

УДК 519.624.1

О ПРИМЕНЕНИИ ПАРАМЕТРИЗАЦИИ ПРИ РЕШЕНИИ
НЕЛИНЕЙНЫХ КРАЕВЫХ ЗАДАЧ

С.И. Фадеев

Обсуждается эффективный численный метод решения нелинейных краевых задач для системы обыкновенных дифференциальных уравнений. При этом используется метод Ньютона-Канторовича в сочетании с параметризацией, различные случаи применения которой рассмотрены на конкретных примерах математического моделирования стационарных химических реакций в зерне катализатора. Программная реализация метода позволила в рамках численного эксперимента унифицировать исследование достаточно широкого класса нелинейных краевых задач.

I. Рассмотрим краевую задачу для системы из n обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y, \mu), \quad a < x < b, \quad (1)$$

$$x = a: \quad l(y, \mu) = 0; \quad x = b: \quad g(y, \mu) = 0.$$

Здесь y и f - векторы размерности n ; μ - вектор параметров задачи размерности m ; $f(x, y, \mu)$ - достаточно гладкая вектор-функция по совокупности аргументов в известной области, равно как и вектор-функции $l(y, \mu)$ и $g(y, \mu)$, определяющие n независимых краевых условий. Предполагается, что краевая задача (I) имеет единственное решение, если μ принадлежит некоторой окрестности точки μ^0 .

Как известно, мощным средством численного исследования нелинейных проблем является метод Ньютона-Канторовича [1]. Один из способов его применения к (I) состоит в том, что предварительно дифференциальная краевая задача аппроксимируется дискретной мо-

делью в виде конечномерной системы из N трансцендентных уравнений относительно N компонент вектора Y :

$$F(Y, \mu) = 0. \quad (2)$$

Пусть $\mu = \bar{\mu}$ и Y^0 - начальное приближение к точному решению Y задачи (2). Согласно методу Ньютона-Канторовича последовательные приближения Y^k строятся по правилу

$$Y^{k+1} = Y^k + \Delta^k, \quad \Delta^k = -[F_Y(Y^k, \bar{\mu})]^{-1} F(Y^k, \bar{\mu}), \quad (3)$$

$$k = 0, 1, 2, \dots$$

Здесь F_Y - матрица якобиана системы линейных алгебраических уравнений, определяющей поправку Δ^k ; Y^{k+1} - очередное приближение к решению задачи (2). Итерационный процесс прекращается, если $\|\Delta^k\| < \epsilon$, где ϵ - заданное положительное число. Сходимость процесса и число итераций, за которое достигается выполнение условия $\|\Delta^k\| < \epsilon$, как правило, существенно зависит от выбора начального приближения Y^0 . Вообще говоря, задание начального приближения в итерационном процессе (3) является проблемой, во многих случаях определяющей эффективность использования метода Ньютона-Канторовича. При этом может оказаться полезной параметризация задачи (2) [2-8].

Введем скалярный параметр t и вместе с ним параметрическую зависимость $\mu = \mu(t)$, так что $\bar{\mu} = \mu(\bar{t})$. Иногда достаточно взять в качестве t одну из компонент вектора μ . Пусть при $t = \hat{t}$, $\hat{\mu} = \mu(\hat{t})$ известно начальное приближение Y^0 решения системы $F(Y, \hat{\mu}) = 0$. Применив метод Ньютона-Канторовича, найдем решение $\hat{Y} = Y(\hat{\mu})$ и, кроме того, матрицу якобиана

$$Y_{\mu}(\hat{\mu}) = -[F_Y(\hat{Y}, \hat{\mu})]^{-1} F_{\mu}(\hat{Y}, \hat{\mu})$$

для вычисления производной

$$\frac{dY}{dt} \Big|_{t=\hat{t}} = Y_{\mu}(\hat{\mu}) \frac{d\mu}{dt} \Big|_{t=\hat{t}}.$$

Продолжим теперь решение задачи (2), найденное при $t = \hat{t}$, по параметру t , устремив t к \bar{t} с шагом h . Полагая $t = \hat{t} + h$, выберем в качестве начального приближения решения системы $F(Y, \mu) = 0$,

$\mu = \mu(t)$ вектор

$$Y^0 = \hat{Y} + \left. \frac{dY}{dt} \right|_{t=\hat{t}} N,$$

и продолжим далее этот процесс вплоть до $t = \bar{t}$. (При этом, естественно, предполагается, что матрица F_Y остается невырожденной. Более общая ситуация будет рассмотрена в п.3) Если N достаточно мало, то это начальное приближение будет предсказывать точное решение с погрешностью $O(N^2)$.

Один из способов построения дискретной модели для задачи (I) сводится к следующему [2]. Введем сетку по x с узлами x_i :

$$a = x_1 < x_2 < \dots < x_M = b, \quad h_i = x_{i+1} - x_i$$

и обозначим через y^i значение, принимаемое решением (I) в i -м узле: $y^i = y(x_i, \mu)$. Очевидно, краевую задачу (I) можно представить в виде:

$$l(y^1, \mu) = 0, \quad g(y^M, \mu) = 0,$$

$$y^{i+1} = y^i + \int_{x_i}^{x_{i+1}} f[x, y(x, \mu), \mu] dx, \quad (4)$$

$$i = 1, \dots, M-1.$$

Искомая система трансцендентных уравнений следует из (4) после приближенной замены интеграла квадратурной формулой. Воспользуемся формулой Симпсона, которая точна на многочленах третьей степени. При этом в (4) вносится возмущение порядка h^4 , $h = \max h_i$. Сохранив за значениями сеточной функции обозначение y^i , получаем

$$l(y^1, \mu) = 0, \quad g(y^M, \mu) = 0,$$

$$p^i = y^i - y^{i+1} + \frac{h}{6} [f(x_i, y^i, \mu) + 4f(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}, \bar{y}^i, \mu) + f(x_{i+1}, y^{i+1}, \mu)] = 0, \quad (5)$$

$$i = 1, \dots, M-1;$$

т.е. систему трансцендентных уравнений вида (2), в которой $F = [1, P^1, \dots, P^{M-1}, \varepsilon]^T$, $Y = [y^1, y^2, \dots, y^M]^T$ - составные векторы размерности $N = Mn$, здесь

$$\bar{y}^i = \frac{y^i + y^{i+1}}{2} + \frac{h_i}{8} [f(x_i, y^i, \mu) - f(x_{i+1}, y^{i+1}, \mu)].$$

Выражение \bar{y}^i задается значением кубической параболы в точке $\frac{1}{2}(x_i + x_{i+1})$, коэффициенты которой определяются по значениям y и dy/dx на концах отрезка $[x_i, x_{i+1}]$ (эрмитова кубическая интерполяция [17]).

