

УДК 517.9:66.095.5

К РАСЧЕТУ ЭКЗОТЕРМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ  
ПЕРВОГО ПОРЯДКА НА ЗЕРНЕ КАТАЛИЗАТОРА

Р.Г. Лукьянова, С.И. Фадеев, В.С. Шеплев

Предлагается численный метод решения следующей краевой задачи, моделирующей установившуюся реакцию первого порядка на зерне катализатора:

$$\begin{aligned} C''(s) + mC'(s)/s &= Q^2 C(s) \exp[T(s)/(1+T(s)/\gamma)] , \\ T''(s) + mT'(s)/s &= -\theta_0 Q^2 C(s) \exp[T(s)/(1+T(s)/\gamma)] , \end{aligned} \quad (1)$$

$$\begin{aligned} C'(0) = T'(0) &= Q , \\ C'(1) = Sh(1-C(1)), \quad T'(1) &= -NuT(1) . \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь  $C, T$  и  $s$  - соответственно безразмерные концентрация, температура и расстояние от центра симметрии зерна;  $Q$  - модуль Тиле;  $\gamma$  - коэффициент энергии активации;  $\theta_0 = \beta \gamma$ , где  $\beta$  - коэффициент тепловыделения;  $m = 0, 1, 2$ , что соответствует плоской, цилиндрической и сферической симметриям. В граничные условия (2) при  $s=1$  входят параметры:  $Sh$  - число Шервуда и  $Nu$  - число Нуссельта,  $Sh \geq Nu$ .

Краевая задача (1)-(2), характерной особенностью которой является возможность существования нескольких решений, рассматривалась в ряде работ, где исследовалась качественная сторона проблемы и приводились результаты численного построения всех решений (см., например, [1-3]). Интерес к численным методам связан с математическим моделированием более сложных процессов, включающих реакцию на зерне катализатора.

I. Редукция проблемы к последовательности решений нелинейных краевых задач

Как известно, краевую задачу (I)-(2) можно свести к краевой задаче, относительно только температуры  $T$ , исключив концентрацию  $C$  из теплового баланса. Тогда

$$C = \frac{1}{\theta_0} (\theta - T), \quad (3)$$

$$T''(s) + \eta T'(s)/s = -Q^2(\theta - T(s)) \exp[T(s)/(1 + T(s)/\gamma)], \quad (4)$$

$$T'(0) = 0, \quad T'(1) = -NuT(1),$$

где

$$\theta = \theta_0 + \left(1 - \frac{Nu}{Sh}\right) T(1). \quad (5)$$

Вместо  $T$  введем в рассмотрение функцию  $y(s) = T(s)/\theta$ . В результате задача (3)-(5) примет вид:

$$C = \frac{\theta}{\theta_0} (1 - y),$$

$$y''(s) + \eta y'(s)/s = -Q^2(1 - y(s)) \exp[\theta y(s)/(1 + \theta y(s)/\gamma)], \quad (6)$$

$$y'(0) = 0, \quad y'(1) = -Nu y(1),$$

$$\theta = \theta_0 / \left[1 - \left(1 - \frac{Nu}{Sh}\right) y(1)\right]. \quad (7)$$

Ряд свойств функции  $y(s)$  обнаруживается из ее интегрального представления [4]:

$$y(s) = Q^2 \int_0^1 G(s,t) F[y(t)] dt, \quad F(y) = (1-y) \exp[\theta y/(1+\theta y/\gamma)].$$

Здесь  $G(s,t)$  - функция Грина, положительная в области определения:

$$G(s,t) = \begin{cases} t^\eta \Lambda(t), & s \leq t, \\ t^\eta \Lambda(s), & s > t, \end{cases}$$

$$A(t) = \begin{cases} 1/Nu - \ln t, & m = 1, \\ [t^{1-m} - 1 + (m-1)/Nu]/(m-1), & m \neq 1. \end{cases}$$

Отсюда следует, что производная

$$y'(s) = -\frac{Q^2}{s^m} \int_0^s t^m F[y(t)] dt$$

отрицательна при  $s > 0$ , если  $F$  - положительная функция. Следовательно,  $y(s)$  будет положительной функцией, монотонно убывающей от  $y^0 = y(0)$  до  $y^1 = y(1)$ , если  $y^0 < 1$ , так как в этом случае  $F > 0$ .

