Управляемые системы, ИМ,ИК СО АН СССР 1971 г. выпуск 10.
УДК.66,021,2..

ПОЛУАНАЛИТИЧЕСКИЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ ОБЫКНОВЕННЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ И УРАВНЕНИЙ В ЧАСТНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ПАРАБОЛИЧЕСКОГО ТИПА.

В.П.Гаевой

В процессе моделирования химических реакторов как с кипящим, так и с неподвижными слоями катализатора исследователю приходится неоднократно численно решать системы дифференциальных уравнений в обыкновенных либо в частных производных. Наиболее распространенным методом решения таких систем является метод конечных разностей. Он довольно прост и удобен для реализации на ЭЦВМ. Однако существенным недостатком этого метода является неизбежно большое число шагов по пространственным и временной переменным, что резко снижает его эффективность: увеличивает необходимый объем оперативной памяти, значительно удлиняет время счета на ЭЦВМ, а порой делает этот метод совершенно непригодным. Поэтому разработка эффективных методов численного решения дифференциальных уравнений на ЭЦВМ для вычислителя является задачей первостепенной важности.

В данной статье предлагается полуаналитический метод решения дифференциальных уравнений в обыкновенных и частных производных. Метод прост и удобен для программирования. По сравнению с методом конечных разностей требует на порядок меньшего числа шагов по пространственным и временной переменным, значительно сокращает время счета на ЭЦВМ и применим там, где применение метода конечных разностей затруднительно либо совершенно невозможно.

В первой части статьи предлагается полуаналитический метод решения уравнений вида:

$$a\frac{d^2u}{d\xi^2} + b\frac{du}{d\xi} - cu + f(\xi) = 0. \qquad /1/$$

Это уравнение характерно тем, что численное решение большого класса задач в химической технологии в конечном счете сводится к решению системы таких уравнений.

Во второй части предлагается метод сведения уравнений в частных производных к системе уравнений типа /1/. Введение новой искомой переменной

$$u = \frac{u^{k+1} + u^k}{2},$$

где

$$u^k = u(\xi, k\Delta t),\ u^{k+1} = u(\xi, (k+1)\Delta t)$$

позволяет получить аппроксимацию второго порядка по Δt, что в сравнении со схемами первого порядка, предложенными в [1, 2], дает возможность увеличить шаг по времени, делает схему более точной,

сокращает время счета на ЭЦВМ.

В третьей части рассмотрены алгоритмы счета для некоторых конкретных задач химической технологии.

§ I. Обыкновенные линейные дифференциальные уравнения

Прежде чем перейти к анализу общего вида уравнения /I/, дадим метод решения частного, но важного случая $a = 0$. Тогда уравнение /I/ вырождается в уравнение первого порядка и граничные условия оставятся только в одной точке:

$$u|_{\xi=0} = c .$$

Решение такой задачи имеет вид:

$$u = \left(c + \int_0^{\xi} e^{\lambda\eta} f_1(\eta)\,d\eta\right) e^{-\lambda\xi}, \qquad /2/$$

где

$$\lambda = -\frac{c}{b}\,; \quad f_1 = \frac{f(\eta)}{b} .$$

Для вычисления интеграла /2/ выбираем разбиение

$$\xi_1 = 0,\ \xi_2, \ldots, \xi_i, \xi_{i+1}, \ldots$$

обозначим

$$\Delta\xi_i = \xi_{i+1} - \xi_i\,; \quad u_i = u(\xi_i),\ f_i = f_1(\xi_i) .$$

Перепишем формулу /2/ для u_{i+1} следующим образом:

$$u_{i+1} = \left(c + \int_0^{\xi_{i+1}} e^{\lambda\eta} f_1(\eta)\,d\eta\right) e^{-\lambda\xi} =$$

$$= u_i e^{-\lambda\Delta\xi_i} + e^{-\lambda\xi_{i+1}} \int_{\xi_i}^{\xi_{i+1}} e^{\lambda\eta} f_1(\eta)\,d\eta .$$