Важно отметить, что матрица F_Y системы (5) имеет блочную двухдиагональную структуру с, вообще говоря, заполненными блоками

$$F_Y = \begin{bmatrix} 1 & & & & & & & & & \\ y^1 & & & & & & & & & \text{O} \\ & P^1 & & & & & & & & \\ & y^1 & P^2 & & & & & & & \\ & & \dots & \dots & \dots & \dots & & & & \\ & & & & \text{O} & & P^{M-1} & P^{M-1} & & \\ & & & & & & y^{M-1} & y^M & & \\ & & & & & & & & \varepsilon & \\ & & & & & & & & & y^M \end{bmatrix}.$$

Здесь блоки $P^i_{y^i}$, $P^i_{y^{i+1}}$ имеют размерность $n \times n$ каждый; блоки 1_{y^1} и ε_{y^M} имеют размерность $k \times n$ и $(n-k) \times n$ соответственно, где k - число краевых условий в задаче (1) при $x=a$, $0 < k < n$. Использование метода типа прогонки при решении системы линейных алгебраических уравнений, учитывающего структуру матрицы системы F_Y , позволяет находить вектор поправок Δ^j (3) на каждой итерации и вектор-столбец матрицы Y_μ за число арифметических операций порядка N .

Приведем формулы вычисления элементов матриц $P^i_{y^i}$ и $P^i_{y^{i+1}}$.

Для сокращения записи обозначим

$$u = y^i, \quad v = y^{i+1}, \quad w = \bar{y}^i, \quad h = h_i,$$

$$P = P^i = u - v + \frac{h}{6}[f(u) + 4f(w) + f(v)] = 0, \quad (6)$$

$$w = \frac{1}{2}(u-v) + \frac{h}{8}[f(u) - f(v)]$$

без перечисления в круглых скобках всех аргументов вектор-функции f . В результате производные P_u и P_v имеют следующие выражения:

$$P_u = I + \frac{h}{6}[f_y(u) + 2f_y(w) + \frac{h}{2}f_y(w)f_y(u)], \quad (7)$$

$$P_v = -I + \frac{h}{6}[f_y(v) + 2f_y(w) - \frac{h}{2}f_y(w)f_y(v)],$$

где f_y - матрица якобиана; I - единичная матрица.

Пусть Q - один из элементов вектора μ . Соответствующий столбец матрицы F_μ имеет вид:

$$F_Q = [1_Q, P_Q^1, \dots, P_Q^{M-1}, \varepsilon_Q]^T,$$

где с учетом принятых обозначений

$$P_Q = \frac{h}{6}[f_Q(u) + 4f_Q(w) + 4f_y(w)w_Q + f_Q(v)],$$

$$w_Q = \frac{h}{8}[f_Q(u) - f_Q(v)].$$

Принимая во внимание способ аппроксимации задачи (I), следует ожидать, что предлагаемый метод будет эффективен при построении достаточно гладких, без сильных осцилляций решений краевой задачи x).

2. Процедура продолжения решения по параметру была использована при расчете стационарных режимов многокомпонентной диффузии в зерне катализатора в условиях постоянства температуры и давления. Краевая задача, моделирующая процесс, имеет вид [I2-I4]:

x)

Отметим хорошо известный эффективный подход, основанный на квазилинеаризации (I) с последующим применением метода ортогональной прогонки для решения линейных краевых задач на каждой итерации [9-11]. Наш выбор продиктован желанием распространить простым способом метод продолжения решения по параметру на случай, когда возможно ветвление решений (I) по параметру t (см. п. 3).

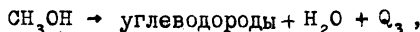
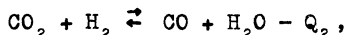
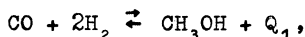
$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} (r^2 N_i) = F_i = \sum_{j=1}^{m_0} \nu_{ij} W_j, \quad 0 < r < r_0, \quad i = 1, \dots, n_0,$$

$$\frac{dc_i}{dr} = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n_0} \frac{1}{D_{ij}} (c_i N_j - c_j N_i), \quad (8)$$

$$r = 0: N_i = 0; \quad r = r_0, \quad c_i = c_i^0,$$

где r - линейная координата; r_0 - радиус зерна; n_0 - количество компонент; m_0 - число реакций; c_i, c_i^0 - мольная доля i -го вещества соответственно в зерне и на поверхности зерна; N_i - диффузионный поток; ν_{ij} - стехиометрический коэффициент i -го вещества в j -й реакции; W_j - скорость реакции; D_{ij} - параметр, пропорциональный молекулярному коэффициенту диффузии.

В рамках математической модели (8) рассмотрим процесс получения углеводов из синтез-газа, протекающего по схеме



где $Q_j, j = 1, 2, 3$ ($m_0 = 3$) - тепловой эффект j -й реакции. Таким образом, смесь реагирующих веществ состоит из шести компонент ($n_0 = 6$). Соответствующие скорости реакции определяются по формулам [15]:

$$W_1 = K_1 \left[c_2 \left(\frac{c_1}{c_5} \right)^{1/4} - K_2 \left(\frac{c_5}{c_1} \right)^{1/4} \right], \quad (9)$$

$$W_2 = K_3 (c_2 c_3 - K_4 c_1 c_4), \quad W_3 = K_5 c_5 + K_6 \frac{c_5^2}{c_1}.$$

Здесь $c_i, i = 1, \dots, n_0$, - концентрации веществ: c_1 - окиси углерода, c_2 - водорода, c_3 - двуокиси углерода, c_4 - воды, c_5 - метилового спирта, c_6 - углеводов, причем $c_1 + c_2 + c_3 + c_4 + c_5 + c_6 = 1$; $K_i, i = 1, \dots, 6$, - константы скоростей реакций.

Суммарные скорости образования (исчезновения) веществ имеют следующие выражения:

$$\begin{aligned} F_1 &= -W_1 + W_2, & F_2 &= -W_2 - 2W_1, & F_3 &= -W_2, \\ F_4 &= W_2 + W_3, & F_5 &= W_1 - W_3, & F_6 &= W_3/6. \end{aligned} \quad (10)$$

Поскольку $F_1 = F_4 - F_5 - 12F_6$, $F_2 = -F_4 - 2F_5 - 6F_6$, $F_3 = -F_4 + 6F_6$, то в силу (8) таким же равенствам удовлетворяют диффузионные потоки

$$\begin{aligned} N_1 &= N_4 - N_5 - 12F_6, & N_2 &= -N_4 - 2N_5 - 6F_6, \\ N_3 &= -N_4 + 6F_6. \end{aligned} \quad (11)$$

С учетом (9)-(II), а также равенства $c_6 = 1 - \sum_{i=1}^5 c_i$ краевая задача формулируется в виде:

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} (r^2 N_i) = F_i, \quad 0 < r < r_0, \quad i = 4, 5, 6;$$

$$\frac{dc_i}{dr} = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^6 \frac{1}{D_{ij}} (c_i N_j - c_j N_i), \quad i = 1, \dots, 5; \quad (12)$$

$$r = 0: N_4 = N_5 = N_6 = 0; \quad r = r_0: c_i = c_i^0, \quad i = 1, \dots, 5.$$

