

# 反应、扩散化学动力学方程的有效解法<sup>\*</sup>

吕和祥<sup>1</sup>, 邱玉<sup>1</sup>, 陈建峰<sup>2</sup>

(1. 大连理工大学 工程力学系, 工业装备结构分析国家重点实验室, 大连 116023;  
2. 北京化工大学 教育部超重力工程研究中心, 北京 100020)

(本刊编委吕和祥来稿)

**摘要:** 对扩散、化学反应或瞬态温度场问题, 给出了具有 4 阶精度、自起步的隐式时间积分算法. 算例显示, 其精度和稳定性都好于四阶 Runge\_Kutta 法, 并且保留了原系数矩阵的稀疏存储方式和稀疏矩阵的运算规则, 使紧缩存储技术和减少计算时间有效的结合. 以旋转填充床内的竞争串联反应为算例, 表明该算法是有效的.

**关键词:** 逐步时间积分; 扩散; 化学反应动力学; 旋转填充床; 微观混合  
**中图分类号:** O241.81; O362      **文献标识码:** A

## 引 言

对于扩散、化学反应动力学方程或瞬态温度场问题, 在空间离散后将得到一个以时间为变量的一阶常微分方程组. 对于这样的常微分方程组的数值解法已有悠久的历史, 有很多专著和教科书<sup>[1-4]</sup>介绍了各种数值解法, 如 Euler 法、Crank\_Nickolson 法、Runge\_Kutta 法和其他多步法, 如 Adams\_Bashforth 等. 多步法, 当其步数多时, 精度很高, 其缺点是不能自起步, 在开始计算的若干步必须借助其他的单步法. 四阶 Runge\_Kutta 法是较常用的方法, 该方法稳定性较差. 专著[1]给出了一个具有 4 阶精度的算法, 数据存储要求是满阵的, 只有质量阵是集中质量阵或对角阵才能保留原稀疏矩阵的存储方式. 精细积分法<sup>[5,6]</sup>可以得到具有计算机精度的数值解, 但要求满阵存储和满阵运算.

本文提出的隐式直接积分法, 是基于隐式 Adams 的多步积分法<sup>[1]</sup>, 所不同的是, 近似被积函数的插值函数所取的参数不同. Adams 方法是用当前时间点和以前若干时间点上已经求得的函数值作参数, 而本文方法所取的参数是当前时间已经求得的函数值及其导数和下一时间步欲求的函数值, 这样方程的右端也有下一时间步的函数值, 所以本方法是隐式的. 然而, 本算法保留了原稀疏矩阵的存储方式和稀疏矩阵的计算方法, 节省了空间和计算时间. 算例显示, 在时间步较大时, 本文的结果无论是精度和稳定性都好于四阶 Runge\_Kutta 法.

我们将本方法应用于旋转填充床微观混合的扩散、竞争串联化学反应的计算, 所要计算的

\* 收稿日期: 2004\_05\_17; 修订日期: 2005\_12\_19

作者简介: 吕和祥(1938—), 教授, 博士, 博士生导师(联系人, Tel: + 86\_411\_84709171; E\_mail: lhxdlut@yahoo.com.cn);

陈建峰(1965—), 教授, 博士, 博士生导师(联系人, Tel: + 86\_10\_64715446; E\_mail: chenjf@mail.buct.edu.cn).

是两种流体的液滴经过两层填料之间的化学反应过程. 实际上本问题还包含有对流项, 但这里假定流体是匀速流动的, 借助流动坐标变换, 将一个对流扩散的化学反应问题变换成一个扩散、化学反应问题, 避开了由于对流项的存在而引起计算上的麻烦<sup>[2~4]</sup>.

