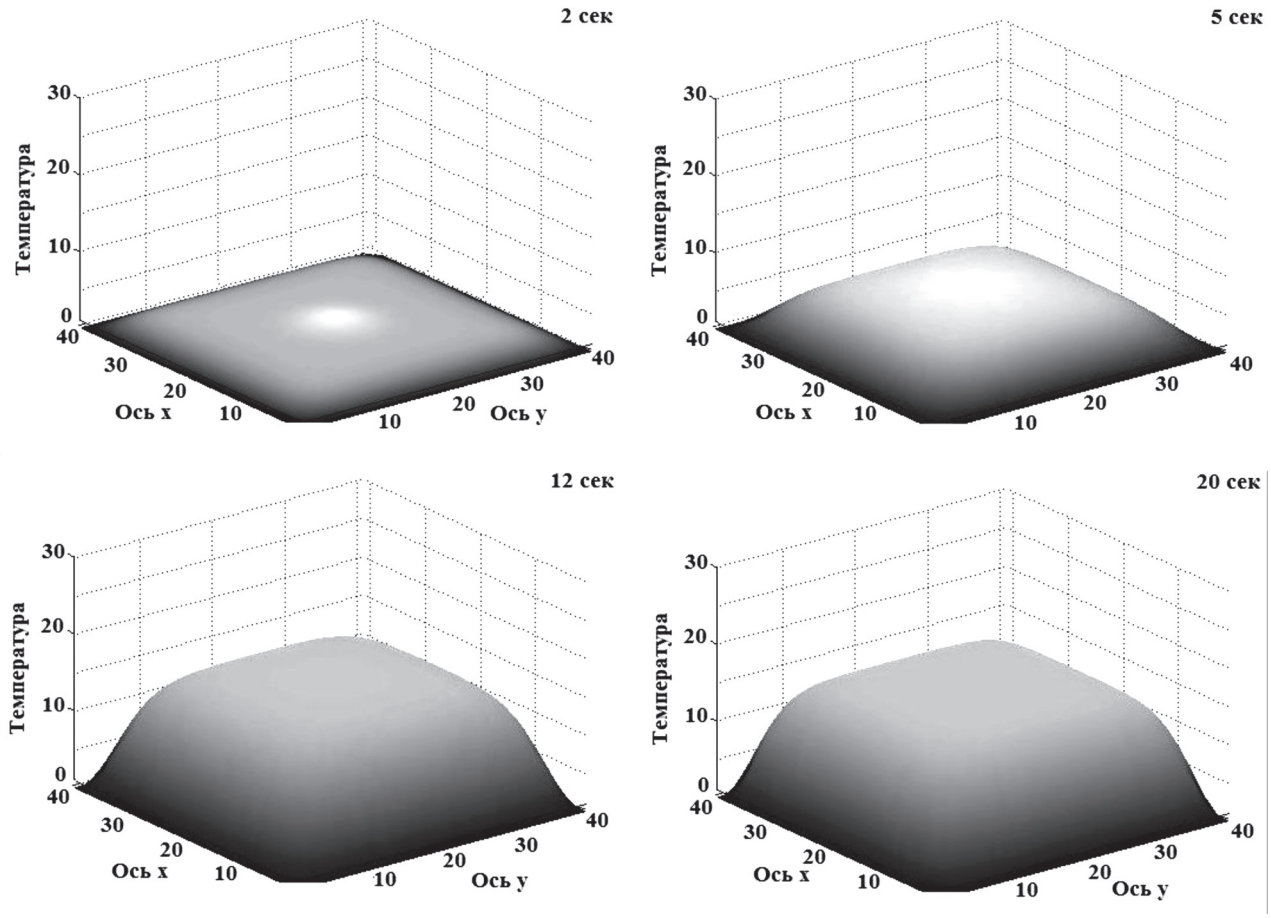

Рис. 4. Прогрев пластины с учетом эндотермических эффектов

нению с применением дифференциальных уравнений с частными производнымии физически более ясным.

Следует отметить, что помимо описания процессов переноса тепла по молекулярному механизму имеются исследования в области дискретного моделирования для анализа таких процессов, как диффузия [5, 7], конвективный теплоперенос [15, 16], течение жидкостей и газов [17–21], деформирование твердых тел [22–24]. Во всех случаях авторами получены весьма обнадеживающие результаты.

Принципиальное отличие между классическим и предлагаемым подходами состоит в том, что пошаговый характер функций переходов (1), (8), (10) позволяет выразить присущую большинству физико-химических процессов нелинейность и дискретность самым непосредственным образом. Ясность метода иллюстрируется приведенными примерами моделирования нелинейных процессов и процессов в неоднородных средах. В частности, при переходе от одного рассмотренного примера к другому, не приходилось изменять вычислительный алгоритм, а только вводились новые зависимости для вычисления встроенных функций.

Рассмотренные примеры призваны лишь отразить возможности дискретных моделей. Безусловно, для имитации процессов в реальных условиях следует переходить к объемным, трехмерным моделям. Однако такой переход вызовет лишь увеличение количества вычислений, при этом логика построения модели останется неизменной.

Резюмируя сказанное можно отметить следующие основные достоинства применения клеточных автоматов при моделировании химико-технологических процессов.

1. Клеточными автоматами может быть описана любая форма границ исследуемой области, при этом постановка задачи практически не усложняется.

