

6. Гликман Б. Ф., Исаев В. Е., Лосенков А. С. и др. Изв. вузов. Авиационная техника, 1987, 2, 30.
7. Гликман Б. Ф., Лосенков А. С., Малинковский А. А. Изв. АН СССР. Энергетика и транспорт, 1987, 2, 134.
8. Раушенбах Б. В. Вибрационное горение.— М.: Физматгиз, 1961.
9. Артамонов К. И. Термогидроакустическая устойчивость.— М.: Машиностроение, 1982.
10. Гликман Б. Ф., Гурьев В. А. Изв. АН СССР. Энергетика и транспорт, 1979, 1, 149.
11. Дорошенко В. Е., Сильверстов В. М. ФГВ, 1982, 18, 1, 27.
12. Гликман Б. Ф., Лосенков А. С. ФГВ, 1986, 22, 6, 117.
13. А. С. 355603 СССР. Анализатор передаточных функций/В. В. Бажанов, В. Н. Столяров.— Бюл. № 31, 1972.

г. Москва

Поступила в редакцию 7/II 1989

УДК 519.622 + 534.46 + 541.124/127

Е. А. Новиков, В. И. Бабушок

### КОМБИНИРОВАННЫЙ ЧИСЛЕННЫЙ АЛГОРИТМ РАСЧЕТА КИНЕТИКИ ВЗРЫВНЫХ ПРОЦЕССОВ

Системы дифференциальных уравнений, описывающие кинетику химического превращения в процессах горения, жесткие (см., например, [1, 2]). Наряду с созданием методов общего назначения для численного решения жестких систем [3], разрабатываются алгоритмы, специально ориентированные на моделирование процессов горения с учетом протекания химических реакций, например [4, 5]. В настоящей работе для численного исследования кинетики взрывных процессов предложен комбинированный алгоритм интегрирования, построенный на основе сочетания явной и абсолютно устойчивой численных схем.

Степень жесткости системы нелинейных дифференциальных уравнений обычно характеризуют коэффициентом  $S$  — отношением максимального собственного числа матрицы Якоби к минимальному. На примере окисления водорода в окрестности третьего предела самовоспламенения (700—900 К, 1 атм) [6] приведем характерные для реакций горения величины. Типичный разброс констант скоростей элементарных стадий составляет  $10^{27}$ , времен жизни активных центров —  $10^8$ , а с учетом исходных веществ не менее  $10^{10}$ , собственных чисел матрицы Якоби  $S \approx 10^{12}$ . Численный анализ показывает, что в начале процесса  $S = 10^{10} \div 10^{12}$ . Затем значение  $S$  уменьшается, проходит через минимум и при выходе на равновесие наблюдается постепенное увеличение. Для взрывных процессов по ходу развития взрыва жесткость резко уменьшается и в течение короткого периода  $S \approx 10^5$ . При этом в системе имеется большое положительное собственное число  $10^5 - 10^6$ .

При численном изучении кинетики цепного и теплового взрыва кроме жесткости имеются дополнительные факторы, приводящие к существенным трудностям при интегрировании. Рассматриваемый процесс характеризуется наличием больших положительных собственных чисел. При взрывном протекании реакции существует узкий временной интервал, в котором концентрации частиц и температура изменяются очень быстро. Для цепно-теплового взрыва нарастание во времени происходит прогрессирующим образом. Скорость реакции увеличивается по двойной экспоненте:  $W \sim \exp(\varphi t)$ , фактор разветвления  $\varphi \sim [a \cdot \exp(-E/RT) - b]$  [7]. Для получения решения на взрывном участке приходится использовать очень малый шаг интегрирования, который не приводит к неустойчивости некоторых явных численных формул. Поэтому использование методов решения жестких систем становится малоэффективным. Время про-

цесса можно разделить на период индукции, фазу развития собственно взрыва и область выхода на равновесие. Представляется, что создание комбинированного алгоритма на основе  $A$ -устойчивого и явного методов с переключением на соответствующих участках решения должно существенно повысить эффективность интегрирования подобных систем. Такой подход ранее обсуждался в [4, 8, 9].

В околопредельной области наблюдаются колебательные режимы реакции. Здесь можно назвать пульсирующее горение окиси углерода и холодные пламена при окислении углеводородов. Колебательные режимы в окрестности предела самовоспламенения могут носить как относительно «мягкий» характер, так и иметь вид резких, релаксационного типа пульсаций с достаточно большими периодами задержки между ними. Матрица Якоби при колебательном режиме имеет комплексные собственные числа. В проточных реакторах возможно появление стохастических режимов [10], что имеет свои особенности при численном решении.