## 1 四阶精度的隐式算法

### 1.1 积分格式

已知常微分方程组

$$M\dot{x} = -Ax + f(t). \quad (1)$$

将方程(1)的两端乘以  $M^{-1}$  (对于通常的空间离散步骤,  $M^{-1}$  一般是存在的), 得

$$\dot{x} = -M^{-1}Ax + M^{-1}f; \quad (2)$$

积分方程(2), 有

$$x(t) = x(t_k) + \int_{t_k}^t (-M^{-1}Ax + M^{-1}f) d\zeta; \quad (3)$$

将方程(3)的两端乘以矩阵  $M$ , 有

$$Mx(t) = Mx(t_k) - A \int_{t_k}^t x(\zeta) d\zeta + \int_{t_k}^t f(\zeta) d\zeta. \quad (4)$$

在  $t_k$  时刻, 假定  $x(t_k)$  是已知的, 则可由上式求在  $t = t_k + \tau$  时刻的  $x(t_k + \tau)$ , 其中  $\tau$  是给定的时间步, 在(4)式中令  $t = t_k + \tau$ , 则有

$$Mx(t_k + \tau) = Mx(t_k) - A \int_{t_k}^{t_k + \tau} x(\zeta) d\zeta + \int_{t_k}^{t_k + \tau} f(\zeta) d\zeta. \quad (5)$$

方程(5)右端积分号下的  $x(\zeta)$  ( $t_k \leq \zeta \leq t_k + \tau$ ) 是未知的, 可由下面具有4阶截断误差的三次多项式近似:

$$x(t) = x(t_k) + \dot{x}(t_k)(t - t_k) + \ddot{x}(t_k)(t - t_k)^2/2 + a_3(t - t_k)^3/6 + O(t - t_k)^4, \quad (6)$$

其中  $x(t_k)$ 、 $\dot{x}(t_k)$ 、 $\ddot{x}(t_k)$  在  $t_k$  时刻是已知的. 令  $t = t_k + \tau$ , 则有

$$a_3 = \frac{6}{\tau^3} \left[ x(t_k + \tau) - x(t_k) - \dot{x}(t_k)\tau - \ddot{x}(t_k)\frac{\tau^2}{2} \right]. \quad (7)$$

将(6)式代入(5)式, 得校正的具有5阶截断误差的  $x(t_k + \tau)$ , 有方程

$$Mx(t_k + \tau) = Mx(t_k) - A \left[ x(t_k)\tau + \dot{x}(t_k)\frac{\tau^2}{2} + \ddot{x}(t_k)\frac{\tau^3}{6} + a_3\frac{\tau^4}{24} + O(\tau^5) \right] + \int_{t_k}^{t_k + \tau} f(\zeta) d\zeta; \quad (8a)$$

将  $\dot{x}(t_k) = M^{-1}[-Ax(t_k) + f(t_k)]$ ,  $\ddot{x}(t_k) = M^{-1}[-A\dot{x}(t_k) + \dot{f}(t_k)]$  代入上式, 整理后有方程

$$E \cdot x(t_k + \tau) = R \cdot x(t_k) + F_k + \int_{t_k}^{t_k + \tau} f(\zeta) d\zeta; \quad (8b)$$

$$E = M + \frac{\tau}{4}A, \quad R = M - \frac{3\tau}{4}A + \frac{\tau^2}{4}AM^{-1}A - \frac{\tau^3}{24}AM^{-1}AM^{-1}A, \quad (9)$$

$$F_k = M^{-1} \left[ \frac{\tau^2}{4}f_k + \frac{\tau^3}{24} + \dot{f}_k \right] - \frac{\tau^3}{24}M^{-1}AM^{-1}f_k, \quad (10)$$

上式中的下标  $k$  表示函数在时间  $t_k$  时的值. (8) 式是个隐式方程, 由(10)式可以看出, 矩阵  $E$

保留了原系数矩阵稀疏的存储方式, 其三角化  $LDL^T$  也保留了稀疏矩阵的存储方式. 至于右端项虽然有矩阵相乘, 矩阵  $R$  是个方的满矩阵, 但可以逐次作矩阵和列向量相乘, 如  $AM^{-1}Ax = A[M^{-1}(Ax)]$ , 这样作也能够保留稀疏矩阵的存储方式及带状阵和列向量相乘的运算, 不需要存储满矩阵  $R$ .