Другой особенностью рассматриваемой проблемы является то, что при заданном  $0 < y^0 < 1$  из решения задачи однозначно определяются параметры  $Q$  и  $\theta$ , в то время как при заданном  $Q$  возможно либо одно, либо несколько решений краевой задачи (6)-(7), отличающихся различными значениями  $y^0$ . Зависимость  $Q$  от  $T^0$ ,  $T^0 = \theta y^0$ , будем называть уравнением бифуркационной кривой, вид которой определяет число решений краевой задачи. Этой же цели отвечает график зависимости фактора эффективности  $\eta$  от  $Q$ , где

$$\eta = (m+1) \int_0^1 t^m C \exp[T/(1+T/\gamma)] dt = \frac{(m+1)}{\theta_0 Q^2} Nu T(1).$$

Численное решение краевой задачи (6)-(7) будем строить при заданном  $y^0$ , значения  $Q$  и  $\theta$  определяются в ходе решения. Используя свойство монотонности функции  $y(s)$ , нетрудно получить двусторонние оценки  $\theta$ : так как  $y^0 > y^1 > 0$ , то

$$\theta_0 = z_0 < \theta < z_* = \theta_0 / \left[ 1 - \left( 1 - \frac{Nu}{Sh} \right) y^0 \right]. \quad (8)$$

Пусть  $\theta \in [z_0, z_*]$ . Из численного решения задачи (6) найдем значение для  $y^1 = y(1; \theta)$  и вычислим правую часть равенства

$\theta = \varphi(\theta) \equiv \theta_0 + \left( 1 - \frac{Nu}{Sh} \right) \theta y(1; \theta)$ . Последнее можно рассматривать как трансцендентное относительно  $\theta$  уравнение вида  $\theta = \varphi(\theta)$  с правой частью, определяемой из решения краевой задачи (6), и с изве-

стными границами искомого корня. Тем самым численное решение краевой задачи (6)-(7) сводится к последовательности решений краевых задач, задаваемой выбранным методом отыскания корня трансцендентного уравнения.

В качестве такого метода целесообразно использовать комбинацию методов Вегстейна ("быстрая" процедура) и деления отрезка пополам ("надежная" процедура) [5,6]. Идея комбинирования состоит в следующем. Пусть известны границы  $z_0^{(k)}$  и  $z_*^{(k)}$   $k$ -го приближения  $\theta_k$  искомого корня  $\theta$ :  $z_0^{(k)} \leq \theta_k \leq z_*^{(k)}$ ,  $k=1, 2, \dots$ ;  $\theta_0$  - начальное приближение. Используя формулы метода Вегстейна, вычисляем  $\vartheta$ :

$$\vartheta = \begin{cases} \varphi(\theta_0), & k=0, \\ \theta_k + [\varphi(\theta_k) - \varphi_k] / \left[ 1 - \frac{\varphi(\theta_k) - \varphi(\theta_{k-1})}{\theta_k - \theta_{k-1}} \right], & k > 0, \end{cases}$$

и определяем очередное приближение:

$$\theta_{k+1} = \begin{cases} \vartheta, & \text{если } \vartheta \in [z_0^{(k)}, z_*^{(k)}]; \\ (z_0^{(k)} + z_*^{(k)})/2, & \text{в противном случае.} \end{cases}$$

Нахождение корня гарантировано, если  $\varphi(\theta)$  - непрерывная функция.

За начальное приближение корня выберем левую границу (8). Если краевая задача (6)-(7) решается для заданной монотонно возрастающей последовательности  $y^0$ , то начальному приближению можно присвоить значение  $\theta$ , соответствующее предыдущему  $y^0$ , поскольку, как показывают вычисления,  $\theta$  растет с увеличением  $y^0$ .

В дальнейшем остановимся на решении краевой задачи (6) с заданными  $y^0$  и  $\theta$ . Для удобства вычислений преобразуем нелинейную часть дифференциального уравнения и представим задачу в виде:

$$y''(s) + \sigma y'(s)/s = -\sigma^2(1-y(s)) \exp[-B(y^0 - y(s))/(1+ay(s))], \quad (9)$$

$$y'(0) = 0, \quad y'(1) = -B\sigma y(1),$$

где  $a = \theta/\gamma$ ,  $b = \theta/(1+ay^0)$ ,  $\sigma^2 = Q^2 \exp(by^0)$ .

Рассмотрим два случая: а)  $y^0$  "не слишком" близко к единице; б)  $y^0$  "практически совпадает" с единицей. Для каждого из этих случаев предлагается численный способ решения краевой задачи (9).

