

نفوذ و واکنش در یک کاتالیست صفحه‌ای از سینتیک غیرخطی هینشل‌وود پیروی می‌کند که معادله دیفرانسیلی انتقال جرم بدون بعد آن به صورت زیر می‌باشد:

$$\frac{d^2 y}{dx^2} - \frac{\varphi^2 y}{1 + \delta y + \gamma y^2} = 0$$

$$x = 0; \frac{dy}{dx} = 0$$

$$x = 1; y = 1$$

با استفاده از روش پرتابی، پروفایل غلظت بدون بعد (y) را به دست آورید. از روش رانگ-کوتا مرتبه دوم با گام 0.25 برای انتگرال‌گیری از معادلات دیفرانسیل استفاده نمایید.

سایر اطلاعات مورد نیاز:

$$\varphi^2 = 0.5, \delta = 0.2, \gamma = 0.01$$

$$\frac{d^2 y}{dx^2} - \frac{\varphi^2 y}{1 + \delta y + \gamma y^2} = 0$$

$$\frac{dy_1}{dx} = y_2$$

$$\frac{dy_2}{dx} = \frac{\varphi^2 y_1}{1 + \delta y_1 + \gamma y_1^2} = \frac{0.5 y_1}{1 + 0.2 y_1 + 0.01 y_1^2}$$

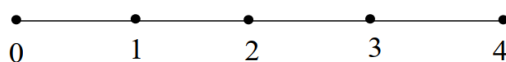
روش Rung-Kutta مرتبه دوم:

$$k_1 = hf(x_i, y_i)$$

$$k_2 = hf(x_i + h, y_i + k_1)$$

$$y_{i+1} = y_i + \frac{1}{2}(k_1 + k_2)$$

حدس: در $x = 0$ ، مقدار $y_1 = 0.5$ در نظر گرفته می‌شود.



گره یک:

$$\frac{d}{dx} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_2 \\ \frac{0.5 y_1}{1 + 0.2 y_1 + 0.01 y_1^2} \end{bmatrix}, y(0) = \begin{bmatrix} 0.5 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$k_1 = 0.25 \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{0.5 \times 0.5}{1 + 0.2 \times 0.5 + 0.01 \times 0.5^2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0.0567 \end{bmatrix}$$

$$k_2 = 0.25 \left[\frac{0 + 0.0567}{0.5 \times (0.5 + 0)} \right] = \begin{bmatrix} 0.0142 \\ 0.0567 \end{bmatrix}$$

$$y(0.25) = y(0) + \frac{1}{2}(k_1 + k_2) = \begin{bmatrix} 0.5 \\ 0 \end{bmatrix} + \frac{1}{2} \left(\begin{bmatrix} 0 \\ 0.0567 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0.0142 \\ 0.0567 \end{bmatrix} \right) = \begin{bmatrix} 0.5071 \\ 0.0567 \end{bmatrix}$$

گره دو:

$$\frac{d}{dx} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_2 \\ 0.5y_1 \end{bmatrix}, y(0.25) = \begin{bmatrix} 0.5071 \\ 0.0567 \end{bmatrix}$$

$$k_1 = 0.25 \left[\frac{0.0567}{0.5 \times 0.5071} \right] = \begin{bmatrix} 0.0142 \\ 0.0574 \end{bmatrix}$$

$$k_2 = 0.25 \left[\frac{0.0567 + 0.0574}{0.5 \times (0.5071 + 0.0142)} \right] = \begin{bmatrix} 0.0285 \\ 0.0589 \end{bmatrix}$$

$$y(0.5) = y(0.25) + \frac{1}{2}(k_1 + k_2) = \begin{bmatrix} 0.507 \\ 0.057 \end{bmatrix} + \frac{1}{2} \left(\begin{bmatrix} 0.0142 \\ 0.0574 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0.0285 \\ 0.0589 \end{bmatrix} \right) = \begin{bmatrix} 0.5284 \\ 0.1297 \end{bmatrix}$$

گره سه:

$$k_1 = \begin{bmatrix} 0.0287 \\ 0.0596 \end{bmatrix}$$

$$k_2 = \begin{bmatrix} 0.0436 \\ 0.0625 \end{bmatrix}$$

$$y(0.75) = y(0.5) + \frac{1}{2}(k_1 + k_2) = \begin{bmatrix} 0.5646 \\ 0.1759 \end{bmatrix}$$

گره چهار:

$$k_1 = \begin{bmatrix} 0.0440 \\ 0.0632 \end{bmatrix}$$

$$k_2 = \begin{bmatrix} 0.0598 \\ 0.0676 \end{bmatrix}$$

$$y(1) = y(0.75) + \frac{1}{2}(k_1 + k_2) = \begin{bmatrix} 0.6165 \\ 0.2413 \end{bmatrix}$$

با توجه به اختلاف در $y_1(1) = 0.6165$ محاسبه شده بر اساس حدس $y_1(0) = 0.5$ و مقدار واقعی در صورت مسئله ($y_1(1) = 1$) باید حدس جدیدی برای مقدار y_1 در نقطه $x = 0$ در نظر بگیریم. مقدار حدس جدید را برابر با $y_1(0) = 0.8$ در نظر می‌گیریم که نتایج در جدول زیر گزارش شده است.

y_1	0.8000	0.8107	0.8430	0.8975	0.9756
y_2	0	0.0857	0.1734	0.2650	0.3623

برای تعیین حدس جدید y_1 به صورت زیر عمل می‌کنیم:

$$y_{\text{حدس جدید}} = y_{\text{حدس اول}} + \frac{y_{\text{حدس اول}} - y_{\text{حدس دوم}}}{y_{\text{دست آمده با حدس دوم در مرز انتهایی}} - y_{\text{دست آمده با حدس اول در مرز انتهایی}}} (y_{\text{دقیق در مرز انتهایی}} - y_{\text{دست آمده با حدس اول در مرز انتهایی}})$$

$$y_1(0) = 0.5 + \frac{0.8 - 0.5}{0.9756 - 0.6165} (1 - 0.6165) = 0.8203$$