### 1.2 稳定性讨论

$n$  阶联立方程组(8), 在  $\lambda Mx = -Ax$  特征系统坐标系下, 将转化为  $n$  个互不耦联的独立的微分方程<sup>[1]</sup>. 因此在特征系统坐标系下, 应用方程(8b) 于任何一个方程, 其中的矩阵都是一个实数, 令  $M = 1, A = -\lambda$  则(8b) 式成为

$$x(t_k + \tau) = \left[ \left[ 1 - \frac{3\tau}{4}\lambda + \frac{\tau^2}{4}\lambda^2 - \frac{\tau^3}{24}\lambda^3 \right] \left[ 1 + \frac{\tau}{4}\lambda \right] \right] \cdot x(t_k).$$

显然只有

$$\left| 1 + \frac{\tau}{4}\lambda \right| > \left| 1 - \frac{3\tau}{4}\lambda + \frac{\tau^2}{4}\lambda^2 - \frac{\tau^3}{24}\lambda^3 \right|,$$

$$0 < \lambda < 5.5, 0 < \tau < \frac{5.5}{\lambda_{\max}}$$

时, 算法才是稳定的. 这里的时间步比文献[1]中条件稳定的 Euler 法的步长大一倍.

#### 1.2.1 算例: 求解常微分方程组

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \dot{x}_1 \\ \dot{x}_2 \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} -2 & 1 \\ 1 & -2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{Bmatrix},$$

初始条件:  $x_1(0) = 1, x_2(0) = 0$ .

$$M = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, A = \begin{bmatrix} -2 & 1 \\ 1 & -2 \end{bmatrix}.$$

图1中给出了本文积分算法和 Runge\_Kutta 方法的计算结果, 其中, 实线 A 是解析解, 带黑点的点线 Int 是本文积分算法的结果, 带叉的虚线 R 是 Runge\_Kutta 法的结果, 显然, 在较大的时间步长时本文方法给出较好的结果.

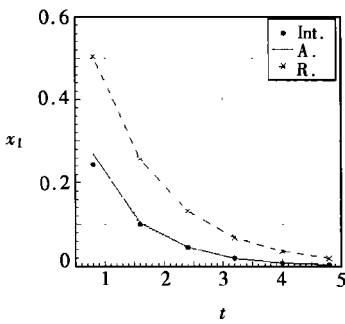


图1 精确解和数值解的比较  
(时间步长  $\tau = 0.8$ )

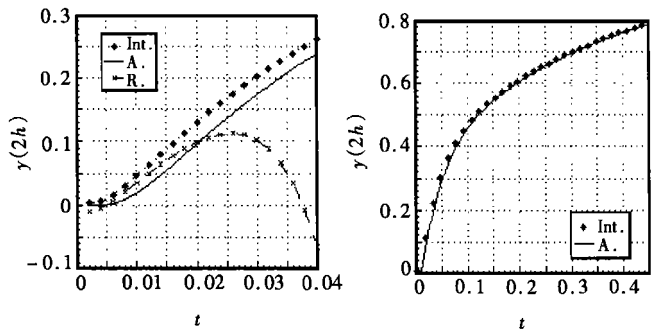


图2 一维初始值问题  $y(2h)$  的精确解与数值解的比较(时间步长  $\tau = 0.003$ )

#### 1.2.2 解一维初始值问题<sup>[1]</sup>

$$y'' = y, \quad 0 < x < 1, t > 0,$$

$$y(0, t) = 1, y'(1, t) = 0, \quad t > 0,$$

$$y(0, t) = 0, \quad 0 \leq x \leq 1.$$

求解域  $[0, 1]$  分 6 个相等的单元, 单元形函数取 3 次多项式, 以  $y_1, y_2, y'_1, y'_2$  为节点参数. 图 2

显示了  $y(2h)$  的计算值和解析解值随时间的变化, 时间步长  $\tau = 0.003$ . 为了清晰, 其左图用放大的尺寸仅显示了在  $0.04\text{ s}$  前的结果, 已经看出 Runge\_Kutta 的结果趋于发散. 而右图没有给出 Runge\_Kutta 法的结果, 是因为该方法给出了一个发散的結果. 显然, 本文方法较 Runge\_Kutta 法有较好的稳定性.