На каждом интервале $\xi_i \le \eta \le \xi_{i+1}$ заменим функцию $f_1(\eta)$ линейной

$$f_i = \frac{\eta - \xi_i}{\Delta\xi_i}\,(f_{i+1} - f_i) .$$

Тогда интегралы, входящие в выражение для u_{i+1}, вычисляются по частям. Для вычисления u_i получаем следующую рекуррентную формулу:

$$u_i = c$$

$$u_{i+1} = u_i d_i + A_{1,i} f_i + A_{2,i} f_{i+1} \quad (i = 1, 2, \ldots), \qquad /4/$$

где

$$d_i = \exp(-\lambda\Delta\xi_i),$$

$$A_{1,i} = -\frac{d_i}{\lambda} + \frac{(1 - d_i)}{\lambda^2\Delta\xi_i} ,$$

$$A_{2,i} = \frac{1}{\lambda} - \frac{(1-d_i)}{\lambda^2 \Delta \xi_i},$$

В случае,когда $a > 0$, общее решение уравнения /I/ для интервала $0 \le \xi \le 1$ запишется в виде:

$$u(\xi) = \mathcal{J}_1(\xi) + \mathcal{J}_2(\xi) + C_1 e^{\lambda_1 \xi} + C_2 e^{-\lambda_2(1-\xi)}, \qquad /6/$$

где

$$\mathcal{J}_1(\xi) = \frac{1}{a(\lambda_2-\lambda_1)} e^{\lambda_1 \xi} \int_0^{\xi} e^{-\lambda_1 \eta} f(\eta) d\eta,$$

$$\mathcal{J}_2(\xi) = \frac{1}{a(\lambda_2-\lambda_1)} e^{\lambda_2 \xi} \int_{\xi}^{1} e^{-\lambda_2 \eta} f(\eta) d\eta,$$

λ_1, λ_2 - корни характеристического уравнения $\lambda^2 a + \lambda b - c = 0$;

$$\lambda_1 = \frac{-b - \sqrt{b^2+4ac}}{2a}; \quad \lambda_2 = \frac{-b + \sqrt{b^2+4ac}}{2a}$$

По предположению $a > 0, c \geqslant 0$; поэтому корни λ_1, λ_2 действительные. Разбивая интервал $0 \le \xi \le 1$ точками $\xi_1 = 0, \ldots \xi_i, \ldots, \xi_{N+1}$ и проводя для $\mathcal{J}_1(\xi), \mathcal{J}_2(\xi)$ выкладки, аналогичные выкладкам, выполненным для выражения /2/, получим рекуррентные формулы для нахождения интегралов:

$$\mathcal{J}_{11} = 0,$$

$$\mathcal{J}_{1,i+1} = \mathcal{J}_{1,i} d_{1,i} + A_{1,i} f_i + A_{2,i} f_{i+1}, \qquad /7/$$
$$(i = 1, 2, \ldots, N)$$

где

$$d_{1,i} = \exp(\lambda_1, \xi_i),$$

$$A_{1,i} = \frac{1}{a(\lambda_2-\lambda_1)} \left[\frac{d_{1,i}}{\lambda_1} + \frac{1-d_{1,i}}{\lambda_1^2 \Delta \xi_i} \right],$$

$$A_{2,i} = \frac{1}{a(\lambda_2-\lambda_1)} \left[-\frac{1}{\lambda_1} - \frac{1-d_{1,i}}{\lambda_1^2 \Delta \xi_i} \right], \qquad /8/$$

$$\mathcal{J}_{2,N+1} = 0.$$

$$\mathcal{J}_{2,i} = \mathcal{J}_{2,i+1} d_{2,i} + B_{1,i} f_i + B_{2,i} f_{i+1}, \qquad /9/$$
$$(i = N, \ldots, 1)$$

где

$$d_{2,i} = \exp(-\lambda_2 \Delta \xi_i),$$

$$B_{1,i} = \frac{1}{a(\lambda_2-\lambda_1)} \left[\frac{1}{\lambda_2} - \frac{1-d_{2,i}}{\lambda_2^2 \Delta \xi_i} \right], \quad B_{2,i} = \frac{1}{a(\lambda_2-\lambda_1)} \left[-\frac{d_{2,i}}{\lambda_2} + \frac{1-d_{2,i}}{\lambda_2^2 \Delta \xi_i} \right]. \qquad /10/$$

Выражения /4/, /5/, /7/-/10/ выписаны для неравномерного разбиения.

