

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПИРОЛИЗА ЭТАНА ЯВНЫМ МЕТОДОМ ТРЕТЬЕГО ПОРЯДКА ТОЧНОСТИ¹

Аннотация. Получены коэффициенты явного трехстадийного метода типа Рунге – Кутты. Построены неравенства для контроля точности вычислений и устойчивости численной схемы. Результаты моделирования пиролиза этана демонстрируют повышение эффективности за счет дополнительного контроля устойчивости.

Ключевые слова: жесткая задача, явный метод, контроль точности и устойчивости, пиролиз этана.

Abstract. Coefficients of explicit three-stage Runge – Kutta method have been obtained. The inequalities for exactness of calculations control and stability control of numerical scheme have been developed. Result numerical modeling of ethane pyrolysis demonstrate an efficiency increase with an additional stability control.

Keywords: stiff problem, explicit method, control accuracy and stability, pyrolysis of ethane.

Введение

Во многих приложениях возникает необходимость решения задачи Коши для жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений. Обычно для численного решения таких задач применяют алгоритмы на основе неявных или полуявных численных формул вследствие их хороших свойств устойчивости. В данных методах используется декомпозиция матрицы Якоби с выбором главного элемента по строке или столбцу, а иногда и по всей матрице. При большой размерности исходной системы это отдельная трудоемкая задача. Если элементы матрицы Якоби носят нерегулярный характер, то получение данной матрицы и составление подпрограммы ее нахождения требуют от вычислителя больших затрат времени. Это характерно, например, для дифференциальных уравнений химической кинетики. При численном определении данной матрицы возникает проблема с выбором шага численного дифференцирования. В такой ситуации предпочтительнее применять алгоритмы на основе явных численных формул, если жесткость задачи позволяет за разумное время получить приближение к решению [1].

Современные алгоритмы на основе явных методов в большинстве своем не приспособлены для решения жестких задач по следующей причине. Обычно алгоритм управления шагом интегрирования строится на контроле точности численной схемы. Это естественно – основным критерием является точность нахождения решения. Однако при применении таких алгоритмов для решения жестких задач этот подход приводит к потере эффективности и надежности, потому что на участке установления вследствие противоречивости требований точности и устойчивости шаг интегрирования раскачивается. В лучшем случае это приводит к большому количеству повторных вычислений решения, а шаг выбирается значительно меньше допустимого. Этого

¹ Работа поддержана грантами РФФИ № 08-01-00621 и Президента НШ-3431.2008.9

можно избежать, если наряду с точностью контролировать устойчивость численной схемы.

В настоящее время можно выделить два подхода к контролю устойчивости [2–3]. Первый способ связан с оценкой максимального собственного числа матрицы Якоби f_y через ее норму с последующим контролем (наряду с контролем точности) неравенства $h\|f_y\| \leq D$ [2], где h есть шаг интегрирования, а положительная постоянная D зависит от размера области устойчивости метода. Ясно, что для явных методов, в которых матрица Якоби f_y не участвует в вычислительном процессе, это приводит дополнительно к ее нахождению и, следовательно, к значительному увеличению вычислительных затрат.

Второй подход основан на оценке максимального собственного числа $\lambda_{\max}$ матрицы Якоби степенным методом через приращения правой части системы дифференциальных уравнений с последующим контролем неравенства $h|\lambda_{\max}| \leq D$ [3]. Во всех рассмотренных ситуациях такая оценка фактически не приводит к увеличению вычислительных затрат [1, 3].

В данной работе построен алгоритм интегрирования переменного шага на основе трехстадийной схемы типа Рунге – Кутты третьего порядка с контролем точности вычислений и устойчивости численной схемы. На примере моделирования пиролиза этана продемонстрировано повышение эффективности расчетов за счет дополнительного контроля устойчивости.