### 1.3 非线性常微分方程组的求解

求解非线性问题一般都用迭代法, 本文将非线性项都合并到右端项中, 即(8)式的积分项

$$\int_{t_k}^{t_k+\tau} f(\zeta, \mathbf{x}(\zeta)) d\zeta$$

往往为了方便积分, 函数  $f(t, \mathbf{x}(t))$  取为在  $t = t_k$  时刻的常数值或区间  $t_k \leq t \leq t_k + \tau$  的线性函数, 则有

$$\int_{t_k}^{t_k+\tau} f(\zeta, \mathbf{x}(\zeta)) d\zeta = \tau \cdot f(t_k, \mathbf{x}(t_k)) \tag{11}$$

或 
$$\int_{t_k}^{t_k+\tau} f(\zeta, \mathbf{x}(\zeta)) d\zeta = \frac{\tau}{2} [f(t_k, \mathbf{x}(t_k)) + f(t_k + \tau, \mathbf{x}(t_k + \tau))], \tag{12}$$

其中  $\mathbf{x}(t_k + \tau)$  用其预测值  $\mathbf{x}(t_k + \tau) = \mathbf{x}(t_k) + \tau \cdot \mathbf{x}'(t_k)$ . 用(12)式, 虽然迭代的次数可能少些, 但计算预测值要花费时间. 对于每个时间步要作迭代, 直到所求的解满足一定的精度, 再计算下一个时间步.

## 2 基于层状扩散模型的二维化学反应动力学方程

作为本算法的应用, 研究在旋转填充床内两个液膜在通过填料层后的混合、扩散、反应, 为旋转填充床内混合机理的研究提供基础. 由于旋转填充床内液体并非以连续相的形式存在, 而是被旋转填料粉碎为液体微元, 这些微元的形状和运动很复杂, 本文采用层状扩散模型<sup>[7,8]</sup>. 模型如图3所示, 两片厚度为  $\delta$  ( $y$  轴方向)、长度为  $L$  ( $x$  轴方向)的液膜, 它们在  $(0, 0)$  处相遇, 然后一起沿着  $x$  轴方向流动. 由 Reynold 数定义可得:

$$Re = \frac{4\delta_0 Q}{\mu} \approx 20 < 25,$$

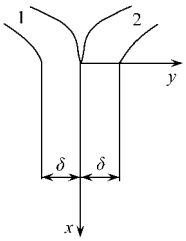


图3 层状扩散模型

故可以认为它们的流动是层流.

简化假定有: 两片液膜相遇前沿  $x$  轴方向的速度相同; 沿  $y$  轴方向的速度  $v_y$  不大, 两片液膜的  $v_y$  互相抵消, 即  $v_y = 0$ , 同时忽略由此造成的相遇时的扰动; 沿  $z$  轴方向没有流动, 因此简化为二维平面流动.

由此推导出的旋转填充床内对流扩散化学反应动力学方程为

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + v_x \frac{\partial c_i}{\partial x} = D \left[ \frac{\partial^2 c_i}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c_i}{\partial y^2} \right] - r_i, \tag{13}$$

式中,  $v_x$  为  $x$  方向的速度;  $c_i$  为  $i$  组分的浓度;  $D$  为分子扩散系数;  $r_i$  为化学反应项, 即  $i$  组分的化学反应消耗速率.

### 2.1 方程的无量纲化及流动坐标系的建立

本例计算的是 1-萘酚与对氨基苯磺酸重氮盐的偶氮化合竞争串联反应. 采用 A、B、R、S 分别代表 1-萘酚、对氨基苯磺酸重氮盐、一次产物(单偶氮染料)、二次产物(双偶氮染料), 该反应为:  $A + B \rightarrow R; B + R \rightarrow S$ , 对应公式(13)中的反应项分别为

$$\begin{cases} r_A = k_1 C_A C_B, & r_B = k_1 C_A C_B + k_2 C_B C_R, \\ r_R = -k_1 C_A C_B + k_2 C_B C_R, & r_S = -k_2 C_B C_R, \end{cases} \quad (14)$$

其中,  $k_1$  和  $k_2$  为速率常数. 故(13)式无量纲化后得:

$$\frac{\partial C_i}{\partial T} + V_X \frac{\partial C_i}{\partial X} = \frac{\partial^2 C_i}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 C_i}{\partial Y^2} - m R_i, \quad i = A, B, R, S. \quad (15)$$