## 2. Нелинейная краевая задача.

### Задача Коши и метод последовательных приближений

Поскольку правая часть уравнения (9) не зависит от  $s$ , то, заменив переменную  $x = \sigma s$ , сведем решение краевой задачи (9) к решению задачи Коши:

$$\begin{aligned} x > 0, \quad y''(x) + \mu y'(x)/x &= -(1 - y(x)) \exp[-b(y^0 - y(x))/(1 + ay(x))], \\ y(0) = y^0, \quad y'(0) = 0, \quad y''(0) &= -(1 - y^0)/(a + 1). \end{aligned} \quad (10)$$

Очевидно, что решение задачи Коши (10) совпадает с решением краевой задачи (9), если в ходе интегрирования будет найдено  $x$  из условия, определяющего  $\sigma$ :

$$\sigma = x, \quad g(x) = xy'(x) + \mu y(x) = 0. \quad (11)$$

Действительно, так как  $g(0) = \mu y^0 > 0$ , а в силу монотонности убывания  $y(x)$  найдется  $x$ , при котором  $g(x) = xy'(x) < 0$ , то существует  $x = \sigma$  такое, что  $g(\sigma) = 0$ .

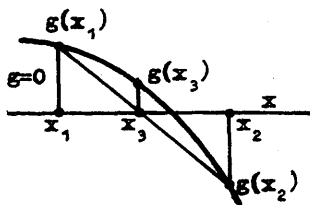


Рис. I

Процедуру вычисления  $\sigma$  поясним при помощи рис. I. Пусть, например, численное решение задачи Коши строится по формулам метода Рунге-Кутты с постоянным шагом  $h_0$  до тех пор, пока не окажется, что  $g(x_1) > 0$ , а  $g(x_2) < 0$ ,  $x_2 = x_1 + h_0$ . Тогда определяется шаг  $h_1 = x_3 - x_1 = h_0 g(x_1) / [g(x_1) - g(x_2)]$ , и в точке  $x_3$  вычисляется  $g(x_3)$ . Если  $g(x_3) > 0$ , то  $x_1$  присваивается значение  $x_3$ ,  $g(x_1)$  — значение  $g(x_3)$ ,  $h_0$  — значение  $h_1$  и вычисляются  $x_2$ ,  $x_2 = x_1 + h_0$ , и  $g(x_2)$ . В противном случае  $x_1$  и  $g(x_1)$  остаются неизменными,  $x_2$  присваивается значение  $x_3$ ,  $g(x_2)$  — значение  $g(x_3)$  и вычисляются  $x_3$  и  $g(x_3)$ . Процесс продолжается до тех пор, пока равенство (II) не будет выполнено с заданной точностью.

**ЗАМЕЧАНИЕ.** Выбор шага интегрирования  $h_0$  не столь очевиден, как это может показаться на первый взгляд. Если  $\theta_0$  порядка 10 или менее, то удовлетворительная точность вычислений достигается при  $h_0$  порядка 0,1. Погрешность при завышенном шаге интегрирования может проявиться в образовании ложных экстремумов бифуркационной кривой, хотя  $y(s)$ , численно найденные для задан-

ной последовательности значений  $y^0$ , по-прежнему принадлежат к классу монотонно убывающих функций.

Рассмотрим простой итерационный способ решения краевой задачи (9). Пусть  $u(s)$  и  $\phi$  — известные приближения  $y(s)$  и  $\sigma$ , причем  $u(0) = y^0$ . Воспользуемся обозначением

$$f(s) = (1 - u(s)) \exp[-b(y^0 - u(s))/(1 + a \cdot u(s))].$$

Очевидно, решение краевой задачи:

$$\begin{aligned} v''(s) + mv'(s)/s &= -\phi^2 f(s), \\ v'(0) = 0, \quad v'(1) &= -Nu v(1), \end{aligned} \quad (12)$$

качественно совпадает с  $y(s)$ , но, вообще говоря,  $v(0) \neq y^0$ .

За очередное приближение  $y(s)$  и  $\sigma$  возьмем  $w(s)$  и  $\omega$ :  $w(s) = Rv(s)$ ,  $\omega^2 = R\phi^2$ ,  $R = y^0/v(0)$ , т.е. решение краевой задачи:

$$\begin{aligned} w''(s) + mw'(s)/s &= -\omega^2 f(s), \\ w'(0) = 0, \quad w'(1) &= -Nu w(1), \end{aligned}$$

принимает в точке  $s=0$  заданное значение  $y^0$ . Итерационный процесс продолжается до тех пор, пока условие  $R=1$  не будет выполнено с заданной точностью. В качестве начального приближения можно взять, например,  $u(s) \equiv y^0$ ,  $\phi = 1$ . Если краевая задача решается для монотонно возрастающей последовательности значений  $y^0$ , то начальные приближения строятся из решений, соответствующих предыдущему  $y^0$ .