Изучение динамики процесса в окрестности предела показало существование режимов реакции с так называемыми внутренними особенностями. Специфичность этих режимов заключается в появлении особенностей процесса далеко от начала на большой глубине реакции. К данным режимам относятся задержанные колебания, наблюдавшиеся при окислении  $\text{CO}$  [11], явление *pic d'arret* при окислении углеводородов и др. Такие ситуации, как правило, плохо отрабатываются существующими численными методами. Для области предела типично наличие процессов со сменой режимов по ходу реакции. Здесь можно назвать двух- и многостадийные воспламенения, когда холоднопламенные пульсации сменяются горячим самовоспламенением, и взрыв при больших степенях превращения. Видно, что численное исследование названных процессов также требует привлечения алгоритмов с переключением методов по ходу решения.

Моделирование кинетики химических реакций горения приводит к численному решению задачи Коши для жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений

$$y' = f(y), \quad y(0) = y_0, \quad 0 \leq t \leq t_k, \quad (1)$$

где  $y$  и  $f$  — вещественные  $N$ -мерные вектор-функции;  $t$  — независимая переменная. Рост размерности решаемых задач (десятки реагентов, сотни стадий) и увеличение их сложности приводит к необходимости дальнейшего совершенствования численных методов исследования сложных химических реакций горения. Один из путей повышения эффективности алгоритмов — учет различных типов поведения реакционной системы и настройка на данные типы методов с соответствующим переключением по ходу решения.

Отметим, что численный алгоритм, помимо собственно численной схемы, складывается из многих компонентов, оптимизация которых может существенно улучшить его характеристики. Разделение алгоритма интегрирования на отдельные элементы полезно для выделения узких мест. В настоящее время можно выделить следующие элементы:

- а) численная схема;
- б) способ оценки локальной ошибки;
- в) способ учета накопления глобальной ошибки;
- г) алгоритм управления величиной шага;
- д) способ выбора численной схемы при комбинировании различных методов по ходу решения;
- е) оптимизация расчетов, связанных с матрицей Якоби.

Остановимся подробнее на вопросах, связанных с использованием матрицы Якоби. Численные методы решения жестких задач, как правило, включают вычисление и обращение матрицы Якоби системы (1) [12]. В случае достаточно большой размерности (1) эффективность алгоритма интегрирования фактически начинает полностью определяться временем обращения этой матрицы. С целью повышения эффективности в ряде

алгоритмов используется ее замораживание, т. е. одна и та же матрица применяется на нескольких шагах интегрирования. Наиболее эффективно замораживание в алгоритмах на основе многошаговых методов и, в частности, в формулах дифференцирования назад [3].

Вопрос о замораживании достаточно просто решается при построении алгоритмов на основе других численных схем, если стадии метода вычисляются с участием матрицы Якоби в итерационном процессе. В этом случае она не влияет на порядок точности численной формулы и определяет только сходимость итераций. Однако остается вопрос о связи точности вычислений стадий итерациями и точности интегрирования, что может существенно определять эффективность алгоритма. При построении практических алгоритмов максимальное число итераций, порядок метода и требуемую точность обычно не связывают, а задают константу, ограничивающую число итераций. Например, в ряде реализаций формул дифференцирования назад максимальное число итераций по Ньютону не превышает трех.

Сложнее решается вопрос о замораживании для известных безытерационных одношаговых методов, к которым относятся схемы типа Розенброка [13] и ROW-методы [14], которые существенно проще в реализации на ЭВМ и обладают достаточно хорошими свойствами точности и устойчивости. Однако здесь матрица Якоби влияет на порядок точности схемы, что обуславливает принципиальные трудности с замораживанием. Можно показать, что в рамках методов [13, 14] нельзя построить алгоритм с замораживанием матрицы Якоби третьего порядка точности и выше.

Некоторый аналог замораживания матрицы Якоби состоит в использовании в одном алгоритме явной и абсолютно устойчивой численной формулы [15]. Выбирая на каждом шаге схему из условия устойчивости, можно добиться экономии вычислительных затрат за счет расчета переходных (взрывных) участков по явному методу. По явной формуле как правило удается рассчитать переходной участок, соответствующий максимальному собственному числу. Поэтому вопрос о замораживании матрицы Якоби остается и, оставаясь в рамках схем [13, 14], следует ограничиться задачами небольшой размерности.