В случае равномерного разбиения выражения /5/, /8/, /10/ не будут зависеть от индекса i .

Чтобы выделить из общего решения /6/ частное, следует задать граничные условия, из которых и найдутся неизвестные константы C_1, C_2 . Пусть заданы следующие граничные условия

$$\left.\frac{du}{d\xi}\right|_{\xi=0} = P_1(u - V_1) \quad , \quad \left.\frac{du}{d\xi}\right|_{\xi=1} = -P_2(u - V_2) . \qquad /11/$$

Подставляя общее решение /6/ в граничные условия /11/, получаем систему двух алгебраических уравнений относительно двух неизвестных C_1, C_2 :

$$\lambda_2 J_{2,1} + \lambda_1 C_1 + \lambda_2 e^{-\lambda_2} C_2 = P_1 (J_{2,1} + C_1 + C_2 e^{-\lambda_2} - V_2) ; \qquad /12/$$

$$\lambda_1 J_{1,N+1} + \lambda_1 e^{\lambda_1} C_1 + \lambda_2 C_2 = -P_2 (J_{1,N+1} + C_1 e^{\lambda_1} + C_2 - V_2) .$$

Введем следующие обозначения:

$$A_1 = \frac{\lambda_1 + P_2}{\lambda_1 - P_1} ; \; A_2 = \frac{\lambda_2 - P_1}{\lambda_2 + P_2} ; \; A_3 = \frac{\lambda_2 - P_1}{P_1 - \lambda_1} ; \qquad /13/$$

$$A_4 = \frac{-\lambda_1 - P_2}{\lambda_2 + P_2} ; \; B_1 = \frac{P_1}{P_1 - \lambda_1} ; \; B_2 = \frac{P_2}{P_2 + \lambda_2} ;$$

$$C = \left[1 - A_1 A_2 e^{\lambda_1 - \lambda_2} \right]^{-1} .$$

Решая методом исключения систему /12/ и используя обозначения /13/ получаем

$$C_1 = C \left[A_3 J_{2,1} + A_1 A_2 e^{-\lambda_2} J_{1,N+1} + B_1 V_1 + A_3 B_2 e^{-\lambda_2} V_2 \right] , \qquad /14/$$

$$C_2 = C \left[A_1 A_2 e^{\lambda_1} J_{2,1} + A_4 J_{1,N+1} + B_2 V_2 + A_4 B_1 e^{\lambda_1} V_1 \right] .$$

Если доплнительно ввести обозначения

$$D_{1,i} = e^{\lambda_1 \xi_i} ; \quad D_{2,i} = e^{-\lambda_2 (1 - \xi_i)} ,$$

то решение уравнения /1/ с граничными условиями /11/ запишется в виде, удобном для программирования

$$u_i = J_{2,i} + J_{2,i} + C_1 D_{1,i} + C_2 D_{2,i} \qquad (i = 1, \dots , N+1) .$$

§ 2. Решение одномерных стационарных и нестационарных задач

Стационарные задачи будем решать методом установления, т.е. к стационарным уравнениям дописываем производные по времени, начальные условия, и решаем их как нестационарные до установления $\frac{\partial u}{\partial t} = 0$.

Этот метод позволяет использовать одни и те же программы для расчета как стационарных, так и переходных процессов.