Вопрос сходимости предлагаемого метода последовательных приближений и определении области изменения параметров краевой задачи, при которых приближения сходятся, не изучен. Численный эксперимент показывает, что решение рассматриваемой краевой задачи может быть эффективно найдено методом последовательных приближений, если  $\theta_0$  не превышает значений порядка 10.

Отметим, что применение квазилинеаризации [7] усложняет метод последовательных приближений. В этом случае определение на каждой итерации приближения  $\sigma$  такого, что решение линейной краевой задачи принимало бы заданное значение  $y^0$  при  $s=0$ , в свою очередь требует организации итерационного процесса. Интерес к методам последовательных приближений связан с возможностью использования их для решения краевых задач типа (9) в многомерных областях.

Рассмотрим численное решение линейной краевой задачи (I2).  
Использованное для этой цели представление  $v(s)$  в истокообразном  
виде

$$v(s) = \phi^2 \int_0^1 G(s,t) f(t) dt$$

с вычислительной точки зрения не является экономичным, так как  
для вычисления  $v(s)$  в точках разбиения  $s_i$  отрезка  $[0, I]$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$ ,  $s_1 = 0$ ,  $s_n = 1$ , потребовалось бы затратить число опера-  
ций порядка  $n^2$ .

Среди других возможных методов с числом операций порядка  $n$   
остановимся на методе разностной прогонки [8]. С этой целью преоб-  
разуем дифференциальную краевую задачу к разностной, обратившись  
к методу сплайн-коллокации и выбрав в качестве базисных функций  
кубические В-сплайны [9, 10].

Согласно методу сплайн-коллокации, численное решение линей -  
ной краевой задачи ищется в виде кубического сплайна:

$$v(s) = \sum_{k=0}^{n+1} \alpha_k B_k(s),$$

где  $B_k(s)$  - кубические В-сплайны;  $\alpha_k$  - неопределенные коэффи-  
циенты. Здесь сохранено обозначение  $v(s)$  за численным решением.  
Ограничимся равномерным разбиением отрезка  $[0, I]$ :  $s_i = h(i-1)$ ,  
 $h = 1/(n-1)$ .

С точностью до малых порядка  $h^2$  дифференциальную краевую  
задачу заменим разностной относительно  $\alpha_k$ :

$$s = s_1, \quad \frac{\alpha_0 - 2\alpha_1 + \alpha_2}{h^2} + \frac{\phi^2 f(s_1)}{m+1} = 0,$$

$$s = s_i, \quad \frac{\alpha_{i-1} - 2\alpha_i + \alpha_{i+1}}{h^2} + \frac{m}{h(i-1)} \frac{\alpha_{i+1} - \alpha_{i-1}}{2h} + \phi^2 f(s_i) = 0,$$

$$1 < i < n+1.$$

При этом граничные условия преобразуются к виду:

$$\frac{\alpha_2 - \alpha_0}{2h} = 0, \quad \frac{\alpha_{n+1} - \alpha_{n-1}}{2h} = -Nu \frac{\alpha_{n-1} + 4\alpha_n + \alpha_{n+1}}{6}.$$

В результате имеем следующую систему линейных алгебраических уравнений относительно  $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{n+1}$ :

$$i = 1, \quad -\alpha_1 + \alpha_2 + \phi^2 h^2 \frac{f(s_1)}{2(m+1)} = 0,$$

$$1 < i < n+1, \quad \left[1 - \frac{m}{2(i-1)}\right] \alpha_{i-1} - 2\alpha_i + \left[1 + \frac{m}{2(i-1)}\right] \alpha_{i+1} + \phi^2 h^2 f(s_i) = 0, \quad (13)$$

$$i = n+1, \quad \left(\frac{hNu}{3} - 1\right) \alpha_{n-1} + \frac{4hNu}{3} \alpha_n + \left(\frac{hNu}{3} + 1\right) \alpha_{n+1} = 0.$$

Вид первого уравнения системы (13) подсказывает возможность преобразования первых  $n$  уравнений к виду:

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= \alpha_2 + \phi^2 h^2 p_1, \\ \alpha_2 &= \alpha_3 + \phi^2 h^2 p_2, \\ &\dots\dots\dots \\ \alpha_n &= \alpha_{n+1} + \phi^2 h^2 p_n, \end{aligned} \quad (14)$$