Важным требованием является возможность численной аппроксимации матрицы Якоби. Это связано с тем, что правая часть системы дифференциальных уравнений помимо большой размерности часто имеет громоздкий вид. С другой стороны, вопросы замораживания и численной аппроксимации в некотором смысле близки и могут быть решены одновременно. Отметим, что использование численной матрицы Якоби может быть причиной понижения эффективности, так как при каждом ее вычислении требуется  $N$  раз обратиться к процедуре вычисления правых частей дифференциальной задачи.

В [16—18] предложен класс одношаговых безытерационных численных схем  $((m, k)$ -методы), в рамках которых достаточно просто решается проблема замораживания матрицы Якоби и вопросы ее численной аппроксимации. Точности этих методов не хуже, чем неявных схем типа Рунге — Кутты [19], в то же время они существенно дешевле по вычислительным затратам и более просты в реализации на ЭВМ.

Для численного решения (1) рассмотрим  $(m, k)$ -метод вида

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + p_1 k_{n1} + p_2 k_{n2}, \\ D_n k_{n1} &= h_n f(y_n), \quad D_n k_{n2} = h_n f(y_n + \beta k_{n1}) + \alpha k_{n1}, \\ D_n &= I + a h_n A_n \end{aligned} \quad (2)$$

с параметрами

$$a = 1 - \sqrt{2}/2, \quad p_1 = 5/4; \quad p_2 = 3/4, \quad \beta = 2/3, \quad \alpha = -4/3. \quad (3)$$

Выбор параметров (3) будет обоснован ниже. Здесь  $h_n$  — шаг интегрирования;  $A_n$  — некоторая матрица, представленная в виде  $A_n = f_n' +$

$+ h_n B_n + O(h_n^2)$ ;  $f_n' = \partial f(y_n)/\partial y$  — матрица Якоби;  $B_n$  — некоторая произвольная матрица, не зависящая от размера шага интегрирования. Далее для упрощения анализа предполагается, что при замораживании матрицы шаг остается постоянным ( $h = h_n$ ).

При использовании (2) с замораживанием,  $A_n$  можно записать в виде

$$A_n = \partial f(y_{n-k})/\partial y = f_n' - kh f_n' f_n + O(h^2), \quad 0 \leq k \leq Q_k,$$

где  $Q_k$  — максимальное число шагов с замороженной матрицей;  $f_n' f_n = \frac{\partial^2 f(y_n)}{\partial y^2} f(y_n)$ . При численном вычислении матрицы Якоби с шагом  $r_j = c_j h$  ( $c_j$ ,  $1 \leq j \leq N$  — постоянные) имеем

$$A_n = f_n' + h G_n + O(h^2),$$

где элементы матрицы  $G$  вычисляются по формуле

$$g_n^{ij} = 0,5 \partial^2 f_i(y_n)/\partial y_j^2, \quad 1 \leq i, j \leq N.$$

В случае замораживания численной матрицы можно записать

$$A_n = f_n' + h (G_n - kh f_n' f_n) + O(h^2).$$

Учитывая, что при определении (2) матрица  $B_n$  произвольная, вопрос о замораживании и численной аппроксимации матрицы Якоби можно рассматривать одновременно.

Изучим схему (2). Разложением  $k_{n1}$  и  $k_{n2}$  в ряды Тейлора в окрестности точки  $y_n$  нетрудно убедиться, что соотношения

$$p_1 + (1 + \alpha) p_2 = 1, \quad a p_1 + (a + \beta + 2\alpha) p_2 = 0,5 \quad (4)$$

обеспечивают второй порядок точности формулы (2). Контроль точности организуем по аналогии [20, 21]. Для этого необходимо, чтобы в главном члене локальной ошибки осталось только слагаемое вида  $h^3 f_n'^2 f_n$ . Используя снова разложения  $k_{n1}$  и  $k_{n2}$ , получим, что это будет выполнено, если

$$p_1 + (1 + 2\alpha) p_2 = 0, \quad 3\beta^2 p_2 = 1. \quad (5)$$

Отметим, что левая часть первого соотношения (5) есть коэффициент перед дополнительной ошибкой, которая возникает за счет замораживания матрицы Якоби и ее численной аппроксимации.