Обозначим через S масштаб диффузионных потоков, через K - масштаб констант скоростей реакции и перейдем в (12) к безразмерным величинам

$$r = r_0 x, \quad K_i = K k_i, \quad W_i = K g_i, \quad N_i = S y_i, \quad D_{ij} = r_0 S d_{ij}, \quad Q = r_0 K / S, \quad (13)$$

придав краевой задаче "стандартный вид" (I);

$$\frac{dc_i}{dx} = f_i = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^6 \frac{1}{d_{ij}} (c_i y_j - c_j y_i), \quad 0 < x < 1, \quad i = 1, \dots, 5;$$

$$\frac{dy_4}{dx} = f_6 = -\frac{2}{x} y_4 + Q(\varepsilon_2 + \varepsilon_3); \quad \frac{dy_5}{dx} = f_7 = -\frac{2}{x} y_5 + Q(\varepsilon_1 - \varepsilon_3); \quad (14)$$

$$\frac{dy_6}{dx} = f_8 = -\frac{2}{x} y_6 + \frac{1}{6} Q \varepsilon_3;$$

$$x = 0: y_4 = y_5 = y_6 = 0; \quad x = 1: c_i = c_i^0, \quad i = 1, \dots, 5.$$

Здесь

$$\begin{aligned} y_1 &= y_4 - y_5 - 12y_6, & y_2 &= -y_4 - 2y_5 - 6y_6, \\ (y_3 &= -y_4 + 6y_6, & c_6 &= 1 - (c_1 + c_2 + c_3 + c_4 + c_5), \end{aligned}$$

$$g_1(c) = k_1 \left[c_2 \left(\frac{c_1}{c_5} \right)^{1/4} - k_2 \left(\frac{c_5}{c_1} \right)^{1/4} \right],$$

$$g_2(c) = k_3(c_2 c_3 - k_4 c_1 c_4),$$

$$g_3(c) = k_5 c_5 + k_6 \frac{c_5^1}{c_1},$$

где c - вектор размерности n_0 с компонентами c_i . Раскрыв особенности при $x=0$, получим для f_6 , f_7 и f_8 следующие выражения:

$$x=0: \quad f_6 = \frac{Q}{3}(g_2 + g_3), \quad f_7 = \frac{Q}{3}(g_1 - g_3), \quad f_8 = \frac{Q}{18}g_3.$$

Важной характеристикой протекания j -й реакции, вычисляемой на решениях (8), является фактор эффективности использования пористого зерна катализатора η_j , равный отношению так называемой наблюдаемой скорости реакции к $W_j(c^0)$:

$$\eta_j = \frac{3}{W_j(c^0)} \int_0^1 x^2 W_j[c(x)] dx, \quad j = 1, \dots, m_0, \quad (15)$$

где c^0 - вектор значений концентраций на поверхности зерна, $x = r/r_0$. Обращаясь к рассматриваемой проблеме, заметим, что согласно определению η_j и в силу (14)

$$y_4(1) = Q \int_0^1 x^2 [g_2(c(x)) + g_3(c(x))] dx = \frac{Q}{3} [g_2(c^0)\eta_2 + g_3(c^0)\eta_3],$$

$$y_5(1) = Q \int_0^1 x^2 [g_1(c(x)) - g_3(c(x))] dx = \frac{Q}{3} [g_1(c^0)\eta_1 - g_3(c^0)\eta_3],$$

$$y_6(1) = \frac{Q}{6} \int_0^1 x^2 g_3(c(x)) dx = \frac{Q}{18} g_3(c^0)\eta_3.$$

Отсюда с учетом (15) получим для вычисления η_1, η_2, η_3 следующие простые формулы:

$$\eta_1 = 3 \frac{y_5(1) + 6y_6(1)}{Qg_1(c^0)}, \quad \eta_2 = -\frac{3y_3(1)}{Qg_2(c^0)}, \quad \eta_3 = \frac{18y_6(1)}{Qg_3(c^0)}. \quad (16)$$

В качестве параметра краевой задачи (14) выберем Q . Очевидно, при $Q = 0$ точное решение (14) имеет вид

$$y_i = 0, \quad c_i = c_i^0, \quad i = 1, \dots, 6.$$

При этом $\eta_j = 1, j = 1, 2, 3$. На рис. I приведены зависимости $\eta_1,$

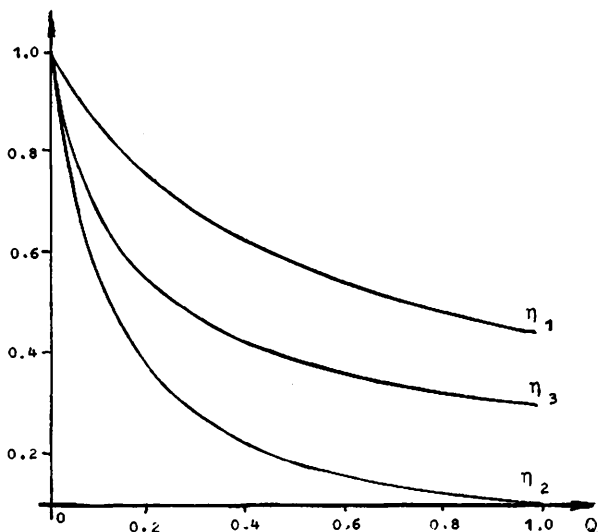


Рис. I

η_2 и η_3 от Q , построенные на решениях (14) при следующих значениях параметров:

$$c_1^0 = 0.08; \quad c_2^0 = 0.70; \quad c_3^0 = 0.12; \quad c_4^0 = 0.06; \quad c_5^0 = 0.03; \quad c_6^0 = 0.01; \\ k_1 = 0.3, \quad k_2 = 2.809, \quad k_3 = 16, \quad k_4 = 14.35, \quad k_5 = 4.8, \quad k_6 = 44.79; \\ d_{12} = 3.48, \quad d_{13} = 0.750, \quad d_{14} = 0.121, \quad d_{15} = 0.748, \quad d_{16} = 0.375; \\ d_{23} = 2.99, \quad d_{24} = 4.13, \quad d_{25} = 2.89, \quad d_{26} = 1.51, \quad d_{34} = 0.987, \\ d_{35} = 0.625, \quad d_{36} = 2.93, \quad d_{45} = 0.100, \quad d_{46} = 0.487, \quad d_{56} = 0.318,$$

где a_{ij} , $i, j = 1, \dots, n_0$, $i \neq j$ - элементы симметрической матрицы размерности $n_0 \times n_0$. Отрезок $[0, 1]$ по переменной x был разбит на 10 частей ($M = 11$). При этом на каждом шаге по Q решалась система трансцендентных уравнений (5) размерности $N = 88$.