где  $p_i$  - прогоночный коэффициент, вычисляемый по формулам (прямой ход прогонки):

$$\begin{aligned} i = 1, \quad p_1 &= \frac{f(s_1)}{2(m+1)}, \\ i > 1 \quad p_i &= \frac{f(s_i) + (1-M_i)p_{i-1}}{1+M_i}, \quad M_i = \frac{m}{2(i-1)}. \end{aligned}$$

Для определения  $\alpha_{n+1}$  подставим выражения  $\alpha_{n-1}$  и  $\alpha_n$  в последнее уравнение системы (13). Получим

$$\alpha_{n+1} = \frac{h\phi^2}{2} [(1/3Nu - h/3)p_{n-1} + (1/3Nu - 5h/3)p_n].$$

Далее, из уравнений системы (14) последовательно вычисляем  $\alpha_n, \alpha_{n-1}, \dots, \alpha_1$  и  $\alpha_0 = \alpha_2$  (обратный ход прогонки). Одновременно с  $\alpha_i$  определяем  $v(s_i)$ :  $v(s_i) = \alpha_i + \phi^2 h^2 (p_{i-1} - p_i)/6$ .

Устойчивость описанного вычислительного процесса очевидна. Аналогичная организация прогонки возможна и при использовании метода сплайн-коллокации на неравномерной сетке. В этом случае для



устойчивости вычислений достаточно потребовать, чтобы шаг разбиения отрезка  $[0, 1]$  не возрастал в направлении к единице и не был "слишком велик" (см. с. 103).

### 3. Оценки. Асимптотическая формула для фактора эффективности $\eta$

Пусть для заданного  $y^0$  известно решение краевой задачи (6)–(7), в том числе найдены  $Q, \theta$  и  $y^1$ . Сопоставим его с решением следующей краевой задачи:

$$u''(s) + mu'(s)/s = -P^2(1 - u(s)), \quad u'(0)=0, \quad u'(1)=-Nu u(1), \quad (15)$$

где

$$P^2 = Q^2 \exp[\theta_+ y^0 / (1 + \theta_+ y^0 / \gamma)], \quad \theta < \theta_+ = \theta_0 / \left[ 1 - \left( 1 - \frac{Nu}{Sh} \right) y^0 \right].$$

Вычитая из равенств (15) соответствующие равенства (6), получаем для величины  $z(s) = u(s) - y(s)$  линейную краевую задачу:

$$z''(s) + mz'(s)/s = P^2 z(s) - \Phi(s), \quad z'(0)=0, \quad z'(1) = -Nu z(1), \quad (16)$$

где

$$\Phi(s) = Q^2(1-y) \left[ \exp \frac{\theta_+ y^0}{1 + \theta_+ y^0 / \gamma} - \exp \frac{\theta y}{1 + \theta y / \gamma} \right]$$

- положительная функция при  $s > 0$ . Из положительной определенности краевой задачи (16) следует, что  $u(s) > y(s) > 0$ . Очевидно,  $u(0) = y^0$  при  $Q_- < Q$ . Параметрическая зависимость  $Q_-$  от  $y^0$  определяется решением краевой задачи (15) и имеет вид:

$$Q_-^2 = P^2 \exp\left(-\frac{\theta_+ y^0}{1 + \theta_+ y^0 / \gamma}\right), \quad y^0 = u(0; P). \quad (17)$$

Обратимся далее к краевой задаче (15), в которой

$$P^2 = Q^2 \exp[\theta y^1 / (1 + \theta y^1 / \gamma)].$$

Так как в этом случае  $z(s) < 0$ , то  $u(1) = y^1$  при  $Q_+ > Q$ . Параметрическая зависимость  $Q_+$  от  $y^1$  имеет вид:

$$Q_+^2 = P^2 \exp\left(-\frac{\theta y^1}{1 + \theta y^1 / \gamma}\right), \quad y^1 = u(1; P). \quad (18)$$

Решение краевой задачи (15) выписывается в явном виде: при  $m=0$  и 2 - через экспоненциальные функции, а при  $m=1$  - через модифицированные функции Бесселя нулевого порядка. Если градиенты температуры малы (например, при  $Nu \rightarrow 0$ ), то формулы (17) и (18) могут быть использованы в качестве приближенного решения задачи (6)-(7).