Анализ устойчивости (2) проведем на линейном скалярном уравнении  $Z' = \lambda Z$  с комплексным  $\lambda$ ,  $\text{Re}(\lambda) < 0$ . Использование данного уравнения для исследования устойчивости обсуждается в [12, 19]. С учетом (2), (4), (5) получаем  $Z_{n+1} = Q(x) Z_n$ , где

$$Q(x) = [1 + (1 - 2a)x + (a^2 - 2a + 0,5)x^2] / (1 - ax)^2, \quad x = \lambda h.$$

Отсюда условие  $L$ -устойчивости схемы (2):

$$a^2 - 2a + 0,5 = 0.$$

Корни уравнения соответственно равны:  $a_1 = 1 - 0,5\sqrt{2}$ ,  $a_2 = 1 + 0,5\sqrt{2}$ .

При выполнении (4), (5) локальная ошибка схемы (2) имеет вид

$$\delta_n = \frac{6a^2 - 6a + 1}{6} h^3 (f_n')^2 + O(h^4). \quad (6)$$

Примем  $a = a_1$ , так как коэффициент в главном члене  $\delta_n$  в этом случае меньше. Тогда оставшиеся параметры формулы (2) однозначно определяются из (4), (5) и приведены выше (3). Для контроля точности вычислений используем оценку вида [20]

$$\delta_n = \frac{6a^2 - 6a + 1}{6} h^3 f_n' f_n + O(h^4).$$

Поскольку  $kn_2 + \frac{1}{3}kn_1 = \frac{2-4a}{3}h^2f'_nf_n + O(h^3)$ , значение  $\varepsilon_n$  с точностью до  $O(h^3)$  можно определить по формуле

$$\varepsilon_n = \frac{6a^2 - 6a + 1}{4 - 8a} \left( kn_2 + \frac{1}{3}kn_1 \right).$$

Окончательно с учетом результатов [21] для контроля точности (2) имеем

$$\varepsilon_{n,j_n} = \left\| D_n^{1-j_n} \left( kn_2 + \frac{1}{3}kn_1 \right) \right\| \leq \left| \frac{4-6a}{6a^2-6a+1} \right| \varepsilon, \quad (6)$$

$1 \leq j_n \leq 2$ , где  $\varepsilon$  — требуемая точность расчетов,  $\|\cdot\|$  — некоторая норма в  $R^N$ . Значение параметра  $j_n$  выбирается наименьшим, при котором выполняется неравенство (6). При  $a = a_1$  имеем

$$\left| \frac{4-6a}{6a^2-6a+1} \right| \approx 8.$$

Таким образом, схему (2) с параметрами (3) можно использовать с замораживанием матрицы Якоби, вычисляемой аналитически и численно. При численном вычислении шаг дифференцирования  $r_j$ ,  $1 \leq j \leq N$  выбирается по формуле

$$r_j = \max [r_{\min}, \min (r_{\min}^{0.5} |y_n^j|, 10^{-3}h_n)].$$

Здесь  $r_{\min}$  — минимальный шаг численного дифференцирования, зависящий от разрядности ЭВМ. Тогда  $j$ -й столбец  $a_n^j$  матрицы  $A_n$  вычисляется по выражению

$$a_n^j = [f(y_1, \dots, y_j + r_j, \dots, y_N) - f(y_1, \dots, y_j, \dots, y_N)] / r_j, \quad 1 \leq j \leq N.$$

Для определения  $A_n$  требуется  $N$  вычислений правой части. Постоянная  $10^{-3}$  введена в формулу вычисления  $r_j$  для того, чтобы избежать перевычисления матрицы Якоби в случае повторного вычисления решения (возврате) при невыполнении точности.

Использование прежней матрицы  $D_n$  предпринимается после каждого успешного шага. При замораживании  $D_n$  шаг  $h_n$  остается постоянным. Размораживание матрицы происходит по следующим причинам: повторное вычисление решения при недостаточной точности; прогнозируемый шаг больше произведения некоторой постоянной,  $H_f > 1$ , на величину предыдущего шага, т. е. шаг достаточно быстро возрастает; количество шагов с замороженной матрицей достигает максимально допустимого числа  $Q_j$ ; если  $\|\varepsilon_{n,1}\| > \|\varepsilon_{n,2}\|$ .