3. Применение параметризации предполагает существование, единственность и непрерывную зависимость решения краевой задачи от скалярного параметра t , принадлежащего некоторому отрезку $[t_0, t_1]$. Однако типичной является ситуация, когда информация такого рода отсутствует, а исследование нелинейной проблемы носит характер численного эксперимента. В этих условиях численный метод продолжения решения по параметру должен учитывать возможность ветвления решений (I) по t [2-8].

Пусть система

$$\Phi(Y, t) = 0, \quad \Phi(Y, t) \equiv F(Y, \mu(t)), \quad (I7)$$

состоящая из N трансцендентных уравнений, является дискретной моделью задачи (I). Будем предполагать, что (I7) определяет на отрезке $[t_0, t_1]$ вектор-функцию $Y = Y(t)$, которая задает в параметрическом виде гладкую пространственную кривую. Тогда ветвление решений (I7), если оно имеет место, при некотором $t = t_*$ означает неоднозначность вектор-функции $Y(t)$. С приближением t к t_* , где одна ветвь $Y(t)$ переходит в другую, матрица якобиана становится плохо обусловленной, а норма вектор-функции dY/dt неограниченно растет. При этом продолжение решения (I7) по параметру t становится затруднительным, так как нарушаются условия применимости метода Ньютона-Канторовича. Однако если предположение о гладкости $Y(t)$ выполняется, то проблема может быть разрешена путем простой замены параметра системы (I7). Действительно, поскольку пространственная кривая не имеет особых точек, то ранг матрицы $A = [\Phi_Y, \Phi_t]$ размерности $N \times (N+1)$ равен N для всех $t \in [t_0, t_1]$. По теореме о неявной функции в качестве параметра системы можно указать такую j -ю компоненту вектора Y , что квадратная матрица, полученная в результате вычеркивания j -го столбца матрицы A , будет невырожденной. Следовательно, решение системы (I7) в окрестности t_* представимо в виде

$$Y_i = Y_i(\lambda), \quad t = t(\lambda), \quad \lambda = Y_j,$$

$$i = 1, \dots, N; \quad i \neq j.$$

Иными словами, для построения $\gamma(t)$ в окрестности t_* целесообразно применение метода продолжения решения по параметру λ .

При регулярном обращении к процедуре выбора "текущего" параметра λ системы (I7) метод продолжения решения по параметру становится универсальным и эффективным средством численного построения $\gamma(t)$, не требующим предварительной информации о множественности решений по t . По существу, выбор параметра является вычислительной проблемой определения N линейно-независимых вектор-столбцов матрицы A , причем в качестве линейно-зависимого и, следовательно, "вычеркиваемого" вектор-столбца матрицы A может оказаться как j -й столбец матрицы Φ_Y , так и Φ_t . Тогда в роли параметра системы (I7) будет выступать соответственно либо j -я компонента вектора Y , либо t . Если при некотором $t \in [t_0, t_1]$ решение (I7) уже известно, равно как и текущий параметр λ , при фиксированном значении которого решение найдено, то элементарный шаг численного построения $\gamma(t)$ состоит в выборе нового текущего параметра λ' и продолжении решения системы на один шаг по λ' и так далее.

Отметим, что определение текущего параметра системы при помощи метода Гаусса с выбором главного элемента по всей матрице для больших N является трудоемкой операцией. Поэтому, принимая во внимание специальную, блочно-двухдиагональную структуру матрицы Φ_Y , мы будем пользоваться правилом, согласно которому параметром системы объявляется наиболее быстро меняющаяся компонента составного вектора $[Y, t]^T$.

Обозначим через X вектор размерности N с компонентами $X_i = Y_i$, $i = 1, \dots, N$, если $\lambda = t$. В противном случае параметром системы служит j -я компонента вектора Y : $\lambda = Y_j$, а вектор X составляется из компонент $X_i = Y_i$, $i < j$; $X_i = Y_{i+1}$, $i \geq j$; $X_N = t$. Очевидно, вектор X можно представить как решение системы

$$\Phi(X, \lambda) = 0, \quad \det \Phi_X(X, \lambda) \neq 0, \quad (I8)$$

Определив вектор производных решения (I8) по текущему параметру

$$\frac{dX}{d\lambda} = -[\Phi_X(X, \lambda)]^{-1} \Phi_\lambda(X, \lambda),$$

выберем в качестве λ' наиболее быстро меняющуюся компоненту составного вектора $[X, \lambda]^T$, т.е.

$$\lambda' = \begin{cases} X_k, & \text{если } |dX_k/d\lambda| > 1; \\ \lambda, & \text{если } |dX_k/d\lambda| \leq 1, \end{cases} \quad (19)$$

где k определяется условием

$$\left| \frac{dX_k}{d\lambda} \right| = \max_i \left| \frac{dX_i}{d\lambda} \right|, \quad i = 1, \dots, N.$$

После вычеркивания соответствующего вектор-столбца матрицы A система (17) опять приводится к виду (18) согласно определению X . При этом компоненты вектора

$$\frac{dY}{d\lambda'} = \frac{dY}{d\lambda} \Big/ \frac{dX_k}{d\lambda}, \quad \frac{dt}{d\lambda'} = \frac{dt}{d\lambda} \Big/ \frac{dX_k}{d\lambda} \quad (20)$$

по абсолютной величине не превышают единицы.

Для продолжения решения по параметру λ' на шаг N , знак которого должен быть согласован с предысторией изменения λ' , зададимся начальным приближением решения системы $\Phi(X, \lambda) = 0$, $\lambda = \lambda' + h$ с учетом (20). Далее обычным образом применяется метод Ньютона-Канторовича. Можно утверждать, что при достаточно хорошей аппроксимации дифференциальной краевой задачи системой (18) матрица якобиана $\Phi_X(X, \lambda)$ будет невырожденной в силу непрерывной зависимости краевой задачи от параметров.

Заметим, что когда t не является текущим параметром, система (18) служит дискретной моделью краевой задачи (I), $\mu = \mu(t)$, где t подлежит определению. Пусть $\lambda = Y_j$, $j = 1, \dots, N$, и j соответствует k -я компонента вектора y^i , $k = 1, \dots, n$; $i = 1, \dots, M$, составного вектора Y (5). Тогда от решения задачи (I) требуется, чтобы k -я компонента вектор-функции $y(x)$ принимала заданное значение λ при $x = x_i$, где x_i - узел сетки по x .

Структура матрицы Φ_X зависит от выбора текущего параметра системы. Если $\lambda = t$, то в силу (17) $\Phi_X = F_Y$ и, следовательно, Φ_X - блочно-двухдиагональная матрица, рассмотренная ранее в п. I. Если λ - j -я компонента вектора Y , то $\Phi_X = [\Phi_Y, \Phi_t]$, где Φ_Y - матрица размерности $N \times (N-1)$, образующаяся после вычеркивания j -го вектор-столбца матрицы F_Y , а N -м столбцом Φ_X является Φ_t .