При  $R \rightarrow \infty$  из формул (17), (18) следуют известные предельные соотношения:

$$\begin{aligned} y^1 \rightarrow y^0 \rightarrow 1, \quad \theta_+ \rightarrow \theta \rightarrow \theta_0 Sh / Nu, \\ Q_-^2 \rightarrow Q_+^2 \rightarrow Q^2 = P^2 \exp\left(-\frac{\theta_0 Sh}{Nu + \beta Sh}\right), \\ \eta \rightarrow \frac{(m+1)Sh}{Q^2}. \end{aligned}$$

Более точное описание предельной зависимости  $\eta$  от  $Q$  связано с интегрированием уравнения (6),  $m=0$ , в плоскости  $(y, y')$  (см. [2]). Имеем:

$$y'(1) = -Q \left[ 2 \int_{y^1}^{y^0} (1-y) \exp\left(\frac{\theta y}{1 + \theta y / \gamma}\right) dy \right]^{1/2} = -Nu y^1.$$

Полагая здесь  $y^0 = 1$  получаем параметрическое представление искомой зависимости (справедливой и для других  $m$  при  $y^1 \rightarrow 1$ ), в которой параметром является  $y^1$ :

$$\begin{aligned} \theta &= \left(1 - \frac{Nu}{Sh}\right) y^1 + \theta_0, \\ Q &= y^1 Nu / \left[ 2 \int_{y^1}^1 (1-y) \exp\left(\frac{\theta y}{1 + \theta y / \gamma}\right) dy \right]^{1/2}, \\ \eta &= \frac{(m+1)\theta}{\theta_0 Q^2} Nu y^1. \end{aligned} \tag{19}$$

#### 4. Предельный случай

Если  $y^0$  близко к единице, то решение краевой задачи (9) характеризуется образованием окрестности точки  $s = 0$ , где  $y(s)$  также близко к единице. Размер окрестности и параметр  $\sigma$  тем больше, чем ближе  $y^0$  к единице. Поэтому, начиная с достаточно большого  $\sigma$ , значение которого известно из решения краевой задачи (9), численное решение проблемы можно получить из рассмотрения следующей краевой задачи:

$$\begin{aligned}y''(s) + \sigma y'(s)/s &= -\sigma^2(1-y(s))\exp[-b(1-y(s))/(1+ay(s))], \\ y'(0) = 0, \quad y'(1) &= -Nu y(1), \quad Q^2 = \sigma^2 \exp(-b).\end{aligned}\tag{20}$$

Здесь  $\sigma$  - заданный параметр, а  $y(0) \approx 1$ . Правомочность такого подхода подтверждается тем, что существует область изменения  $y^0$ , близких к единице, где решение краевой задачи (9) со значением  $\sigma = \sigma(y^0)$  достаточно хорошо приближается решением краевой задачи (20) при том же  $\sigma$ .

Применительно к краевой задаче (20) рассмотрим метод после - довательных приближений, который тем ближе к процедуре квазилинеаризации, чем больше параметр  $\sigma$ . Пусть  $u(s)$  - известное приближение  $y(s)$ ,  $u(0) = 1$ . Построим численное решение линейной краевой задачи:

$$\begin{aligned}v''(s) + \sigma v'(s)/s &= -\sigma^2(1-u(s))\exp[-b(1-u(s))/(1+au(s))], \\ v'(0) = 0, \quad v'(1) &= -Nu v(1),\end{aligned}\tag{21}$$

и в качестве очередного приближения  $y(s)$  возьмем  $w(s)$ :  $w(s) = v(s)/v(0)$ . Начальным приближением может служить  $u(s) \equiv 1$ . Процесс продолжается до тех пор, пока максимальное отклонение  $w(s)$  от  $u(s)$  по абсолютной величине не станет меньше наперед заданного положительного числа.

Численные эксперименты, проведенные в большом диапазоне изменения параметров  $a, b$  и  $Nu$ , свидетельствуют о надежности предлагаемого метода решения краевой задачи (20). В частности, им воспроизводится предельная зависимость (19), начиная со значений  $\sigma$ , при которых формула (19) с достаточной точностью определяет величину фактора эффективности. С другой стороны, проверкой метода является построение решений, близких к решениям задачи (19), когда  $y^0$  стремится к единице.