Рассмотрим последнее более подробно. Опыт численных расчетов показывает, что обычно  $\varepsilon_n$  вычисляется при резком увеличении шага интегрирования, либо невыполнении неравенства (6) для  $j_n = 1$  при быстром изменении решения. Когда матрица Якоби вычисляется на каждом шаге,  $\varepsilon_{n,2}$  более точно отражает асимптотическое поведение ошибки и ее использование позволяет избежать неоправданных возвратов при резком увеличении шага [21]. Если используется матрица, вычисленная несколько шагов назад, оценка  $\varepsilon_{n,2} = D_n^{-1}\varepsilon_{n,1}$  может оказаться хуже  $\varepsilon_{n,1}$  за счет применения «испорченной» матрицы. Поэтому, если  $\|\varepsilon_{n,1}\| > \|\varepsilon_{n,2}\|$ , а неравенство (6) выполнено при  $j_n = 2$ , полученное приближение к решению принимается. Однако следующий шаг выполняется с перевычисленной матрицей  $D_n$ .

Проведем анализ использования (2) в комбинации с явным методом типа Рунге — Кутта второго порядка с автоматическим выбором численной схемы, исходя из условия устойчивости явной формулы. Введем вектор

$$C_n = 0,6kn_2 + kn_1 = 0,6h_n f'(y_n + \frac{2}{3}kn_1) \approx 0,2h_n f'(y_n).$$

Разложением  $k_{n1}$ ,  $k_{n2}$  и  $h_n f\left(y_n + \frac{2}{3}k_{n1}\right)$  в ряды Тейлора в окрестности точки  $y_n$  можно показать, что

$$C_n = 0,4a(1 - 2a)h_n^3 f_n'^2 f_n + O(h_n^4).$$

С учетом выражения

$$\varepsilon_{n,jn} = \frac{2 - 4a}{3} h_n^2 f_n' f_n + O(h_n^3), \quad 1 \leq j \leq 2,$$

используя степенной метод оценки максимального собственного числа  $\lambda_{n,\max}$  матрицы Якоби, получим

$$h_n |\lambda_{n,\max}| \approx \frac{5}{3a} \cdot C_n^i / \varepsilon_{n,jn}^i, \quad 1 \leq i \leq N.$$

Величина  $j_n$  определяется при проверке (6). Согласно [15], в качестве критерия перехода на явную схему можно использовать неравенство

$$\frac{5}{3a} \max_{1 \leq i \leq N} |C_n^i / \varepsilon_{n,jn}^i| \leq D, \quad (7)$$

где постоянная  $D$  связана с размером области устойчивости явной формулы. Выполнение (7) означает, что при расчете по схеме (2) шаг интегрирования настолько мал, что он не будет вызывать неустойчивости явной формулы. Поэтому при выполнении (7) осуществляется переход на явную схему. Чтобы избежать неоправданных переходов и для большей надежности (7) можно задублировать проверкой соотношения  $h_n \|A_n\| \leq D$ . Это не приводит к большому увеличению вычислительных затрат, так как  $A_n$  участвует в вычислительном процессе (2).

Построим алгоритм переменного шага на основе явной формулы типа Рунге — Кутты второго порядка точности с переключением на схему (2). Для этого рассмотрим численные формулы

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + 1/6 \cdot (k_{n1} + 4k_{n2} - k_{n3}), \\ k_{n1} &= h_n f(y_n), \quad k_{n2} = h_n f(y_n + 0,5k_{n1}), \\ k_{n3} &= h_n f(y_n - 5/7 \cdot k_{n1} + 12/7 \cdot k_{n2}). \end{aligned} \quad (8)$$

Разложением  $k_{ni}$ ,  $1 \leq i \leq 3$  в ряд Тейлора в окрестности  $y_n$  можно показать, что (8) имеет второй порядок точности. Локальная ошибка имеет вид

$$\delta_n = \frac{1}{42} h_n^3 (f_n')^2 f_n + O(h_n^4).$$

Тогда, согласно [20], для контроля точности вычислений можно использовать оценку ошибки вида  $\varepsilon_n = \frac{4}{42} h_n^2 f_n' f_n + O(h_n^3)$ . Учитывая, что  $k_{n2} - k_{n1} = 0,5h_n^2 f_n' f_n + O(h_n^3)$ , величину  $\varepsilon_n$  с точностью до  $O(h_n^3)$  можно оценить по выражению  $\varepsilon_n = (k_{n2} - k_{n1})/24$ .