Тем не менее это не служит препятствием для организации метода типа прогонки, учитывающего структуру Φ_X и позволяющего находить решение систем линейных алгебраических уравнений, которые возникают на каждой итерации, за число арифметических операций порядка N .

Другим важным фактором, определяющим эффективность параметризации, является задание начального приближения. Пусть \bar{X} — решение (18) при $\lambda = \bar{\lambda}$ и требуется продолжить решение по λ на шаг \bar{H} . Если величина шага \bar{H} достаточно мала, то вектор

$$X^0 = \bar{X} + \frac{dX}{d\lambda} \Big|_{\lambda = \bar{\lambda}} \bar{H}$$

предсказывает решение системы $\Phi(X, \bar{\lambda} + \bar{H}) = 0$ со вторым порядком точности. Вообще говоря, чем меньше $|\bar{H}|$, тем меньше требуется число итераций, необходимых для того, чтобы норма вектора поправки была меньше заданного ϵ . Это обстоятельство используется для адаптации шага по текущему параметру при продолжении решения. Если λ не является стартовым значением параметра при построении $Y(t)$, то, привлекая X и $dX/d\lambda$ при $\lambda = \bar{\lambda} - \hat{H}$, где \hat{H} — предшествующий шаг по λ , можно взять в качестве X^0 интерполяционный многочлен 3-й степени, повысив порядок точности предсказания до четвертого.

Иногда удобно после выбора текущего параметра системы λ перейти к универсальному параметру — длине дуги в пространственной кривой, определяемой системой (18):

$$ds = \pm dx \sqrt{1 + \sum_{i=1}^N (dx_i/d\lambda)^2}, \quad (21)$$

где выбор знака согласуется с условием положительности ds . С учетом (21) в качестве начального приближения X^0 можно рассмотреть результат численного интегрирования по s задачи Коши для системы $N+1$ дифференциальных уравнений с правой частью — вектор-функцией $[(dX/d\lambda)(d\lambda/ds), d\lambda/ds]^T$ на отрезке $[\bar{s}, \bar{s} + \delta]$, соответствующем отрезку $[\bar{\lambda}, \bar{\lambda} + \bar{H}]$, и начальным условиям: $X = \bar{X}$, $\lambda = \bar{\lambda}$ при $s = \bar{s}$.

Рассматриваемый метод может быть использован для численного исследования задачи (I) в интересующей области изменения параметра μ путем продолжения решения вдоль каждой из некоторой серии

кривых, задаваемых набором функций $\mu(t)$. Следует подчеркнуть, что здесь не затрагивается проблема ветвления решений, обусловленная существованием особых точек пространственной кривой, а также проблема множественности пространственных кривых, определяемых соотношениями (17).

4. Ветвление решений характерно для нелинейных краевых задач, моделирующих неизометрические установившиеся процессы. В качестве примера применения метода параметризации рассмотрим нелинейную краевую задачу, описывающую экзотермическую реакцию с аррениусовской зависимостью скорости реакции от температуры в зерне катализатора. С использованием безразмерных величин имеем [7,16]:

$$\frac{d^2T}{dx^2} = \frac{\alpha}{x} \frac{dT}{dx} + \beta Q c^k \exp\left[\gamma\left(1 - \frac{1}{T}\right)\right] = 0, \quad 0 < x < 1;$$

$$\frac{d^2c}{dx^2} + \frac{\alpha}{x} \frac{dc}{dx} - Q c^k \exp\left[\gamma\left(1 - \frac{1}{T}\right)\right] = 0; \quad (22)$$

$$x = 0: \quad \frac{dT}{dx} = \frac{dc}{dx} = 0;$$

$$x = 1: \quad \frac{dT}{dx} = Nu(1-T), \quad \frac{dc}{dx} = S_h(1-c).$$

Здесь x - нормированная линейная координата; $\alpha = 0, 1, 2$ для зерна плоской, цилиндрической и сферической форм соответственно; T, c - безразмерные температуры и концентрация; $\beta, \gamma, Q, Nu, S_h$ - параметры, характеризующие тепло- и массообмен процесса и скорость реакции; k - порядок реакции. Введя обозначения

$$y_1 = \gamma(T - 1), \quad y_2 = 1 - c,$$

представим (22) в виде:

$$\frac{dy_1}{dx} = y_3,$$

$$\frac{dy_2}{dx} = y_4,$$

$$\frac{dy_3}{dx} = -\frac{\alpha}{x} y_3 - \beta \gamma Q (1 - y_2)^k \exp\left(\frac{y_1}{1 + y_1/\gamma}\right),$$

$$\frac{dy_4}{dx} = -\frac{\alpha}{x}y_4 - Q(1 - y_2)^k \exp\left(\frac{y_1}{1+y_1/\gamma}\right);$$

$$x = 0: y_3 = y_4 = 0,$$

$$x = 1: Nu y_1 + y_3 = 0, S_h y_2 + y_4 = 0.$$

На рис.2 приведены результаты вычислений (повторяющие результаты из [7,16]) фактора эффективности

$$\eta = (\alpha+1) \frac{Nu y_1(1)}{\beta \gamma Q}$$

при $\alpha = 0, 1, 2$; $k = 1$, $\beta = 1/3$, $\gamma = 27$, $Nu = 10$, $S_h = 60$. С

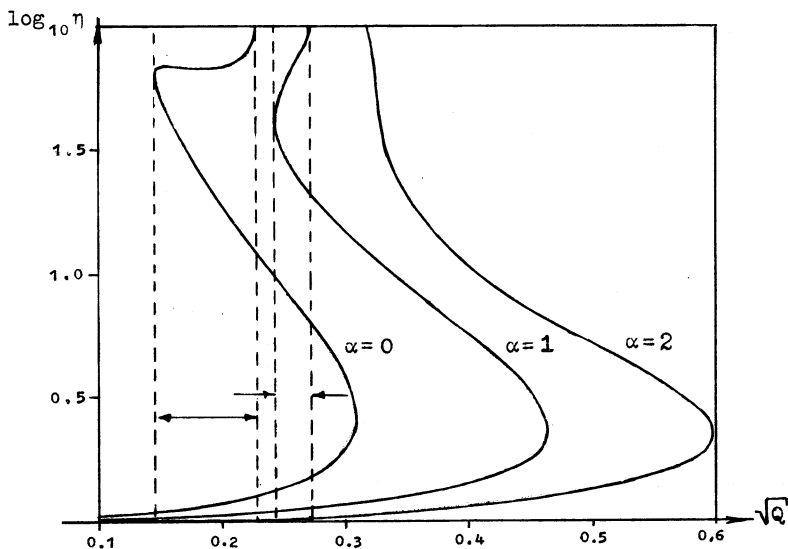


Рис. 2

учетом продолжения графиков при $\log_{10} \eta > 2$ выделены области изменения Q , играющего роль параметра t системы (17), с пятью решениями при $\alpha = 0$ и $\alpha = 1$. При $\alpha = 2$ число решений не более трех.