其反应项为

$$R_A = \frac{k_1}{k_2} C_A C_B, \quad R_B = \frac{k_1}{k_2} C_A C_B + C_B C_R,$$

$$R_R = -\frac{k_1}{k_2} C_A C_B + C_B C_R, \quad R_S = -C_B C_R.$$

上式中无因次变量分别为: 无因次时间  $T = tD/\delta^2$ ; 无因次浓度  $C_i = c_i/c_{B0}$ ; 无因次速度  $V_X = v_x \delta/D$ ; 无因次坐标  $X = x/\delta$ ,  $Y = y/\delta$ ; 混合模数  $m = k_2 c_{B0} \delta^2/D$ .

假定速度  $v_x$  在整个计算域上是不变的, 故本例采用流动坐标系, 将对流、扩散化学反应动力学方程转化为只有扩散的化学反应动力学方程. 引入流动坐标变换:

$$X' = V_X T - X, \quad (16a)$$

$$Y' = Y, \quad (16b)$$

则

$$\frac{\partial C_i}{\partial T} \Big|_{X=\text{const}} = \frac{\partial C_i}{\partial X'} \frac{\partial X'}{\partial T} + \frac{\partial C_i}{\partial T} \Big|_{X'=\text{const}} = V_X \frac{\partial C_i}{\partial X'} + \frac{\partial C_i}{\partial T} \Big|_{X'=\text{const}}, \quad (17a)$$

$$V_X \frac{\partial C_i}{\partial X} = -V_X \frac{\partial C_i}{\partial X'}. \quad (17b)$$

将(17)式代入(15)式可得在流动坐标系下无量纲化的扩散反应动力学方程

$$\frac{\partial C_i}{\partial T} = \frac{\partial^2 C_i}{\partial X'^2} + \frac{\partial^2 C_i}{\partial Y'^2} - m R_i, \quad i = A, B, R, S.$$

为书写方便, 省略  $X'$ 、 $Y'$  的上标直接写为

$$\frac{\partial C_i}{\partial T} = \frac{\partial^2 C_i}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 C_i}{\partial Y^2} - m R_i, \quad i = A, B, R, S. \quad (18)$$

## 2.2 扩散反应方程的空间离散及其解法

采用 Galerkin<sup>[9]</sup>法离散方程(18). 将矩形域划分为矩形单元, 单元形函数取  $X$  和  $Y$  方向的三次多项式, 节点参数取节点的浓度及其  $X$  和  $Y$  方向的导数. 由形函数的定义, 例如, A 物质的浓度可以离散地表示为

$$C_A(X, Y) = N(X, Y) \cdot \mathbf{a}, \quad (19)$$

其中  $\mathbf{a}^T = \{a_1, a_2, \dots, a_n\}$  表示浓度  $C_A$  在  $n$  个节点上的值,  $N(X, Y)$  是形函数矩阵. 借助 Galerkin 法离散方程(18), 浓度  $C_A(X, Y)$  方程的弱形式:

$$\iint_{\Omega} w C_A d\Omega = \iint_{\Omega} w \left[ \frac{\partial^2 C_A}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial Y^2} \right] d\Omega - \iint_{\Omega} w m R_A d\Omega, \quad (20a)$$

其中权函数

$$w \in W = \{w \in C^0, w|_{\partial\Omega} = 0\}. \quad (20b)$$

形函数满足条件(20b), 于是取形函数作权函数, 有下面离散方程:

$$\mathbf{M} \cdot \mathbf{a} = \mathbf{E} \cdot \mathbf{a} - \mathbf{F}_a, \quad (21)$$

其中系数矩阵

$$M = \iint_{\Omega} N^T N d\Omega, \quad E = - \iint_{\Omega} \left( \frac{\partial N^T}{\partial X} \frac{\partial N}{\partial X} + \frac{\partial N^T}{\partial Y} \frac{\partial N}{\partial Y} \right) d\Omega,$$

$$F_a = \iint_{\Omega} N^T m R_A d\Omega = m \iint_{\Omega} N^T (a^T N^T N b) d\Omega$$

上式的积分可以用 Gauss 数值积分. 类似可以得到关于浓度  $C_B$ 、 $C_R$ 、 $C_S$ , 即列向量  $b$ 、 $r$ 、 $s$  的方程, 其矩阵  $M$  和  $E$  不变, 只有右端项变化. 方程(21)借助(8b)式求解.