Рассмотрим нестационарную задачу.

$$a\frac{\partial^2 u}{\partial \xi^2} + b\frac{\partial u}{\partial \xi} + f(u) = \alpha\frac{\partial u}{\partial t},$$

$$\left.\frac{\partial u}{\partial \xi}\right|_{\xi=0} = P_1(u - v_1); \quad \left.\frac{\partial u}{\partial \xi}\right|_{\xi=1} = -P_2(u - v_2), \qquad /15/$$

$$u|_{t=0} = u_{нач}.$$

Выбираем шаг по времени Δt. Значения времени $t = k\Delta t$ будем называть k -м временным слоем. Обозначим через u^k значение $u(\xi, t)$ на k -м временном слое

$$u^k = u(\xi, k\Delta t).$$

Заменим производную по времени разностным отношением и выпишем систему обыкновенных уравнений, аппроксимирующую уравнение /15/ с точностью $(\Delta t)^2$.

$$a\frac{\partial^2}{\partial \xi^2}\left(\frac{u^{k+1}+u^k}{2}\right) + b\frac{\partial}{\partial \xi}\left(\frac{u^{k+1}+u^k}{2}\right) + f\left(\frac{u^{k+1}+u^k}{2}\right) = \frac{\alpha}{\Delta t}\left(u^{k+1} - u^k\right), \qquad /16/$$

$$\left.\frac{\partial u^{k+1}}{\partial \xi}\right|_{\xi=0} = P_1(u^{k+1} - v_1^{k+1}); \quad \left.\frac{\partial u^{k+1}}{\partial \xi}\right|_{\xi=1} = -P_2(u^{k+1} - v_2^{k+1}); \quad u^0 = u_{нач},$$

$$(k = 0, 1, 2, \ldots).$$

Эта система уравнений решается последовательно для $k = 1, 2, \ldots$. Если известны значения $u(\xi)$ для k -го временного слоя, то значения для $k + 1$ - временного слоя находим следующим образом:

Введем новую искомую величину $\bar{u} = \dfrac{u^{k+1} + u^k}{2}$, подставив ее в /16/, получим уравнение:

$$a\frac{d^2\bar{u}}{d\xi} + b\frac{d\bar{u}}{d\xi} - \frac{2\alpha}{\Delta t}\bar{u} = -\frac{2\alpha}{\Delta t}u^k - f(\bar{u}),$$

$$\left.\frac{d\bar{u}}{d\xi}\right|_{\xi=0} = P_1(\bar{u} - \bar{v}_1); \quad \left.\frac{d\bar{u}}{d\xi}\right|_{\xi=1} = -P_2(\bar{u} - \bar{v}_2), \qquad /17/$$

Это уравнение нелинейно. Решаем его методом последовательных приближений. Выберем за нулевое приближение значение $\bar{u}^0 = u^k$, следующие приближения находятся решением линейного уравнения

$$a\frac{d^2\bar{u}^n}{d\xi^2} + b\frac{d\bar{u}^n}{d\xi} - \frac{2\alpha}{\Delta t}\bar{u}^n = -\frac{2\alpha}{\Delta t}u^k - f(\bar{u}^{n-1}). \qquad /18/$$

Здесь индекс n - номер приближения. Если обозначить

$$c = \frac{2\alpha}{\Delta t}, \quad f(\xi) = \frac{2\alpha}{\Delta t}u^k + f(\bar{u}^{n-1}),$$

то получим краевую задачу, совпадающую с краевой задачей /1/, /11/. Если для некоторых двух приближений $\bar{u}_i^{n-1}$, $\bar{u}_i^n$ будет выполнено неравенство $|\bar{u}_i^{n-1} - \bar{u}_i^n| \le \varepsilon$ для всех $i = 1, \ldots, N+1$ / ε - заранее выбранная величина/, то полагаем $\bar{u}_i = \bar{u}_i^n$ и находим

$$u_i^{k+1} = 2\bar{u}_i^n - u_i^k.$$

После этого переходим к расчету следующего временного слоя. Доказательство устойчивости, сходимости и оценка погрешности счета описанного метода даны в работе [3]. Многомерные задачи сводятся к одномерным методам расщепления переменных /метод дробных шагов/[4].