Пример применения параметризации для изучения поведения рассматриваемой задачи в некоторой окрестности изменения параметров Q и Nu представлен на рис.3. Вдоль кривой, образующей в плоскости (Q, Nu) петлю прямоугольной формы, вычисляется фактор эф-

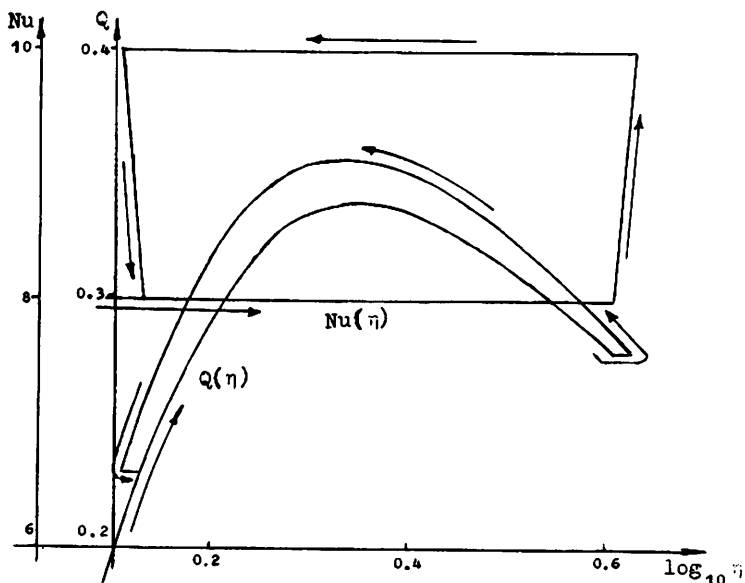


Рис. 3

фективности η . С учетом направления обхода, указанного на рисунке стрелками, петля задавалась точками: $(0, 8) \rightarrow (Q_0, 8) \rightarrow (Q_0, 10) \rightarrow (Q_1, 10) \rightarrow (Q_1, 8)$, где $Q_0 = 0.279$, $Q_1 = 0.23$. При этом на каждом из прямолинейных отрезков петли за параметр системы брался изменяющийся параметр (Q или Nu). На рисунке даны зависимости $Q(\eta)$ и $Nu(\eta)$.

5. Математическое моделирование стационарных режимов работы реактора идеального вытеснения приводит к проблеме совместного решения краевой задачи (I) и задачи Коши:

$$\frac{d\mu}{dt} = \varphi(y, \mu), \quad t > 0, \quad \mu(0) = \mu^0, \quad (23)$$

где достаточно гладкая вектор-функция φ определена в некоторой окрестности μ^0 на решениях (I). Приблизительно, заменив (I) дискретной моделью (2), будем предполагать, что при $t=0$ известно начальное приближение решения (2), используя которое можно найти $Y(\mu^0)$ и, следовательно, правую часть системы обыкновенных дифференциальных уравнений (23) при $t=0$.

Пусть для решения задачи Коши (23) применяется какой-либо явный метод численного интегрирования. Рассмотрим реализацию элементарного шага этого метода, описав правило вычисления $d\mu/dt$ при $t = \delta$, если $Y(\mu^0)$ и $\phi(\mu^0)$ уже известны. Полагая $\mu = \mu^0 + \phi(\mu^0)\delta$, обратимся к уравнению $F(Y, \mu) = 0$, на решении которого и определяется $d\mu/dt = \phi(\mu)$. Начальное приближение решения Y^0 будем строить с учетом информации при $t=0$. Для этого наряду с $Y(\mu^0)$ и $\phi(\mu^0)$ при $t=0$ требуется найти матрицу якобиана

$$Y_{\mu}(\mu^0) = -[F_Y(Y(\mu^0), \mu^0)]^{-1} F_{\mu}(Y(\mu^0), \mu^0).$$

В результате становится известной производная решения по параметру

$$\frac{dY}{dt} \Big|_{t=0} = Y_{\mu}(\mu^0) \frac{d\mu}{dt} \Big|_{t=0} = Y_{\mu}(\mu^0) \phi(\mu^0),$$

а вместе с этим и начальное приближение

$$Y^0 = Y(\mu^0) + Y_{\mu}(\mu^0) \phi(\mu^0) \delta.$$

Если $|\delta|$ достаточно мало, то Y^0 будет достаточно хорошо предсказывать решение системы $F(Y, \mu) = 0$ и, следовательно, потребуются небольшое число итераций по методу Ньютона-Канторовича при определении $Y(\mu)$. Таким образом, задача Коши (23) задает правило параметризации системы (2).

Математическая модель стационарных режимов работы реактора идеального вытеснения в виде (I), (23) отражает взаимодействие процессов в потоке газа и зерне катализатора. Если в условиях изотермической диффузии в зерне катализатора химическая реакция является наиболее быстрой стадией, то учет неоднородностей в распределении концентраций по сечению зерна становится существенным. Характеристикой неоднородности служит фактор эффективности η .

Рассмотрим простейшую модель адиабатического реактора идеального вытеснения с одной реакцией типа $A \rightarrow B$. Нас будет интересовать распределение температуры T и концентрации вещества A в потоке газа по длине реактора. При формулировке задачи воспользуемся безразмерными величинами.

Краевая задача, описывающая изотермическую диффузию в зерне катализатора, имеет вид

$$\frac{d^2y}{dx^2} + \frac{2}{x} \frac{dy}{dx} = Qf(y), \quad 0 < x < 1, \quad (24)$$

$$x = 0: \quad \frac{dy}{dx} = 0; \quad x = 1, \quad y = v.$$

Здесь x - нормированная линейная координата; y - безразмерная концентрация, равная v на поверхности зерна;

$$f(y) = y^k, \quad Q = \beta u(\theta) = \beta \exp\left(\frac{\theta}{1 + \theta/\gamma}\right), \quad \gamma = \frac{E}{RT_0},$$

где k - показатель порядка реакции; β - параметр, пропорциональный отношению теплового эффекта химической реакции к коэффициенту диффузии; θ - безразмерная температура; T_0 - температура на входе реактора; E - энергия активации; R - газовая постоянная. Температура T связана с θ соотношением $T = T_0(1 + \theta/\gamma)$.

Согласно определению, фактор эффективности вычисляется по формуле

$$\eta = \frac{3}{f(v)} \int_0^1 f[y(x)] x^2 dx = \frac{1}{Qf(v)} \left. \frac{dy}{dx} \right|_{x=1}.$$

Распределение температуры и концентрация по длине реактора описывается задачей Коши:

$$\frac{dv}{dt} = -u(\theta)f(v)\eta,$$

$$\frac{1}{\gamma} \frac{d\theta}{dt} = \alpha u(\theta)f(v)\eta, \quad t > 0; \quad (25)$$

$$t = 0: \quad v = v_0, \theta = 0, \quad 0 < v_0 < 1.$$

Здесь t - безразмерное текущее время пребывания реагирующего вещества в реакторе, пропорциональное отношению линейной координаты к постоянной скорости потока, α - коэффициент, пропорциональный тепловому эффекту химической реакции. Заметим, возвратившись к (23), что вектор μ в данном случае состоит из двух компонент: $\mu = [v, \theta]^T$.