初始条件 ( $T = 0$ ):

$$X = 0, 0 \leq Y \leq 1, a_0 = 1; 1 \leq Y \leq 2, b_0 = 1;$$

$$X > 0, a_0 = b_0 = r_0 = s_0 = 0.$$

边界条件为:

$$X = 0 (X' = V_x \cdot T), 0 \leq Y \leq 1, a = a_0; 1 \leq Y \leq 2, b = b_0.$$

以上各式中的下标 0 表示在时间  $t = 0$  时刻有关向量满足坐标区间各分量的值.

变换式(17)相当于在流体上建立一个固定坐标系, 在该坐标系上的计算域就是流体流过的区域, 因此其计算域随着时间增加而增加, 如图 4. 流体(在  $X$  方向) 流过一个空间步长的时间是  $\tau = dX/V_x$ . 当  $0 < T < \tau$  时, 计算域(在  $X$  方向) 只是一个空间步长, 这一个空间步长上的流体的化学反应时间是  $\tau$ . 当  $0 < T < 2 \times \tau$  时, 计算域则是两个空间步长, 对于流体介质前端空间网格, 即第 2 列网格上的流体, 其化学反应时间是  $2\tau$ ; 而第 1 列网格上流体介质, 由于是刚刚流入计算域, 其化学反应时间是  $\tau$ . 依此类推, 在  $0 < T < j \times \tau$  时, 各个列的空间网格上参加反应的物质其化学反应时间分别为  $\tau, 2\tau, \dots, j\tau$ . 例如  $T = 16\tau, T = 20\tau$  时, 计算域如图 4 所示.

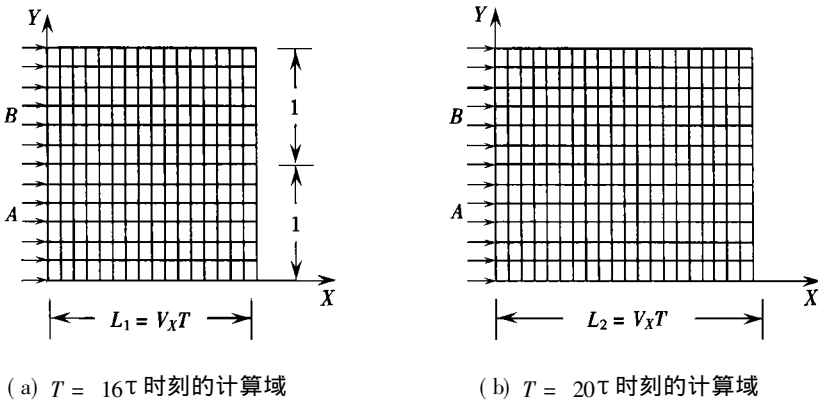


图 4 不同时刻的计算域

### 2.3 计算结果及讨论

考虑旋转填充床内一层填料中的化学反应, 总的计算域为  $199 \times 12$  的网格,  $X$  方向的间距为 0.4, 总长为 79.6;  $Y$  方向间距为 0.1667, 总宽为 2. 无量纲速度  $V_x = 100$ ; 混合模数  $M = 0.2$ ; 速率常数  $k_1 = 3800, k_2 = 1.56$ . 液体流到网格的最右端 ( $X = 79.6$ ) 处, 停止计算. 图 5 和图 6 给出了此时不同截面上物质 A 和物质 R 的变化.