§ 3. Применение полуаналитического метода для расчета нестационарных процессов на пористом зерне катализатора

Математическое описание переходных режимов для пористого зерна катализатора /зерно - неравнодоступная пластинка/ при протекании одной необратимой реакции имеет вид:

$$\frac{\partial^2 x}{\partial \rho^2} + \varphi^2 f(x,\theta) = \alpha \frac{\partial x}{\partial t'} ,$$
$$\frac{\partial^2 \theta}{\partial \rho^2} + \varphi^2 \varphi \Delta\theta_{a\partial} f(x,\theta) = \frac{\partial \theta}{\partial t'} . \qquad /19/$$

Граничные и начальные условия:

$$\left.\frac{\partial x}{\partial \rho}\right|_{\rho=0} = Bi_{M1}(x - x_0); \quad \left.\frac{\partial x}{\partial \rho}\right|_{\rho=1} = -Bi_{M2}(x - x_0);$$
$$\left.\frac{\partial \theta}{\partial \rho}\right|_{\rho=0} = Bi_{T1}(\theta - \theta_1); \quad \left.\frac{\partial \theta}{\partial \rho}\right|_{\rho=1} = -Bi_{T2}(\theta - \theta_0);$$
$$x'(\rho, t')\big|_{t'=0} = x^0(\rho); \quad \theta(\rho, t')\big|_{t'=0} = \theta^0(\rho),$$

где

$$\rho = \frac{r}{R}; \quad \psi = R_0 \frac{K}{D_{эф}}; \quad t' = \alpha \frac{D_{эф} \cdot t}{\varepsilon_3 \cdot R_0^2};$$
$$\alpha = \frac{\varepsilon_3}{\beta \varphi}; \quad \beta = \frac{C_K}{C_p}; \quad \varphi = \frac{D_{эф} C_p}{\lambda_{эф}};$$
$$\Delta\theta_{a\partial} = \frac{q \cdot C_0}{C_p} \cdot \frac{E}{R T_0^2}; \quad f(x,\theta) = (1 - x)\exp(\theta/(1 + b\theta));$$
$$b = \frac{R T_0}{E}; \quad K = K_0 \exp\left(-\frac{E}{R T_0}\right);$$
$$Bi_M = \frac{\beta R_0}{D_{эф}}; \quad Bi_T = \frac{\alpha R_0}{\lambda_{эф}}; \quad \theta = \frac{(T - T_0)E}{R T_0^2};$$

X_0, X - степень превращения в потоке и в зерне катализатора;
T_0, T - температура в потоке и в зерне катализатора;
R - универсальная газовая постоянная;
ε_3 - пористость зерна;
R_0 - половина толщины пластинки;
r - текущая координата зерна;
$\lambda_{эф}, D_{эф}$ - эффективные коэффициенты теплопроводности и диффузии;
α, β - коэффициенты тепло- и массообмена;
E - энергия активации;
q - тепловой эффект реакции;

t - время.

Обозначим через Δt шаг по временной координате. Значение $t = k\Delta t$ /где k = 0,1,2,..../ будем называть k -м временным слоем. Заменив производные по времени разностными отношениями, выпишем систему обыкновенных дифференциальных уравнений, аппроксимирующую систему /I/ с точностью Δt^2.

$$\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}\left(\frac{x^{k+1}+x^k}{2}\right)+\varphi^2 f\left(\frac{x^{k+1}+x^k}{2},\frac{\theta^{k+1}+\theta^k}{2}\right)=\alpha\frac{x^{k+1}-x^k}{\Delta t};$$

$$\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}\left(\frac{\theta^{k+1}+\theta^k}{2}\right)+\varphi\varphi\Delta\theta_{a\partial} f\left(\frac{x^{k+1}+x^k}{2},\frac{\theta^{k+1}+\theta^k}{2}\right)=\frac{\theta^{k+1}-\theta^k}{\Delta t};\qquad /20/$$

$$\left.\frac{\partial x^{k+1}}{\partial\rho}\right|_{\rho=0}=B_{iM1}(x^{k+1}-x_0);\quad \left.\frac{\partial x^{k+1}}{\partial\rho}\right|_{\rho=1}=-B_{iM2}(x^{k+1}-x_0);$$

$$\left.\frac{\partial\theta^{k+1}}{\partial\rho}\right|_{\rho=0}=B_{iT1}(\theta^{k+1}-\theta_0);\quad \left.\frac{\partial\theta^{k+1}}{\partial\rho}\right|_{\rho=1}=B_{iT2}(\theta^{k+1}-\theta_0);$$

$$x^0=x^0(\rho),\quad \theta^0=\theta^0(\rho),$$

где $x^k=x(\rho,k\Delta t)$; $\theta^k=\theta(\rho,k\Delta t)$.