В качестве численного метода решения линейной краевой задачи (2I) выберем вновь метод сплайн-коллокации и применим его для измененной формулировки задачи:

$$\begin{aligned} z(s) &= 1 - v(s), \\ z''(s) + mz'(s)/s &= \sigma^2 f(s)z(s), \\ z'(0) &= 0, \quad z'(1) = Nu(1-z(1)), \end{aligned}$$

где

$$f(s) = \exp \left[ -b \frac{1-u(s)}{1+au(s)} \right].$$

Полагая, что  $z(s)$  - кубический сплайн при равномерном разбиении отрезка  $[0, 1]$ ,  $z(s) = \sum_{k=0}^{n+1} \alpha_k B_k(s)$ , будем иметь следующую систему линейных алгебраических уравнений относительно  $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{n+1}$ :

$$i = 1, \quad - \left[ 1 + \frac{\sigma^2 h^2 f(0)}{3(m+1)} \right] \alpha_1 + \left[ 1 - \frac{\sigma^2 h^2 f(0)}{6(m+1)} \right] \alpha_2 = 0,$$

$$\begin{aligned} 1 < i < n+1, \quad & \left[ 1 - \frac{m}{2(i-1)} - \frac{\sigma^2 h^2 f(s_i)}{6} \right] \alpha_{i-1} - 2 \left[ 1 + \frac{\sigma^2 h^2 f(s_i)}{3} \right] \alpha_i + \\ & + \left[ 1 + \frac{m}{2(i-1)} - \frac{\sigma^2 h^2 f(s_i)}{6} \right] \alpha_{i+1} = 0, \end{aligned}$$

$$i = n+1, \quad \left( \frac{hNu}{3} - 1 \right) \alpha_{n-1} + \frac{4hNu}{3} \alpha_n + \left( \frac{hNu}{3} + 1 \right) \alpha_{n+1} = 2hNu.$$

Здесь  $s_i = h(i-1)$ ,  $h = 1/(n-1)$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$ ,  $\alpha_0 = \alpha_2$ .

Поскольку  $f(s)$  - положительная функция, то решение системы можно найти методом прогонки. Прямой ход прогонки состоит в вычислении прогночного коэффициента  $p_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$ :

$$i = 1, \quad p_1 = \frac{1 - Hf(0)/(m+1)}{1 + 2Hf(0)/(m+1)}, \quad H = \sigma^2 h^2 / 6,$$

$$i > 1, \quad p_i = \frac{1 + M_i - F_i}{2 + 4F_i - (1 - M_i - F_i)p_{i-1}}, \quad M_i = \frac{m}{2(i-1)}, \quad F_i = Hf(s_i).$$

В результате первые  $n$  равенств системы линейных алгебраических уравнений преобразуются к виду:

$$\alpha_i = p_i \alpha_{i+1}, \quad (22)$$

а из уравнения при  $i = n+1$  определится  $\alpha_{n+1}$ :

$$\alpha_{n+1} = 2hNu / \left[ \left( \frac{hNu}{3} - 1 \right) p_{n-1} p_n + \frac{4hNu}{3} p_n + \frac{hNu}{3} - 1 \right].$$

При обратном ходе прогонки последовательно вычисляются  $\alpha_n, \alpha_{n-1}, \dots, \alpha_1$  по формулам (22), а также  $z(s_1)$ :

$$z(s_1) = [(4+p_{1-1})\alpha_1 + \alpha_{i+1}] / 6.$$

### 5. Численный пример

В качестве примера приведем график зависимости  $\eta = \eta(Q)$  краевой задачи (6)-(7), параметры которой имеют следующие значения [2]:  $m = 0, 1, 2$ ,  $Nu = 10$ ,  $Sh = 60$ ,  $\beta = 1/3$ ,  $\gamma = 27$ . Число решений краевой задачи при фиксированном  $Q$  в этом случае доходит до пяти (см. рис. 2). Кривая, относящаяся к зерну плоской формы, воспроизводит численное решение, полученное в [2] другим способом. Участки кривых 0-1 построены из решения задачи (6)-(7), 0 <  $y^0$  < 1; 2-3 - из решения задачи (20); 4-5 - по асимптотической формуле (19).

Отметим некоторые детали вычислительного характера. Численное решение задачи (6)-(7),  $0 < y^0 < 1$ , было получено двумя способами: как решение последовательности задач Коши (I0)-(II) и как последовательность решений краевых задач (9) методом последовательных приближений. Выход из всех итерационных процедур происходил при достижении параметром невязки значений, меньших  $0,001$ . Число итераций сокращалось с уменьшением шага, с которым задавалась последовательность  $y^0$  (задача (6)-(7)) или последовательность  $\sigma$  (задача (20)). Число разбиений отрезка  $[0, 1]$ , равное  $n-1$ , где  $n$  такое, что решение краевой задачи при удвоенном  $n$  несущественно отличается от полученного без удвоения, зависит от  $y^0$ :  $n = 11, 21$  при  $y^0$  порядка  $0,1$  и  $n = 51, 101$  при  $y^0$ , близких к единице.

