

М. И. Антипин, И. Н. Гусев

MATHEMATICAL MODEL OF THE ECRANOPLAN PARAMETERS CHOICE AT THE STAGE OF THE TECHNICAL OFFER

The mathematical model of the rational parameters choice is constructed at outline designing by a method of research of space of parameters. Values of aerodynamic factors $c_y = f(a, h)$ and $m_z = f(a, h)$, relative coordinate of aerodynamic focus $x_f = f(a, h)$, distribution of aerodynamic loading on a bearing surface for three aerodynamic schemes of bearing surfaces plane, «duck», «hybrid» are received numerically. Functional dependences $c_y = f(a, h)$, $m_z = f(a, h)$, $x_f = f(a, h)$ are constructed.

Keywords: mathematical model, ground effect, ekranoplan, center of gravity, reversed delta wing.

УДК 519.622

Е. А. Новиков, Л. В. Кнауб

ПРИМЕНЕНИЕ ЯВНОГО ТРЕХСТАДИЙНОГО МЕТОДА ТИПА РУНГЕ-КУТТА ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ЗАДАЧ ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ¹

Получены коэффициенты явного трехстадийного метода типа Рунге-Кутты. Построены неравенства для контроля точности вычислений и устойчивости численной схемы. Приведены результаты расчетов двух моделей орегонатора, подтверждающие повышение эффективности за счет дополнительного контроля устойчивости.

Ключевые слова: методы Рунге-Кутты, контроль устойчивости, орегонатор.

При решении задачи Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений средней жесткости и большой размерности в ряде случаев можно применять явные методы. Они не требуют обращения матрицы Якоби и поэтому могут быть эффективнее неявных численных схем. Однако для эффективного использования явных методов при решении задач средней жесткости требуется контролировать не только точность вычислений, но и устойчивость численной схемы. В противном случае, 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 максимально допустимого. В настоящее время можно выделить два подхода к контролю устойчивости [1; 2]. Первый связан с оценкой максимального собственного числа матрицы Якоби f_y через ее норму с последующим контролем неравенства $h\|f_y\| \leq D$ [1], где h – шаг интегрирования, а положительная постоянная D зависит от размера области устойчивости. Ясно, что для явных методов, где матрица Якоби 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 $h|\lambda_{\max}| \leq D$ [2]. Такая оценка фактически не приводит к увеличению

затрат [3]. Здесь построено неравенство для контроля устойчивости явного трехстадийного метода типа Рунге-Кутты. Алгоритм интегрирования применяется для численного моделирования орегонатора, дающего сложный предельный цикл.

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, который имеет вид

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

где y и f – вещественные n -мерные вектор-функции; t – независимая переменная; h – шаг интегрирования; k_1, k_2 и k_3 – стадии метода, $p_1, p_2, p_3; \beta_{21}, \beta_{31}$ и β_{32} – числовые коэффициенты, определяющие свойства точности и устойчивости. В случае неавтономной системы $y' = f(t, y)$, $y(t_0) = y_0$, $t_0 \leq t \leq t_k$, схема (2) записывается следующим образом:

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + p_1 k_1 + p_2 k_2 + p_3 k_3; \\ k_1 &= hf(t_n, y_n); \quad k_2 = hf(t_n + \beta_{21} h, y_n + \beta_{21} k_1); \\ k_3 &= hf(t_n + [\beta_{31} + \beta_{32}] h, y_n + \beta_{31} k_1 + \beta_{32} k_2). \end{aligned} \quad (3)$$

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

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

Получим соотношения на коэффициенты метода (2) третьего порядка точности. Для этого разложим стадии k_1 , k_2 и k_3 в ряды Тейлора и подставим в первую формулу трехстадийного метода (2):

$$\begin{aligned} y_{n+1} = & y_n + (p_1 + p_2 + p_3)hf_n + \\ & + [\beta_{21}p_2 + (\beta_{31} + \beta_{32})p_3]h^2 f'_n f_n + \\ & + h^3 [\beta_{21}\beta_{32}p_3 f''_n f_n + 0,5(\beta_{21}^2 p_2 + \\ & + (\beta_{31} + \beta_{32})^2 p_3) f''_n f_n^2] + \\ & + h^4 [0,5\beta_{21}^2 \beta_{32} p_3 f'_n f''_n f_n^2 + \\ & + \beta_{21}(\beta_{31} + \beta_{32})\beta_{32} p_3 f''_n f'_n f_n^2 + \\ & + \frac{1}{6}(\beta_{21}^3 p_2 + (\beta_{31} + \beta_{32})^3 p_3) f'''_n f_n^3] + O(h^5). \end{aligned} \quad (4)$$

Сравнивая ряды для приближенного y_{n+1} и точного $y(t_{n+1})$ решений до членов с h^3 включительно при условии $y_n = y(t_n)$, запишем условия третьего порядка точности схемы (2), которые имеют вид

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

Локальную ошибку δ_n схемы (2) можно вычислить по формуле $\delta_n = y(t_{n+1}) - y_{n+1}$. Учитывая представления $y(t_{n+1})$ и y_{n+1} в виде рядов Тейлора, получим