Эта система уравнений решается последовательно для k = 0,1,2,... Если известны значения x, θ для k -го временного слоя, то значения x, θ для k + I - временного слоя находятся решением двух обыкновенных дифференциальных уравнений /20/. Для удобства вычислений введем искомые переменные

$$u=\frac{x^{k+1}+x^k}{2};\quad v=\frac{\theta^{k+1}+\theta^k}{2}.$$

Из системы /20/ следует, что $u(\rho)$ и $v(\rho)$ удовлетворяют следующим двум уравнениям:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial\rho^2}+\varphi^2 f(u,v)-\frac{2\alpha}{\Delta t}u=-\frac{2\alpha}{\Delta t}x^k;$$

$$\frac{\partial^2 v}{\partial\rho^2}+\varphi^2\varphi\,\Delta\theta_{a\partial} f(u,v)-\frac{2}{\Delta t}v=-\frac{2}{\Delta t}\theta^k;\qquad /21/$$

с граничными условиями:

$$\left.\frac{du}{d\rho}\right|_{\rho=0}=B_{iM1}(u-x_0);\quad \left.\frac{du}{d\rho}\right|_{\rho=1}=-B_{iM2}(u-x_0);\qquad /22/$$

$$\left.\frac{dv}{d\rho}\right|_{\rho=0}=B_{iT1}(v-\theta_0);\quad \left.\frac{dv}{d\rho}\right|_{\rho=1}=-B_{iT2}(v-\theta_0);$$

Таким образом, мы свели исходную задачу к решению на каждом временном слое двух обыкновенных дифференциальных уравнений, каждое из которых совпадает с уравнением /17/. Решаем их методом последовательных приближений /18/, за нулевое приближение возьмем $u^0=x^k$; $v^0=\theta^k$. Следующие приближения находятся решением системы уравнений:

$$\frac{d^2u^n}{d\rho^2}-\frac{2\alpha}{\Delta t}u^n=-\frac{2\alpha}{\Delta t}\left(x^k+\frac{\Delta t}{2\alpha}\varphi^2 f(u^{n-1},v^{n-1}\right);$$
$$\frac{d^2v^n}{d\rho^2}-\frac{2}{\Delta t}v^n=-\frac{2}{\Delta t}\left(\theta^k+\frac{\Delta t}{2}\varphi^2\varphi_\Delta\theta_{a\partial}f(u^{n-1},v^{n-1}\right); \qquad /23/$$

$$\left.\frac{du^n}{d\rho}\right|_{\rho=0}=P_{M1}(u^n-x_0);\ \left.\frac{du^n}{d\rho}\right|_{\rho=1}=-P_{M2}(u^n-x_0);$$
$$\left.\frac{dv^n}{d\rho}\right|_{\rho=0}=P_{T1}(v^n-\theta_0);\ \left.\frac{dv^n}{d\rho}\right|_{\rho=1}=-P_{T2}(v^n-\theta_0); \qquad /24/$$

где введены обозначения:

$$P_{M1}=Bi_{M1},\ P_{M2}=Bi_{M2},\ P_{T1}=Bi_{T1},\ P_{T2}=Bi_{T2}.$$

Приведем стандартный алгоритм для нахождения решения уравнений /23/, /24/.