1. Численная схема

Для численного решения задачи Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений

$$y' = f(y), \quad y(t_0) = y_0, \quad t_0 \leq t \leq t_k, \quad (1)$$

рассмотрим явный трехстадийный метод типа Рунге – Кутты вида

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + p_1 k_1 + p_2 k_2 + p_3 k_3, \\ k_1 &= hf(y_n), \quad k_2 = hf(y_n + \beta_{21} k_1), \\ k_3 &= hf(y_n + \beta_{31} k_1 + \beta_{32} k_2), \end{aligned} \quad (2)$$

где y и f – вещественные N -мерные вектор-функции; t – независимая переменная; h – шаг интегрирования; k_1 , k_2 и k_3 – стадии метода; p_1 , p_2 , p_3 , β_{21} , β_{31} и β_{32} – числовые коэффициенты, определяющие свойства точности и устойчивости (2). В случае неавтономной задачи

$$y' = f(t, y), \quad y(t_0) = y_0, \quad t_0 \leq t \leq t_k,$$

схема (2) записывается в виде

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + p_1 k_1 + p_2 k_2 + p_3 k_3, \\ k_1 &= hf(t_n, y_n), \\ k_2 &= hf(t_n + \beta_{21} h, y_n + \beta_{21} k_1), \\ k_3 &= hf(t_n + [\beta_{31} + \beta_{32}] h, y_n + \beta_{31} k_1 + \beta_{32} k_2). \end{aligned}$$

Ниже для сокращения выкладок будем рассматривать (1). Однако построенные далее методы можно применять для решения неавтономных задач.

Получим соотношения на коэффициенты метода (2) третьего порядка точности. Для этого разложим стадии k_1 , k_2 и k_3 в ряды Тейлора по степеням h до членов с h^4 включительно и подставим в первую формулу (2). В результате получим

$$\begin{aligned} y_{n+1} = & y_n + (p_1 + p_2 + p_3)hf_n + [\beta_{21}p_2 + (\beta_{31} + \beta_{32})p_3]h^2f'_nf_n + \\ & + h^3 \left[\beta_{21}\beta_{32}p_3f_n'^2f_n + \frac{1}{2}(\beta_{21}^2p_2 + (\beta_{31} + \beta_{32})^2p_3)f_n''f_n^2 \right] + \\ & + h^4 \left[\frac{1}{2}\beta_{21}^2\beta_{32}p_3f_n'f_n''f_n^2 + \beta_{21}(\beta_{31} + \beta_{32})\beta_{32}p_3f_n''f_n'f_n^2 + \right. \\ & \left. + \frac{1}{6}(\beta_{21}^3p_2 + (\beta_{31} + \beta_{32})^3p_3)f_n'''f_n^3 \right] + O(h^5), \end{aligned} \quad (3)$$

где элементарные дифференциалы вычислены на приближенном решении y_n , т.е. $f_n = f(y_n)$, $f_n' = \partial f(y_n)/\partial y$, $f_n'' = \partial^2 f(y_n)/\partial y^2$ и $f_n''' = \partial^3 f(y_n)/\partial y^3$. Точное решение $y(t_{n+1})$ в окрестности точки t_n имеет вид

$$\begin{aligned} y(t_{n+1}) = & y(t_n) + hf + 0,5h^2ff' + \frac{1}{6}h^3[f'^2f + f''f^2] + \\ & + \frac{1}{24}h^4[f'^3f + ff''f'^2 + 3ff'f''^2 + f'''f^3] + O(h^5), \end{aligned} \quad (4)$$

где элементарные дифференциалы вычислены на точном решении $y(t_n)$.