Точность контролируется проверкой неравенства  $\|k_{n2} - k_{n1}\| \leq 24\varepsilon$ . Так как  $k_{n1}$  зависит от размера шага линейно, повторное решение при невыполнении точности сопровождается лишь одним дополнительным вычислением правой части. Недостатки оценки  $\varepsilon_n$  через  $k_{n1}$  и  $k_{n2}$  связаны с тем, что не используется информация в точке  $t_{n+1}$ . Последнее при решении жестких задач может приводить к потере точности вычислений. С другой стороны, поскольку  $hf(y_{n+1}) - k_{n1} = h_n^2 f_n' f_n + O(h^3)$ , величину  $\varepsilon_n$  с точностью до членов  $O(h_n^3)$  можно оценить через разность  $hf(y_{n+1}) - k_{n1}$ . В этом случае используется информация в крайних точках промежутка  $[t_n, t_{n+1}]$ . Вычисление функции  $f(y_{n+1})$  к дополнительным затратам не приводит, так как оно используется на следующем шаге.

Реализация (8) осуществляется следующим образом. Контроль точности проводится по неравенству  $\|k_{n2} - k_{n1}\| \leq 24\varepsilon$ , как более дешевому. При выборе величины шага дополнительно контролируется  $\|hf(y_{n+1}) -$

$-k_{n1} \parallel \leq C\epsilon$ . Постоянная  $C$  выбрана равной 24, а не 42, чтобы создать некоторый запас в точности и избежать возвратов.

Построим неравенство для перехода на схему (2). Учитывая, что

$$k_{n3} - hf(y_{n+1}) = \frac{5}{14} h_n^3 (f'_n)^2 f_n + O(h_n^4),$$

где  $y_{n+1}$  и  $k_{n3}$  определены по (8), получим

$$h_n |\lambda_{n\max}| \approx | [k_{n3} - hf(y_{n+1})]_i / [hf(y_{n+1}) - k_{n1}]_i |, \quad 1 \leq i \leq N.$$

Условием перехода на формулу (2) будет нарушение неравенства [15]

$$\max_{1 \leq j \leq N} | [hf(y_{n+1}) - k_{n3}]_i / [hf(y_{n+1}) - k_{n1}]_i | \leq D,$$

в котором  $D$  связана с размером области устойчивости (8).

Сделаем замечания по выбору коэффициентов схемы (8) и реализации построенного алгоритма на неоднородных схемах. Параметры выбираются таким образом, чтобы схема (8) была точнее (2). Иначе говоря, коэффициент в главном члене локальной ошибки (8) должен быть меньше, чем в схеме (2). Это обусловлено тем, что оценка максимального собственного числа матрицы Якоби грубая. Последнее может приводить к тому, что переход с формулы (2) на (8) будет не всегда оправданным. После перехода на (8) шаг может уменьшаться в силу возникающей неустойчивости. По этой причине выполнение следующего шага будет передано обратно, на схему (2). Если расчеты по (2) проводились с замороженной матрицей Якоби, то вследствие изменения величины шага интегрирования она будет перевычислена. В данном случае трудно определить, что составляет причину сброса величины шага: точность или устойчивость.

Чтобы избежать такой ситуации, расчет организуется следующим образом. Если после перехода на явную схему нельзя получить решение без уменьшения шага, то управление передается назад, на формулу (2) без изменения шага. Некоторое обоснование этого то, что явная схема точнее. Коль скоро по ней не удалось провести вычисление без уменьшения шага, причиной, по-видимому, является возникшая неустойчивость. Это позволяет существенно уменьшить необоснованные перебросы с одной схемы на другую.

Назовем построенный алгоритм на неоднородных схемах SOPBZ (IJK). Здесь  $IJK$  — число, состоящее из трех цифр и определяющее режим работы. Параметр  $I$  принимает значения 0, 1 или 2, что соответственно определяет расчет по схеме (8), (2) и (8) с автоматическим выбором формулы и по схеме (2).  $J$  принимает значения 0 или 1, что соответствует аналитическому или численному вычислению матрицы Якоби. При  $K = 0$  расчеты проводятся с замораживанием матрицы, а при  $K = 1$  без замораживания.

Алгоритм содержит два параметра:  $Q_f$  — максимальное число шагов с замороженной матрицей,  $H_f$  — коэффициент увеличения прогнозируемого шага (при  $H_f h_n < h_{n+1}^{\text{порн}}$  происходит размораживание). Выбором  $Q_f$  и  $H_f$  можно перераспределять число вычислений правой части и матрицы Якоби. Увеличение  $Q_f$  и  $H_f$  приводит к уменьшению числа вычислений матрицы, а для правой части к повышению. Выбор данных параметров позволяет настраивать алгоритм на конкретный тип задачи.