Для того чтобы описание способа решения уравнения (23) было более наглядным на рассматриваемом примере, воспользуемся при формулировке дискретной модели (24) методом сплайн-коллокации [17] (что не принципиально). Введем сетку по x , разбив отрезок $[0, 1]$ на M равных частей: $x_i = h(i-1)$, $h = 1/M$, $i = 1, \dots, M+1$, и будем искать $u(x)$ (24) в виде кубического сплайна с узлами коллока-

ции, совпадающими с x_i :

$$y(x) = \sum_{j=0}^{M+2} b_j V_j(x), \quad (26)$$

где b_j - коэффициенты разложения кубического сплайна по базису из нормализованных кубических В-сплайнов. При этом следует ожидать погрешность аппроксимации $y(x)$ порядка h^2 . Согласно определению $V_i(x)$ в узлах сетки имеем:

$$x = x_i: \quad y \approx \frac{1}{6}(b_{i-1} + 4b_i + b_{i+1}),$$

$$\frac{dy}{dx} \approx \frac{b_{i+1} - b_{i-1}}{2h}, \quad \frac{d^2y}{dx^2} \approx \frac{b_{i-1} - 2b_i + b_{i+1}}{h^2}.$$

После подстановки этих выражений в (24) приходим к системе из $M+1$ трансцендентных уравнений

$$F(b; Q, v) = 0, \quad (27)$$

где $b = [b_1, \dots, b_{M+1}]^T$ - неизвестный вектор размерности $M+1$; Q и v - параметры системы (27), а компоненты вектор-функции $F(b; Q, v)$ определяются по формулам:

$$F_1 = -b_1 + b_2 - \frac{h^2 Q}{6} f(y_1), \quad y_1 = \frac{2y_1 + y_2}{3},$$

$$F_i = \frac{i-2}{i-1} b_{i-1} - 2b_i + \frac{1}{i-1} b_{i+1} - h^2 Q f(y_i), \quad y_i = \frac{b_{i-1} + 4b_i + b_{i+1}}{6},$$

$$i = 2, 3, \dots, M,$$

$$F_{M+1} = -\frac{2}{M} b_M - 2(1 + \frac{2}{M}) b_{M+1} - h^2 Q f(v) - 6 \frac{M+1}{M} v.$$

Параметры b_0 и b_{M+2} исключены при помощи краевых условий задачи (24):

$$b_0 = b_2, \quad b_{M+2} = 6v - b_M - 4b_{M+1}.$$

Заметим, что (27) выгодно отличается от обычной разностной схемы по ряду обстоятельств, одним из которых является более высокая (с погрешностью порядка h^4) степень аппроксимации первой производной в краевых условиях, что положительно сказывается на

точности численного решения. При $k=1$ краевая задача (24) имеет точное решение

$$y(x) = v \frac{\operatorname{sh}(x\sqrt{Q})}{x \operatorname{sh}(\sqrt{Q})}, \quad \eta = \frac{3}{Q} [\sqrt{Q} \operatorname{cth}(\sqrt{Q}) - 1],$$

ориентируясь на которое, можно подобрать необходимое число разбиений M .

Очевидно, F_b является трехдиагональной матрицей с компонентами:

$$\frac{\partial F_1}{\partial b_1} = -1 - \frac{h^2 Q}{9} f'(y_1), \quad \frac{\partial F_1}{\partial b_2} = 1 - \frac{h^2 Q}{18} f'(y_1),$$

$$\frac{\partial F_i}{\partial b_{i-1}} = \frac{i-2}{i-1} - \frac{h^2 Q}{6} f'(y_i), \quad \frac{\partial F_i}{\partial b_{i+1}} = \frac{i}{i-1} - \frac{h^2 Q}{6} f'(y_i),$$

$$\frac{\partial F_i}{\partial b_i} = -2 - \frac{2h^2 Q}{3} f'(y_i), \quad i = 2, 3, \dots, M,$$

$$\frac{\partial F_{M+1}}{\partial b_M} = -\frac{2}{M}, \quad \frac{\partial F_{M+1}}{\partial b_{M+1}} = -2(1 + \frac{2}{M}),$$

где $f'(y) = ky^{k-1}$. Поскольку матрица F_b характеризуется свойством диагонального преобладания, то для решения системы линейных алгебраических уравнений

$$F_b \Delta b = -F,$$

определяющей вектор поправки Δb на каждой итерации по методу Ньютона-Канторовича, применим эффективный метод прогонки [18]. То же самое относится и к системам

$$F_b \frac{\partial b}{\partial Q} = -F_Q, \quad F_b \frac{\partial b}{\partial v} = -F_v$$

относительно вектора производных решения системы (27) по параметру Q и параметру v . Здесь F_Q и F_v - векторы с компонентами:

$$\frac{\partial F_1}{\partial Q} = -\frac{h^2}{6} f'(y_1), \quad \frac{\partial F_1}{\partial v} = 0,$$

$$\frac{\partial F_i}{\partial Q} = -\frac{h^2}{6} f(y_i), \quad \frac{\partial F_i}{\partial v} = 0, \quad i = 2, 3, \dots, M,$$

$$\frac{\partial F_{M+1}}{\partial Q} = -h^2 f(v), \quad \frac{\partial F_{M+1}}{\partial v} = -h^2 Q f'(v) + 6 \frac{M+1}{M}.$$

Рассматривая t как скалярный параметр, в (27) введем обозначение

$$\Phi(b, t) = F[b, Q(t), v(t)] = 0. \quad (28)$$

Пусть при некотором t известны $v(t)$, $\theta(t)$ и, следовательно, $\theta(t) = \beta u[\theta(t)]$. После того, как найдены вектор b из (28), а также векторы $\partial b / \partial Q$, $\partial b / \partial v$ и фактор эффективности

$$\eta = \frac{3}{Q f'(v)} \cdot \frac{b_{M+2} - b_M}{2h},$$

вычисляются правые части (25), dv/dt и $d\theta/dt$, а затем вектор

$$\frac{db}{dt} = \frac{\partial b}{\partial Q} \cdot \frac{dQ}{d\theta} \cdot \frac{d\theta}{dt} + \frac{\partial b}{\partial v} \frac{dv}{dt}, \quad \frac{dQ}{d\theta} = \beta \frac{du}{d\theta},$$

или

$$\frac{db}{dt} = \eta u(\theta) f(v) \left[\alpha \beta \frac{dQ}{d\theta} \frac{\partial b}{\partial Q} - \frac{\partial b}{\partial v} \right].$$

Теперь, согласно выбранному методу решения задачи Коши (метод Рунге-Кутты), ищется решение системы $\Phi(b, t + \Delta t) = 0$ с вектором $b(t) + \frac{db}{dt} \Delta t$ в качестве начального приближения и параметрами системы v и Q , значения которых равны $v(t) + \frac{dv}{dt} \Delta t$, $Q(t) + \frac{dQ}{dt} \Delta t$ соответственно, и так далее.