Сравнивая полученные ряды для приближенного (3) и точного (4) решений до членов с h^3 включительно при условии $y_n = y(t_n)$, запишем условия третьего порядка точности схемы (2):

$$\begin{aligned} p_1 + p_2 + p_3 &= 1, \\ \beta_{21}p_2 + (\beta_{31} + \beta_{32})p_3 &= 0,5, \\ \beta_{21}^2p_2 + (\beta_{31} + \beta_{32})^2p_3 &= 1/3, \\ \beta_{21}\beta_{32}p_3 &= 1/6. \end{aligned} \quad (5)$$

В предположении $y_n = y(t_n)$ локальную ошибку δ_{n+1} схемы (2) можно вычислить по формуле $\delta_{n+1} = y(t_{n+1}) - y_{n+1}$. Учитывая представления y_{n+1} и $y(t_{n+1})$ в виде рядов Тейлора (3) и (4), запишем

$$\begin{aligned} \delta_{n+1} = & h^4 \left\{ \frac{1}{24}f'^3f + \left(\frac{1}{24} - \frac{1}{2}\beta_{21}^2\beta_{32}p_3 \right)ff''f'^2 + \left[\frac{1}{8} - \beta_{21}(\beta_{31} + \beta_{32})\beta_{32}p_3 \right] \times \right. \\ & \left. \times ff''f'^2 + \left[\frac{1}{24} - \frac{1}{6}\beta_{21}^3p_2 - \frac{1}{6}(\beta_{31} + \beta_{32})^3p_3 \right]f'''f^3 \right\} + O(h^5). \end{aligned} \quad (6)$$

Далее получим коэффициенты численной схемы (2) третьего порядка точности.

2. Исследование условий порядка

В нелинейной системе алгебраических уравнений (5) два свободных коэффициента. Исследуем три варианта.

Вариант 1. Положим $\beta_{21} = \beta_{31} + \beta_{32}$ и $\beta_{31} = \beta_{32}$. Это означает, что приращения k_2 и k_3 будут вычислены в одной и той же точке $t_n + \beta_{21}h$, причем вклад k_1 и k_2 при определении k_3 учитывается одинаково. Тогда нелинейную систему (5) можно переписать в виде

$$1) \quad p_1 + p_2 + p_3 = 1;$$

$$2) \quad \beta_{21}(p_2 + p_3) = \frac{1}{2};$$

$$3) \quad \beta_{21}^2(p_2 + p_3) = \frac{1}{3};$$

$$4) \quad \beta_{21}\beta_{32}p_3 = \frac{1}{6}.$$

Из второго и третьего уравнений данной системы имеем $\beta_{21} = 2/3$. Из соотношений $\beta_{21} = \beta_{31} + \beta_{32}$ и $\beta_{31} = \beta_{32}$ запишем $\beta_{31} = \beta_{32} = 1/3$. Из четвертого уравнения системы получим $p_3 = 3/4$. Из равенства $p_2 + p_3 = 3/4$ имеем $p_2 = 0$. Наконец, из первого соотношения системы получим $p_1 = 1/4$. В результате коэффициенты схемы (2) определяются однозначно и имеют вид

$$\beta_{21} = \frac{2}{3}, \quad \beta_{31} = \beta_{32} = \frac{1}{3}, \quad p_1 = \frac{1}{4}, \quad p_2 = 0, \quad p_3 = \frac{3}{4}. \quad (7)$$

При данных соотношениях локальную ошибку δ_{n+1} схемы (2) можно записать следующим образом:

$$\delta_{n+1} = \frac{1}{216}h^4 \left[9f'^3f + f''f^3 - 3ff''f^2 + 3f''ff^2 \right] + O(h^5).$$

Вариант 2. Минимизируем локальную ошибку (6). Для этого, учитывая вид (6), вместо (5) рассмотрим следующую расширенную нелинейную систему алгебраических уравнений:

$$1) \quad p_1 + p_2 + p_3 = 1;$$

$$2) \quad \beta_{21}p_2 + (\beta_{31} + \beta_{32})p_3 = \frac{1}{2};$$

$$3) \quad \beta_{21}^2p_2 + (\beta_{31} + \beta_{32})^2p_3 = \frac{1}{3};$$

$$4) \quad \beta_{21}\beta_{32}p_3 = \frac{1}{6};$$

$$5) \quad \beta_{21}^2\beta_{32}p_3 = \frac{1}{12};$$

$$6) \quad \beta_{21}(\beta_{31} + \beta_{32})\beta_{32}p_3 = \frac{1}{8}.$$

Исследуем совместность данной системы. При $3\beta_{21}/2 = \beta_{31} + \beta_{32}$ два последних уравнения совпадают. Из четвертого и пятого соотношений имеем $\beta_{21} = 1/2$. Из второго и третьего равенств получим $p_2 = 1/3$ и $p_3 = 4/9$. Из первого уравнения запишем $p_1 = 2/9$, а из четвертого имеем $\beta_{32} = 3/4$. Наконец, из соотношения $\beta_{31} + \beta_{32} = 3/4$ запишем $\beta_{31} = 0$. В результате коэффициенты метода (2) с минимальной локальной ошибкой можно записать в виде

$$\beta_{21} = \frac{1}{2}, \beta_{31} = 0, \beta_{32} = \frac{3}{4}, p_1 = \frac{2}{9}, p_2 = \frac{1}{3}, p_3 = \frac{4}{9}. \quad (8)$$

При данных соотношениях локальную ошибку δ_{n+1} схемы (2) можно представить следующим образом:

$$\delta_{n+1} = \frac{1}{288} h^4 [12f'^3 f - f''f^3] + O(h^5).$$

При использовании (2) с наборами коэффициентов (7) или (8) ни одна стадия не вычисляется в точке t_{n+1} . При быстром изменении решения это может приводить к понижению эффективности расчетов.

Вариант 3. Положим $\beta_{21} = 1/2$ и $\beta_{31} + \beta_{32} = 1$. Тогда на каждом шаге приращения k_1 , k_2 и k_3 вычисляются соответственно в точках t_n , $t_n + 0,5h$ и $t_n + h$. В этом случае условия третьего порядка записываются в виде

$$1) p_1 + p_2 + p_3 = 1;$$

$$2) \frac{1}{2} p_2 + p_3 = \frac{1}{2};$$

$$3) \frac{1}{4} p_2 + p_3 = \frac{1}{3};$$

$$4) \beta_{32} p_3 = \frac{1}{3}.$$

Из второго и третьего равенств данной системы запишем $p_2 = 2/3$ и $p_3 = 1/6$. Из первого и последнего уравнений имеем $p_1 = 1/6$ и $\beta_{32} = 2$. Из равенства $\beta_{31} + \beta_{32} = 1$ следует $\beta_{31} = -1$. В результате коэффициенты метода (2) имеют вид

$$\beta_{21} = \frac{1}{2}, \beta_{31} = -1, \beta_{32} = 2, p_1 = \frac{1}{6}, p_2 = \frac{2}{3}, p_3 = \frac{1}{6}. \quad (9)$$

При данных соотношениях локальную ошибку δ_{n+1} схемы (2) можно записать следующим образом:

$$\delta_{n+1} = \frac{1}{72} h^4 [3f'^3 f - 3f''f f^2 - f'''f^3] + O(h^5).$$

3. Контроль точности вычислений

Построим неравенство для контроля точности вычислений метода третьего порядка. Для этого рассмотрим вспомогательную схему

$$y_{n+1,1} = y_n + r_1 k_1 + r_2 k_2,$$

где k_1 и k_2 определены в (2). Потребуем, чтобы данный метод имел второй порядок точности. Разложение приближенного решения $y_{n+1,1}$ в виде ряда Тейлора по степеням h имеет вид

$$y_{n+1,1} = y_n + (r_1 + r_2)hf'_n + \beta_{21}r_2h^2f''_nf'_n + O(h^3).$$

Сравнивая ряды Тейлора для точного $y(t_{n+1})$ и приближенного $y_{n+1,1}$ решений, видим, что требование второго порядка точности будет выполнено, если