2. Так как функции перехода вида (1), определяющие поведение отдельных клеток, являются локальными, не возникает проблем при описании изменения свойств веществ во времени и пространстве. Это же касается и моделирования процессов в неоднородных средах.

3. Применение клеточных автоматов существенно облегчает анализ разрывных решений на границах областей.

Таким образом, клеточные автоматы позволяют описывать сложные механизмы процесса, которые другими методами описать чрезвычайно трудно. С этих позиций дискретные подходы вообще и клеточные автоматы в частности можно рассматривать, как представление задачи, которая ставит своей целью разбиение большой задачи на множество дискретных, мелких задач таким образом, что формулировка задачи для одного элемента одновременно является формулировкой всей задачи для всех элементов.

Вполне естественно, что клеточные автоматы имеют и недостатки.

Главным из них следует считать необходимость использования значительных вычислительных ресурсов, поскольку для получения основательных результатов требуется большое количество элементов, составляющих клеточный автомат и, следовательно, заметный объем вычислений.

Однако данный недостаток может быть компенсирован и следующим обстоятельством. Модели в виде клеточных автоматов по своей идеологии и архитектуре идеально подходят для успешного использования специализированных компьютеров, использующих технологии параллельных вычислений.

Поэтому, учитывая стремительный рост возможностей средств компьютерной поддержки клеточные автоматы, в определенном смысле, можно рассматривать как базовые математические модели. Несмотря на то, что сами они весьма просты, из них, как из элементарных составляющих можно строить модели более сложных процессов и систем.

Литература

1. Процессы и аппараты химической технологии. В 5 т. Т. 1. Основы теории процессов химической технологии / Д.А. Баранов, А.В., Вязьмин, А.А. Гухман и др. ; Под. ред. А.М. Кутепова. – М.: Логос. 2000. – 480 с.
2. *Малинецкий Г.Г., Митин Н.А., Науменко С.А.* Нанобиология и синергетика. Проблемы и идеи. Часть 2 / Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша. 2005. 029. 31 с.
3. *Тоффоли Т., Марголус Н.* Машины клеточных автоматов: пер. с англ. М.: Мир. 1991. 280 с.
4. *Wolfram S.* A new kind of science. / Wolfram media inc, Champaign. IL. 2002. 1197 p.
5. *Бандман О.Л.* Программирование. 2001. №4. С. 1–17.
6. *Бобков С.П.* Изв. вузов. Химия и хим. технология. 2009. Т. 52. №3. С. 109–114.
7. *Бандман О.Л.* Прикладная дискретная математика. 2009. №3. С. 33–49.
8. *Wolfram S.* Reviews of Modern Physics. – July/ September 1983. V. 5. P. 601–610.
9. *Малинецкий Г.Г., Потапов А.Б., Подлазов А.В.* Нелинейная динамика: Подходы, результаты, надежды. М.: Озон. 2016. 280 с.
10. *Бусленко Н.П.* Моделирование сложных систем. – М.: Наука. 1978. 356 с.
11. *Бандман О.Л.* Системная информатика: Сб. науч. тр.: Новосибирск: Изд-во СО РАН. 2006. Вып. 10. С. 59–111.

12. *Бобков С.П.* Моделирование теплопроводности с использованием клеточных автоматов / Мизонов В.Е., Зайцев В.А., Бобков С.П и др. // Моделирование, расчет и оптимизация тепломассообменных процессов в текстильной промышленности: монография / Иван.гос. хим.-технол. ун-т; – Иваново. 2010. –Глава 4. С. 180–200.
13. *Бобков С.П., Чернявская А.С.* Вестник ИГЭУ. 2018. Вып. 3. С. 64–70.
14. *Курдюмов С.П., Малинецкий Г.Г., Потапов А.Б., Самарский А.А.* Структуры в нелинейных средах // Компьютеры и нелинейные явления. – М.: Наука. 1988. Глава 1. С. 5–43.
15. *Чернявская А.С., Бобков С.П.* Вестник ИГЭУ. 2014. Вып. 4. С. 53–57.
16. *Чернявская А.С., Бобков С.П.* Изв. вузов. Химия и хим. технология. 2018. Т. 61. Вып. 2. С. 86–90.
17. Wolf-Gladrow D. Lattice-Gas Cellular Automata and Lattice Boltzmann Models: An Introduction / Editors: A. Dold, Heidelberg, F. Takens, Groningen, B. Teissier, Paris. 2005. 302 p
18. *Чернявская А.С., Бобков С.П.* Изв. вузов. Химия и хим. технология. 2013. Т. 56. Вып. 3. С. 92–95
19. *Бобков С.П., Соколов В.Л.* Изв. вузов. Химия и хим. технология. 2017. Т. 60. Вып. 2. С. 79–84.
20. *Бобков С.П., Чернявская А.С.* Вестник ИГЭУ. 2019. №3. С. 68–75.
21. *Бобков С.П., Чернявская А.С., Шергин В.В.* Моделирование и анализ информационных систем. 2019. 26(2). С. 256–266.
22. *Бобков С.П., Смирнов С.С.* Изв. вузов. Химия и хим. технология. 2010. Т. 53. Вып. 8. С.100–102.
23. *Полищук И.В., Бобков С.П.* Вестник ИГЭУ. 2014. Вып. 6. С. 71–74.
24. *Бобков С.П., Полищук И.В.* Изв. вузов. Химия и хим. технология. 2015. Т. 58. Вып. 4. С. 72–75.