从图 5 中可以看出, 沿流动方向, 一次产物 R 基本上随  $X$  坐标的增加而增加, 但是反应物 A 的浓度却是逐渐减小的. 从图 6 可看出在 A 和 B 物质交界的地方, 迅速反应生成 R 物质, 故  $Y = 1.0$  附近物质 R 的浓度最大, 两侧的浓度逐渐减小. 当  $Y > 1$  时, 物质 A 的浓度不等于零

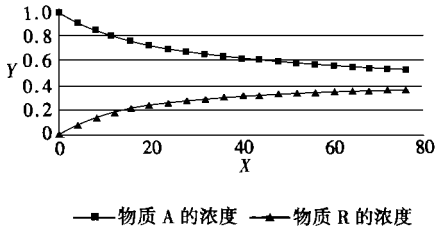


图5  $Y = 0.833$  截面上物质  
A 和 R 的浓度分布

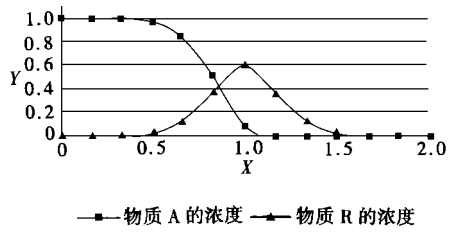


图6  $X = 76$  截面上物质 A 和 R  
的浓度分布

反应了扩散作用。

### 3 结 论

给出了计算扩散反应化学动力学方程的具有 4 阶精度、自起步的隐式算法。算例表明算法是有效的, 当时间步长较大时其精度明显的好于 Runge\_Kutta 法, 其稳定性好于 Runge\_Kutta 法。本算法应用于旋转填充床内的竞争串联化学反应动力学方程计算, 给出了符合实际的结果。在效率方面, 本算法保留了原系数矩阵的稀疏存储方式, 因此该算法也保留了适于稀疏矩阵的运算的计算方法, 如带状矩阵的三角化分解及带状矩阵和列向量相乘的运算, 这样既节省存储空间又节省计算时间。

### [参 考 文 献]

- [1] Fried Isaac. Numerical Solution of Differential Equations [M]. New York, San Francisco, London: Academic Press, 1979.
- [2] Brooks Alexander N. Streamline upwind/ Petrov\_Galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier\_Stokes equations[J]. Comput Methods Appl Mech Engrg, 1982, **32**(1/ 3): 199—259.
- [3] Russo Alessandro. Bubble stabilization of finite element methods for the linearized incompressible Navier\_Stokes equations[J]. Comput Methods Appl Mech Engrg, 1996, **132**(3/ 4): 335—343.
- [4] Baiocchi Claudio, Brezzi Franco. Virtual bubbles and Galerkin\_least\_squares type methods( GaLS) [J]. Comput Methods Appl Mech Engrg, 1993, **105**(1): 125—141.
- [5] 钟万勰. 计算结构力学与最优控制[M]. 大连: 大连理工大学出版社, 1993.
- [6] 吕和祥, 于洪洁, 裘春航. 精细积分的非线性动力学积分方程及其解法[J]. 固体力学学报, 2001, **22**(3): 303—308.
- [7] 陈建峰, 等. 超重力技术及应用——新一代反应与分离技术[M]. 北京: 化学工业出版社, 材料科学与工程出版中心, 2002.
- [8] 刘骥. 旋转填充床内微观混合研究及液\_液相法制备碳酸锶纳米粉体[D]. 博士学位论文. 北京: 北京化工大学, 2000.
- [9] 监凯维奇 O C. 有限元法[M]. 北京: 科学出版社, 1985.

## Effective Solution Method of Chemical Reaction Kinetics With Diffuse

LÜ He\_xiang<sup>1</sup>, QIU Kun\_yu<sup>1</sup>, CHEN Jian\_feng<sup>2</sup>

(1. Department of Engineering Mechanics, Key Laboratory of Structural Analysis for Industrial Equipment, Dalian University of Technology, Dalian 116023, P. R. China;

2. Research Center of the Ministry of Education for High Gravity Engineering and Technology, Beijing University of Chemical Technology, Beijing 100020, P. R. China)

**Abstract:** The time integration method with four\_order accuracy, self\_starting and implicit for the diffuse chemical reaction kinetics equation or the transient instantaneous temperature field equation was presented. The examples show that both accuracy and stability are better than Runge\_Kutta method with four\_order. The coefficients of the equation are stored with sparse matrix pattern, so an algorithm is presented which combines a compact storage scheme with reduced computation cost. The computation of the competitive and consecutive reaction in the rotating packed bed is taken as examples which shows that the method is effective.

**Key words:** step\_by\_step integration; diffuse; chemical reaction kinetics; rotating packed bed; micro\_mixing