$$r_1 + r_2 = 1, \quad \beta_{21}r_2 = 0,5.$$

Отсюда получим

$$r_2 = 0,5/\beta_{21}, \quad r_1 = 1 - r_2,$$

где значение β_{21} определено в (7), (8) или (9). Теперь с помощью идеи вложенных методов оценку аналога глобальной ошибки $\varepsilon_{n,3}$ метода третьего порядка точности можно вычислить по формуле [1]

$$\varepsilon_{n,3} = y_{n+1} - y_{n+1,1} = (p_1 - r_1)k_1 + (p_2 - r_2)k_2 + p_3k_3.$$

Тогда неравенство для контроля точности вычислений имеет вид

$$\|(p_1 - r_1)k_1 + (p_2 - r_2)k_2 + p_3k_3\| \leq \varepsilon,$$

где $\|\cdot\|$ – некоторая норма в R^N ; ε – требуемая точность интегрирования. В конкретных расчетах применялся метод (2) с коэффициентами (9) как более надежный. Тогда неравенство для контроля точности имеет вид

$$\|k_1 - 2k_2 + k_3\| \leq 6\varepsilon. \quad (10)$$

3. Контроль устойчивости численной схемы

Теперь построим неравенство для контроля устойчивости численной формулы (2) предложенным в [1] способом. Запишем стадии k_1 , k_2 и k_3 применительно к задаче $y' = Ay$, где A – матрица с постоянными коэффициентами. В результате получим

$$k_1 = Xy_n, \quad k_2 = (X + \beta_{21}X^2)y_n, \\ k_3 = [X + (\beta_{31} + \beta_{32})X^2 + \beta_{21}\beta_{32}X^3]y_n,$$

где $X = hA$.

Найдем коэффициенты d_1 , d_2 и d_3 из условия

$$d_1k_1 + d_2k_2 + d_3k_3 = X^3y_n.$$

Данное требование будет выполнено, если

$$d_1 = (\beta_{31} + \beta_{32} - \beta_{21})/d, \quad d_2 = -(\beta_{31} + \beta_{32})/d, \quad d_3 = \beta_{21}/d,$$

где $d = \beta_{21}^2\beta_{32}$. Нетрудно видеть также, что

$$\beta_{21}^{-1}(k_2 - k_1) = X^2y_n.$$

Тогда согласно [1] оценку максимального собственного числа $\nu_{n,3} = h|\lambda_{\max}|$ матрицы Якоби системы (1) можно вычислить по формуле

$$\nu_{n,3} = \beta_{21} \max_{1 \leq i \leq N} \left(|d_1 k_1^i + d_2 k_2^i + d_3 k_3^i| / |k_2^i - k_1^i| \right).$$

Интервал устойчивости численной схемы (2) приблизительно равен 2,5. Поэтому для ее контроля устойчивости можно применять неравенство $\nu_{n,3} \leq 2,5$. Полученная оценка является грубой, потому что:

- 1) вовсе не обязательно максимальное собственное число сильно отделено от остальных;
- 2) в степенном методе применяется мало итераций;
- 3) дополнительные искажения вносит нелинейность задачи (1).

Поэтому здесь контроль устойчивости используется как ограничитель на размер шага интегрирования. В результате прогнозируемый шаг h_{n+1} будем вычислять следующим образом.

Новый шаг h^{ac} по точности определим по формуле $h^{ac} = q_1 h_n$, где h_n есть последний успешный шаг интегрирования, а q_1 , учитывая соотношение $\varepsilon_{n,3} = O(h_n^3)$, задается уравнением $q_1^3 \|\varepsilon_{n,3}\| = \varepsilon$. Шаг h^{st} по устойчивости зададим формулой $h^{st} = q_2 h_n$, где q_2 , учитывая равенство $\nu_{n,3} = O(h_n)$, определяется из уравнения $q_2 \nu_{n,3} = 2,5$. В результате шаг h_{n+1} вычисляется по формуле