Результаты численного решения задачи (24), (25) при $\alpha = 2$, $\beta = 0.1$, $\gamma = 20$, $v_0 = 0.5$ представлены на рис. 4. Здесь приведены зависимости T/T_0 от t и v в случае реакции первого, второго и третьего порядка ($k = 1, 2, 3$). Как следует из (25), T линейно зависит от v . С ростом t (т.е. с увеличением длины реактора при одной и той же скорости потока) v стремится к нулю, а T - к максимальному значению $T_\infty = T_0(1 + \alpha v_0)$.

6. Параметризация, описанная в п. 3, позволяет унифицировать численное решение достаточно широкого класса нелинейных краевых задач, представленных в виде (I). С этой точки зрения расчет математических моделей стационарных режимов в зерне катализатора яв-

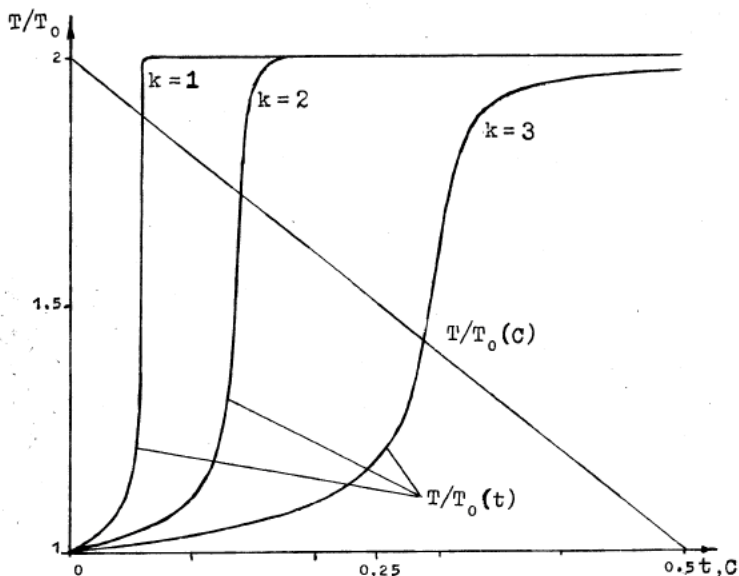


Рис. 4

ляется иллюстрацией применения предлагаемого метода. Заметим, что благодаря параметризации достигается структурная устойчивость краевой задачи (I). Тем самым разделяются проблема численного построения стационарных режимов и проблема их устойчивости по Ляпунову. Последняя становится просто очередным этапом исследования. В Институте математики СО АН СССР имеется программная реализация метода на языках "BASIC" и "FORTRAN". В частности, по этим программам были проведены расчеты, связанные с краевыми задачами пп. 2 и 4.

Автор выражает благодарность С.К.Годунову за проявленный интерес к работе. Конкретная формулировка краевой задачи, описывающая многокомпонентную диффузию, принадлежит С.И.Решетникову, и автору были весьма полезны обсуждения с ним результатов численного эксперимента.

Л и т е р а т у р а

1. КАНТОРОВИЧ Л.В. Функциональный анализ и прикладная математика // Успехи мат. наук. - 1948. - Т.3, №6. - С. 89-175.
2. KELLER H.V. Numerical methods for two-point boundary-value problems.- Ontario-London, Waltham, Mass-Toronto: Blaisdell Publishing Co, 1968.-184 p.

3. ОРТЕГА Дж., РЫНБОЛДТ В. Итерационные методы решения нелинейных систем уравнений со многими неизвестными. - М.: Мир, 1975. - 558 с.

4. ОДЕН Дж. Конечные элементы в нелинейной механике сплошных сред. - М.: Мир, 1976. - 464 с.

5. KUBICEK M., MAREK M. Computational Methods in Bifurcation Theory and Dissipative Structures.- New York-Berlin-Heidelberg-Tokyo: Springer-Verlag, 1983. - 243 p.

6. KUBICEK M. Dependence of Solution of Nonlinear System on Parameter// ACM Transactions on Mathematical Software. - 1976. - Vol.2, N 1.-P.98-107.

7. ЛУКЬЯНОВА Р.Г., ФАДЬЕВ С.И., ШЕПЛЕВ В.С. К расчету экзо-термической реакции первого порядка на зерне катализатора //Методы сплайн-функций. - Новосибирск, 1981. - Вып. 87: Вычислительные системы. - С. 99-113.

8. ФАДЬЕВ С.И. О решении системы трансцендентных уравнений с параметром методом Ньютона //Сплайн-аппроксимация и численный анализ. - Новосибирск, 1985. - Вып. 108: Вычислительные системы. - С. 78-93.

9. БЕЛЛИМАН Р., КАЛАБА Р. Квазилинеаризация и нелинейные краевые задачи. - М.: Мир, 1968.

10. ГОДУНОВ С.К. О численном решении краевых задач для систем линейных обыкновенных дифференциальных уравнений //Успехи мат.наук. - 1961. - Т.16, № 3. - С. 171-176.

11. КУЗНЕЦОВ С.В. Решение краевых задач для обыкновенных дифференциальных уравнений //Тр. Института математики СО АН СССР. - 1985. - Т.6. - С. 85-110.

12. ФРАНК-КАМЕНЕЦКИЙ Д.Д. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. - М.: Наука, 1967. - 490 с.

13. ИОФЕ И.И., ПИСЬМЕН Л.М. Инженерная химия гетерогенного катализа. - Л.: Химия, 1972. - 464 с.

14. ARIS R. The mathematical theory of diffusion and reaction in permeable catalysis.- Oxford: Clarendon press, 1975.- Vol.1. - 386 p.

15. RESHETNIKOV S.I., FADEEV S.I., SHEPLEV V.S. Methods for finding steady-state solutions of mathematical models for chemical-technological schemes// React. Kinet., Catal.Lett.-1986.-Vol.30, N 2.- P.275-281.

16. PATERSON W.R., GRESSWELL D.L. A simple method for the calculation of effectiveness factors// Chemical Engineering Science.-1971.-Vol.26.- P.605-616.

17. ЗАВЬЯЛОВ Ю.С., КВАСОВ Б.И., МИРОШНИЧЕНКО В.Л. Методы сплайн-функций. - М.: Наука, 1980. - 352 с.

18. ГОДУНОВ С.К., РЯБЕНЬКИЙ В.С. Разностные схемы. - М.:Наука, Гл.ред. физ.-мат.лит., 1973. - 400 с.

Поступила в ред.-изд.отд.
3 июня 1987 года