Эффективность построенного алгоритма исследовалась на десяти тестовых примерах из химической кинетики [22]. Решение системы алгебраических уравнений, возникающих при вычислении  $k_{ni}$  (2), осуществлялось с использованием  $LU$ -разложения матрицы  $D_n$ . В качестве критерия эффективности выбрано число вычислений правой части ( $IF$ ) и матрицы Якоби ( $IJ$ ) дифференциальной задачи на интервале интегрирования. Эффективность сравнивалась с двумя версиями метода Гира GEAR.REV3 [23] и LSODE [3]. В расчетах по алгоритму SOPBZ  $Q_f = 20$  и  $H_f = 2$ . Интегрирование проводилось с требуемой точностью  $10^{-2}$  и  $10^{-4}$ . Сравне-

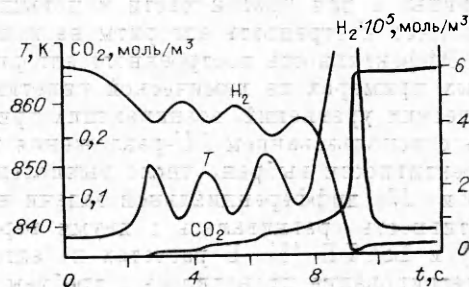
Суммарные затраты на интегрирование десяти примеров

Метод	Точность $10^{-2}$		Точность $10^{-4}$	
	IJ	IF		IF
SOPBZ (211)	198	1064	1256	6546
SOPBZ (201)	198	447	1256	2762
SOPBZ (210)	145	1035	401	4466
SOPBZ (200)	145	580	401	3232
SOPBZ (101)	156	423	698	3544
SOPBZ (100)	117	589	316	3817
GEAR.REV3	187	1569	252	2776
LSODE	188	846	256	1595

контроля точности вычислений. Сопоставление первых четырех строк таблицы показывает, что для построенного алгоритма число вычислений матрицы не зависит от того, как она вычислялась — аналитически или численно. Однако в случае численного дифференцирования количество вычислений правой части повышается на величину, равную произведению числа вычислений матрицы Якоби на размерность задачи. Сравнение четвертой и восьмой строк показывает, что при точности расчетов  $10^{-2}$  алгоритм SOPBZ (200) эффективнее LSODE. Однако при точности  $10^{-4}$  с помощью LSODE решение удается получить быстрее вследствие низкого порядка точности численной схемы SOPBZ. Наиболее эффективен при точности расчетов  $10^{-2}$  комбинированный алгоритм SOPBZ (100) с замораживанием матрицы Якоби. Более корректно было бы его сопоставление с комплексом LSODA, в котором также используются явные и неявные численные схемы. Однако публикации с результатами расчетов по LSODA тестовых примеров [25] неизвестны.

В заключение приведем расчет с использованием разработанного алгоритма колебательного режима окисления углерода с переходом во взрыв с одного из колебаний в околопредельной области (см. рисунок). Кинетическая схема включала 66 стадий с 11 реакционными частицами. Детали можно найти в [11]. Анализ показал, что колебания обусловлены слабыми повторяющимися цепными вспышками примеси водорода, присутствующей в реакционной смеси. Поскольку система неизотермична, могут создаться условия перехода в тепловой взрыв на одной из пульсаций. Фаза развития теплового взрыва рассчитывалась с автоматическим переходом на явную схему. При взрыве температура превышала 2000 К. В отличие от других типов колебаний, полученных в [11], данный режим для окисления CO экспериментально не наблюдался. В то же время, его существование в узкой температурной зоне, разделяющей области начальных условий колебательного и взрывного режимов, как переходного режима, представляется естественным. Полученный колебательный режим с переходом во взрыв аналогичен двух и многостадийному воспламенению, типичному для реакций окисления углеводородов в газовой фазе.

Колебательный режим с переходом во взрыв. Эквимолярная смесь CO+O<sub>2</sub>, [H<sub>2</sub>] = 10<sup>2</sup> мил<sup>-1</sup>, p = 33 торр (4,4 · 10<sup>3</sup> Па), T = 838,3 К, сферический сосуд диаметром 8,8 см.



ние при более высокой точности не целесообразно, так как SOPBZ основан на формулах второго порядка. Расчеты по явной схеме (8) не делались в силу большой жесткости примеров [25].