$$h_{n+1} = \max \left[h_n, \min(h^{ac}, h^{st}) \right].$$

Если шаг по устойчивости меньше последнего успешного, то он уменьшен не будет, потому что причиной этого может быть грубость оценки максимального собственного числа. Однако шаг не будет и увеличен, потому что не исключена возможность неустойчивости численной схемы. Если шаг по устойчивости должен быть уменьшен, то в качестве следующего шага будет применяться последний успешный шаг h_n . В результате для выбора шага и предлагается данная формула. Она позволяет стабилизировать поведение шага на участке установления решения, где определяющую роль играет устойчивость. Собственно говоря, именно наличие этого участка существенно ограничивает возможности применения явных методов для решения жестких задач.

4. Численное моделирование пиролиз этана

Расчеты проводились на Intel(R) Core 2 Quad CPU с двойной точностью. В конкретных расчетах левая часть неравенства для контроля точности (10) вычислялась по формуле

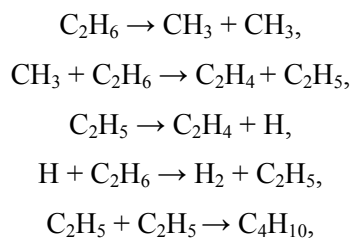
$$\|k_1 - 2k_2 + k_3\| = \max_{1 \leq i \leq N} \left[|k_1^i - 2k_2^i + k_3^i| / (|y_n^i| + r) \right],$$

где i – номер компоненты; r – положительный параметр.

Если по i -й компоненте решения выполняется неравенство $|y_n^i| < r$, то контролируется абсолютная ошибка $r\varepsilon$, в противном случае – относительная ошибка ε . В расчетах параметр r выбирался таким образом, чтобы по всем компонентам решения фактическая точность была не хуже задаваемой.

Пиролиз этана в отсутствие кислорода описывается небольшой последовательностью стадий. Механизм пиролиза этана неоднократно обсу-

ждался в литературе. Здесь принята схема реакции, предложенная и исследованная в [4]



где константы скоростей стадий имеют вид

$$k_1 = 1,34 \cdot 10^{-5}, k_2 = 3,73 \cdot 10^2, k_3 = 3,69 \cdot 10^3, k_4 = 3,66 \cdot 10^5, k_5 = 1,62 \cdot 10^7.$$

Обозначим концентрации реагентов следующим образом:

$$\begin{aligned} c_1 &= [\text{C}_2\text{H}_6], c_2 = [\text{CH}_3], c_3 = [\text{CH}_4], c_4 = [\text{C}_2\text{H}_5], \\ c_5 &= [\text{C}_2\text{H}_4], c_6 = [\text{H}], c_7 = [\text{H}_2], c_8 = [\text{C}_4\text{H}_{10}]. \end{aligned}$$

Соответствующую систему дифференциальных уравнений можно получить с применением алгоритма, описанного в [5]. Данная система состоит из восьми уравнений и имеет вид

$$\begin{aligned} c_1' &= -k_1 c_1 - k_2 c_1 c_2 - k_4 c_1 c_6, \quad c_2' = 2k_1 c_1 - k_2 c_1 c_2, \quad c_3' = k_2 c_1 c_2, \\ c_4' &= k_2 c_1 c_2 - k_3 c_4 + k_4 c_1 c_6 - 2k_5 c_4^2, \quad c_5' = k_3 c_4, \\ c_6' &= k_3 c_4 - k_4 c_1 c_6, \quad c_7' = k_4 c_1 c_6, \quad c_8' = k_5 c_4^2. \end{aligned} \quad (11)$$

Начальная концентрация этана $c_1 = [\text{C}_2\text{H}_6]$ равна 0,14, для остальных реагентов начальные концентрации равны нулю.