В данном случае для решения линейной краевой задачи метод сплайн-коллокации предпочтительнее метода простой разностной аппроксимации в силу граничных условий, содержащих производные [10].

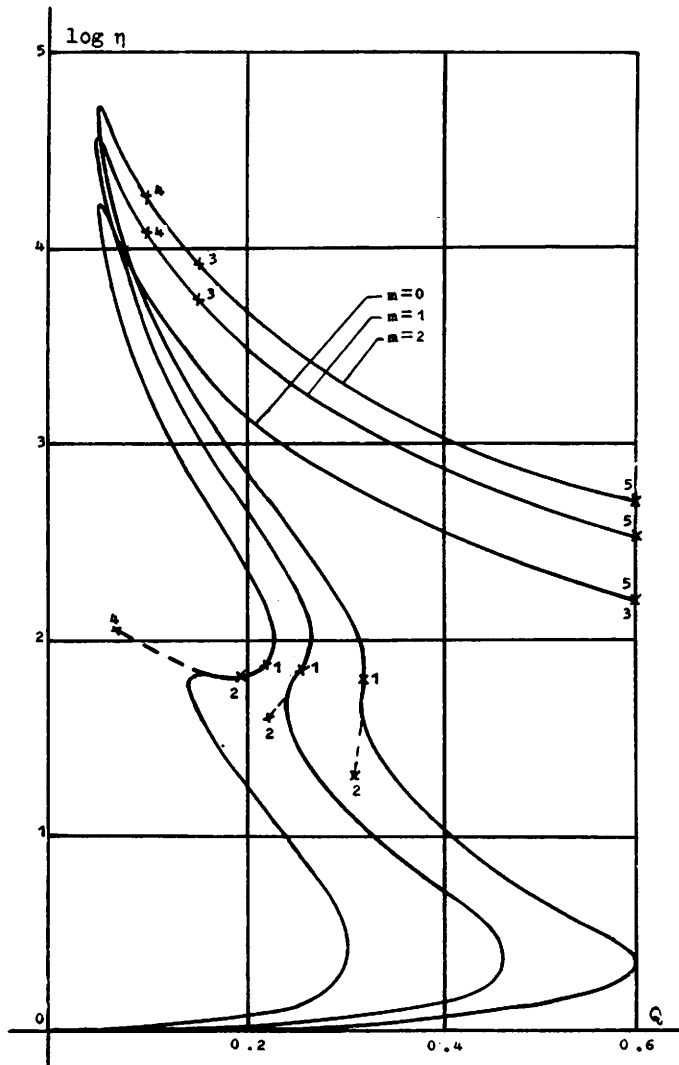


Рис.2. Графики зависимости  $\eta$  от  $Q$  при  $Nu=10$ ,  $Sh=60$ ,  $\beta=1/3$ ,  $\gamma=27$ .

## Л и т е р а т у р а

1. ИОФФЕ И.И., ПИСЬМЕН Л.М. Инженерная химия гетерогенного катализа. - Л.: Химия, 1972. - 464 с.
2. PATERSON W.R., GRESSWELL D.L. A simple method for the calculation of effectiveness factors.- Chemical Engineering Science, 1971, v.26, p.605-616.
3. ЗЕЛЕНЯК Т.И. Качественная теория краевых задач для квазилинейных уравнений второго порядка параболического типа. - Ново-сибирск, НГУ, 1972. - 147 с.
4. ТРИКОМИ Ф. Интегральные уравнения. - М.: Ин.лит-ра, 1960. - 299 с.
5. ЛАНС Дж.Н. Численные методы для быстродействующих вычислительных машин. - М.: Ин. лит-ра, 1962.
6. ФОРСАЙТ Дж., МАЛЬКОЛЬМ М., МОУЛЕР К. Машинные методы математических вычислений. - М.: Мир, 1980. - 279 с.
7. БЕЛЛМАН Р., КАЛАБА Р. Квазилинеаризация и нелинейные краевые задачи. - М.: Мир, 1968.
8. ГОДУНОВ С.К., РЯБЕНЬКИЙ В.С. Введение в теорию разностных схем. - М.: Физматгиз, 1962. - 400 с.
9. СТЕЧКИН С.Б., СУББОТИН Ю.Н. Сплаины в вычислительной математике. - М.: Наука, 1976. - 248 с.
10. ЗАВЬЯЛОВ Ю.С., КВАСОВ В.И., МИРОШНИЧЕНКО В.Л. Методы сплайн-функций. - М.: Наука, 1980. - 352 с.

Поступила в ред.-изд.отд.  
15 апреля 1981 года