Вычислить константы:

$$a=\sqrt{\frac{2\alpha}{\Delta t}}\ ;\quad D=e^{-a\Delta\xi}$$

Насчитать прогоночные коэффициенты:

$$D_{1,1}=1\quad D_{1,i+1}=D_{1,i}\cdot D\ (i=1,\dots,N)$$
$$D_{2,N+1}=1\quad D_{2,i}=D_{2,i+1}\cdot D\ (i=N,\dots,1)$$

Вычислить константы:

$$A_1=-\frac{D}{2}+\frac{1-D}{2a\Delta\xi}\ ;\quad A_2=\frac{1}{2}-\frac{1-D}{2a\Delta\xi}$$

Вычислить интегралы.

$$J_{1,1}=0;\ J_{1,i+1}=J_{1,i}D+A_1f_1+A_2f_{i+1}\ (i=1,\dots,N);$$
$$J_{2,N+1}=0;\ J_{2,i}=J_{2,i+1}\cdot D+A_2f_i+A_1f_{i+1}\ (i=N,\dots,1).$$

Вычислить константы:

$$C_1=C\left[A_3J_{2,1}+A_1A_2e^{-a}J_{1,N+1}+B_1V_1+A_3B_2e^{-a}V_2\right];$$
$$C_2=C\left[A_1A_2e^{-a}J_{2,1}+A_4J_{1,N+1}+B_2V_2+A_4B_1e^{-a}V_1\right].$$

Вычислить решение:

$$u_i=J_{1,i}+J_{2,i}+C_1D_{1,i}+C_2D_{2,i}$$

Аналогично вычисляется v_i .

После того, как на одном временном шаге для всех i будут выполнены неравенства

$$|u_i^n-u_i^{n-1}|\le\varepsilon_1,\ |v_i^n-v_i^{n-1}|\le\varepsilon_2,$$

/где ε_1 и ε_2 – заранее заданные малые величины/, насчитываются величины x^{k+1} и θ^{k+1} по формулам:

$$x^{k+1}=2u^n-x^k\ ;\quad \theta^{k+1}=2v^n-\theta^k$$

а затем переходят к расчету x и θ на следующем временном слое.

Параллельно с расчетами переходных режимов полуаналитическим

методом проводились аналогичные расчеты по методу конечных разностей [2]. В качестве примера был рассчитан на ЭЦВМ "МИНСК-2" стационарный переходный режим при следующих параметрах:

$$\varphi = 0{,}3;\quad Bi_{M1} = Bi_{M2} = 5;\quad Bi_{T1} = Bi_{T2} = 0{,}3\quad \varphi = 0{,}06;$$

$$\Delta\theta_{ad} = 10;\ \varepsilon_3 = 0{,}5;\ \beta = 100.$$

θ_0 изменялось с 0 на I.

Для полуаналитического метода:

$$\Delta\xi = \frac{1}{20};\ \Delta t = 0{,}05.$$

Для разностной схемы:

$$\Delta\xi = \frac{1}{160};\ \Delta t = 0{,}0008.$$

При этом полуаналитический метод давал погрешность, не превышающую 0,7% на всем временном интервале, а конечноразностный метод - I,5%. Для расчета переходного режима требовалось полуаналитическим методом I2 минут, конечноразностным - I5 часов. Следует также заметить, что в рассчитанном режиме не наблюдалось больших градиентов температур и концентраций по зерну. При наличии больших градиентов расчет нестационарных процессов по методу конечных разностей на ЭЦВМ "МИНСК - 2" затруднителен, так как требует большого числа шагов по пространственной и временной переменным, тогда как полуаналитический метод требует не более 50 шагов по ξ и времени счета не более I - 2 часов.

Поступила в редакцию 7.9.I97I г.

Литература

I. В.А.Кузин. Сб. Моделирование и оптимизация каталитических процессов, М, "Наука", I965 г. стр. 68.

2. В.А.Кузин. Труды Всесоюзной конференции по химическим реакторам. Новосибирск, I965.

3. В.П.Гаевой. Труды IУ Всесоюзной конференции по химическим реакторам, I97I /в печати/.

4. Н.Н.Яненко. Методы дробных шагов решения многомерных задач математической физики, "Наука", Новосибирск, I967.