Расчеты осуществлялись с точностью $\varepsilon = 10^{-4}$, при которой наиболее эффективны методы третьего порядка. Эффективность алгоритмов интегрирования оценивалась по числу вычислений правой части *if* задачи (11) на интервале интегрирования. Численное решение осуществлялось на промежутке $[0; 0,26]$ с начальным шагом $h = 10^{-5}$. Данная задача удовлетворяет «классическому» определению жесткости. В начале интервала интегрирования наблюдается переходный участок (сотые доли секунды), а затем происходит медленное установление.

Сравнение эффективности алгоритма интегрирования без контроля устойчивости (RK3) и с контролем устойчивости (RK3ST) проводилось известным методом Мерсона [6]. Для всех методов фактическая точность не хуже задаваемой точности. Алгоритму RK3 для нахождения решения потребовалось 19 790 вычислений правой части задачи (11), для алгоритма RK3ST *if* = 17 004, а для метода Мерсона *if* = 26 876. Таким образом, на умеренно жестких задачах построенный алгоритм с контролем точности и устойчивости примерно в полтора раза эффективнее метода Мерсона.

Заключение

Из результатов расчетов можно сделать следующие выводы. Во-первых, построенный алгоритм интегрирования третьего порядка с контро-

лем точности вычислений и устойчивости численной схемы можно применять для решения достаточно жестких задач. Во-вторых, по вычислительным затратам алгоритм RK3ST эффективнее метода Мерсона примерно в 1,5 раза. Это является следствием контроля устойчивости численной схемы. Представляется, что при достаточно большой размерности задачи (11) метод RK3ST может конкурировать с неявными методами на задачах умеренной жесткости, потому что в нем не обращается матрица Якоби.

Использование неравенства для контроля устойчивости фактически не приводит к увеличению вычислительных затрат, потому что оценка максимального собственного числа матрицы Якоби системы (1) осуществляется через ранее вычисленные стадии и не приводит к росту числа вычислений функции f . Такая оценка получается грубой. Однако применение контроля устойчивости в качестве ограничителя на рост шага позволяет избежать негативных последствий грубости оценки.

Список литературы

1. **Новиков, Е. А.** Явные методы для жестких систем / Е. А. Новиков. – Новосибирск : Наука, 1997.
2. **Shampine, L. M.** Implementation of Rosenbrock methods / L. M. Shampine // ACM Transaction on Mathematical Software. – 1982. – V. 8. – № 5. – P. 93–113.
3. **Новиков, В. А.** Контроль устойчивости явных одношаговых методов интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений / В. А. Новиков, Е. А. Новиков // ДАН СССР. – 1984. – Т. 277. – № 5. – С. 1058–1062.
4. **Kulich, D. M.** Mathematical simulation of the oxygen ethane reaction / D. M. Kulich, J.E. Taylor // J. Chem. Kinet. – 1975. – V. 8. – P. 89–97.
5. **Новиков, Е. А.** Комплекс программ моделирования кинетики сложных реакций / Е. А. Новиков, Ю. А. Шитов, В. И. Бабушок, Д. В. Марьин // Прямые и обратные задачи в химической кинетике. – Новосибирск : Наука, 1993. – С. 22–38.
6. **Merson, R. H.** An operational methods for integration processes / R. H. Merson // Proc. of Symposium on Data Processing. Weapons Research Establishment. – Australia : Salisbury, – 1957. – P. 329–331.

Новиков Евгений Александрович

доктор физико-математических наук,
профессор, главный научный сотрудник,
Институт вычислительного
моделирования СО РАН (Красноярск)

E-mail: novikov@icm.krasn.ru

Novikov Evgeny Alexandrovich

Doctor of Physical and Mathematical
Sciences, chief researcher, Institute
of computational modeling of the Russian
Academy of Sciences (Krasnoyarsk)

УДК 519.622

Новиков, Е. А.

Численное моделирование пиролиза этана явным методом третьего порядка точности / Е. А. Новиков // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2010. – № 4 (16). – С. 64–72.