Результаты расчетов приведены в таблице. Прежде всего отметим, что сопоставление двух версий метода Гира демонстрирует большую эффективность версии LSODE [3] по сравнению с GEAR.REV3 [23]. Это является, по-видимому, следствием более удачного способа



Таким образом, в настоящей работе предложен подход к созданию эффективных методов с автоматическим выбором величины шага интегрирования на основе комбинирования явной и неявной численных схем. Разработан алгоритм второго порядка точности, включающий одношаговые безытерационные методы:  $L$ -устойчивый  $(m, k)$ -метод и явную формулу типа Рунге — Кутты. При расчете по  $(m, k)$ -методу осуществляется замораживание матрицы Якоби, которая вычисляется как численно, так и аналитически. Выбор численной схемы происходит автоматически из условия устойчивости явной формулы. Численные эксперименты показали эффективность алгоритма для моделирования процессов самовоспламенения с учетом детальной кинетики.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Kee R. J., Dwyer II. A. Combustion in Reactive Systems. Progr. Astron. Aeron., 1979, 76, 485.
2. Баев В. К., Головичев В. И., Третьяков П. К. и др. Горение в сверхзвуковом потоке.— Новосибирск: Наука, 1984.
3. Byrne G. D., Hindmarsh A. C. J. Comput. Phys., 1987, 70, 1.
4. Radhakrishnan K. AIAA J., 1987, 25, 11, 1449.
5. Yong T. R., Boris J. P. J. Phys. Chem., 1977, 81, 2424.
6. Бабушок В. И., Крахтинова Т. В., Бабкин В. С. Кинетика и катализ, 1984, 25, 1, 5.
7. Азатян В. В. ФГВ, 1979, 15, 5, 62.
8. Shampine L. F. Math. of Comput., 1981, 36, 499.
9. Новиков Е. А. Докл. АН СССР, 1984, 278, 2, 272.
10. Kahlert C., Rösler O. E., Varma A. // Modelling of Chemical Systems. Springer Ser. in Chem. Phys., 1981, 18, 355.
11. Бабушок В. И., Новиков Е. А., Бабкин В. С. Докл. АН СССР, 1983, 271, 4, 878.
12. Современные численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений/Под ред. Дж. Холла и Дж. Уатта.— М.: Мир, 1979.
13. Rosenbrock H. H. Computer J., 1963, 5, 329.
14. Kaps P., Rentrop P. Numer. Math., 1979, 33, 55.
15. Новиков В. А., Новиков Е. А. ЖВММФ, 1985, 25, 7, 1023.
16. Новиков Е. А., Шитов Ю. А. // Математические модели и методы решения задач механики сплошной среды.— Красноярск, 1986.
17. Новиков Е. А., Шитов Ю. А. Исследование  $(m, k)$ -методов решения жестких систем с одним и двумя вычислениями правой части.— Красноярск 1987.— (Препр./СО АН СССР. ВЦ; № 15).
18. Новиков Е. А., Шитов Ю. А. Алгоритм интегрирования жестких систем на основе  $(m, k)$ -метода второго порядка точности с численным вычислением матрицы Якоби.— Красноярск, 1987.— (Препр./СО АН СССР. ВЦ; № 20).
19. Деккер К., Вервер Я. Устойчивость методов Рунге — Кутты для жестких нелинейных дифференциальных уравнений.— М.: Мир, 1988.
20. Демидов Г. В., Новиков Е. А. ЧММСС, 1985, 16, 1, 27.
21. Новиков Е. А. Докл. АН СССР, 1984, 278, 2, 272.
22. Enright W. H., Hull T. E. // Numerical Methods for Differential Systems.— N. Y.: Academic Press, 1976.
23. Hindmarsh A. C. Ordinary Differential Equations System Solver.— UCID-3001, Rev. 3, Univ. California, 1974.

г. Новосибирск

Поступила в редакцию 18/XI 1988

УДК 541.1.034

А. Г. Белошапко, А. А. Букаемский, А. М. Ставер

### ОБРАЗОВАНИЕ УЛЬТРАДИСПЕРСНЫХ СОЕДИНЕНИЙ ПРИ УДАРНО-ВОЛНОВОМ НАГРУЖЕНИИ ПОРИСТОГО АЛЮМИНИЯ. ИССЛЕДОВАНИЕ ПОЛУЧЕННЫХ ЧАСТИЦ

Необычные физические свойства ультрадисперсных частиц и их ансамблей представляют значительный научный и прикладной интерес. При этом для изучения и практического использования физических свойств ультрадисперсных сред необходимо получение порошков с узким