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

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

Вариант 1. Минимизируем локальную ошибку выражения (6). Для этого, учитывая его вид, вместо уравнения (5) рассмотрим следующую расширенную нелинейную систему

$$\begin{aligned} p_1 + p_2 + p_3 = 1; \\ \beta_{21}p_2 + (\beta_{31} + \beta_{32})p_3 = 1/2; \\ \beta_{21}^2 p_2 + (\beta_{31} + \beta_{32})^2 p_3 = 1/3; \\ \beta_{21}\beta_{32}p_3 = 1/6; \\ \beta_{21}^2 \beta_{32} p_3 = 1/12; \\ \beta_{21}(\beta_{31} + \beta_{32})\beta_{32}p_3 = 1/8. \end{aligned} \quad (7)$$

При $1,5\beta_{21} = \beta_{31} + \beta_{32}$ два последних уравнения (7) совпадают. Из четвертого и пятого соотношений (7) имеем $\beta_{21} = 0,5$. Из второго и третьего равенств получим $p_2 = 1/3$ и $p_3 = 4/9$. Из первого уравнения (7) $p_1 = 2/9$, а из четвертого $\beta_{32} = 3/4$. Наконец, из соотношения $\beta_{31} + \beta_{32} = 3/4$ получим $\beta_{31} = 0$. В результате коэффициенты метода (2) с минимальной локальной ошибкой можно записать в виде

$$\begin{aligned} p_1 = 2/9; \quad p_2 = 1/3; \quad p_3 = 4/9; \\ \beta_{21} = 1/2; \quad \beta_{31} = 0; \quad \beta_{32} = 3/4. \end{aligned} \quad (8)$$

При данных коэффициентах локальную ошибку δ_n схемы (2) можно представить следующим образом $\delta_n = (h^4/24) \times$

$\times f'^3 f - (h^4/288) f''' f^3 = O(h^5)$. При использовании (2) с наборами коэффициентов (8) ни одна стадия не вычисляется в точке t_{n+1} . При быстром изменении решения это может приводить к понижению точности расчетов.

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

$$\begin{aligned} p_1 + p_2 + p_3 = 1; \\ 0,5p_2 + p_3 = 0,5; \\ 0,25p_2 + p_3 = 1/3; \\ \beta_{32}p_3 = 1/3. \end{aligned} \quad (9)$$

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

$$\begin{aligned} p_1 = 1/6; \quad p_2 = 2/3; \quad p_3 = 1/6; \\ \beta_{21} = 0,5; \quad \beta_{31} = -1; \quad \beta_{32} = 2. \end{aligned} \quad (10)$$

При данных соотношениях локальную ошибку δ_n схемы (2) можно записать следующим образом $\delta_n = (h^4/24) \times [f'^3 f - f' f'' f^2 - (1/3) f''' f^3] = O(h^5)$.

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

$$y_{n+1,1} = y_n + r_1 k_1 + r_2 k_2, \quad (11)$$

где k_1 и k_2 определены в уравнениях (2). Необходимо, чтобы данный метод имел второй порядок точности. Сравнивая ряды для $y(t_{n+1})$ и $y_{n+1,1}$ видим, что требование второго порядка будет выполнено, если $r_1 + r_2 = 1$, $\beta_{21}r_2 = 0,5$. Отсюда получим $r_2 = 0,5/\beta_{21}$, $r_1 = 1 - r_2$, где значение β_{21} определено в (8) или (10). С помощью идеи вложенных методов оценку ошибки $\varepsilon_{n,3}$ метода третьего порядка можно оценить по формуле $\varepsilon_{n,3} = y_{n+1} - y_{n+1,1} = (p_1 - r_1)k_1 + (p_2 - r_2)k_2 + p_3 k_3$. Тогда неравенство для контроля точности вычислений имеет вид $\|(p_1 - r_1)k_1 + (p_2 - r_2)k_2 + p_3 k_3\| \leq \varepsilon$, где $\|\cdot\|$ – некоторая норма в R^n , ε – требуемая точность интегрирования. В конкретных расчетах применялся метод (2) с коэффициентами (10), как более надежный. Исходя из этого неравенство для контроля точности вычислим следующим образом: $\|k_1 - 2k_2 + k_3\| \leq 6\varepsilon$.

Теперь построим неравенство для контроля устойчивости (2) предложенным в работах [2; 3] способом. Запишем стадии k_1 , k_2 и k_3 применительно к задаче $y' = Ay$, где A есть матрица с постоянными коэффициентами. В результате получим

$$k_1 = X y_n; \quad k_2 = (X + \beta_{21} X^2) y_n;$$

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

где $X = hA$. Найдем коэффициенты d_1 , d_2 и d_3 из условия выполнения равенства

$$d_1 k_1 + d_2 k_2 + d_3 k_3 = X^3 y_n.$$

Данное требование будет выполнено, если

$$d_1 = (\beta_{31} + \beta_{32} - \beta_{21})/d;$$

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

где $d = \beta_{21}^2 \beta_{32}$. Также видно, что

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

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

$$\nu_{n,3} = \beta_{21} \max_{1 \leq i \leq N} (d_1 k_1^i + d_2 k_2^i + d_3 k_3^i \mid / \mid k_2^i - k_1^i \mid). \quad (12)$$

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 выражения (12) является грубой, потому что вовсе не обязательно максимальное собственное число сильно отделено от остальных, в степенном методе применяется мало итераций, дополнительные искажения вносит нелинейность задачи (1). Поэтому здесь контроль устойчивости используется как ограничитель на размер шага интегрирования. В результате прогнозируемый шаг h_{n+1} будет вычисляться следующим образом: новый шаг h^{ac} по точности определим по формуле $h^{ac} = q_1 h_n$, где h_n – последний успешный шаг интегрирования; q_1 , учитывая соотношение $\varepsilon_{n,3} = O(h_n^3)$, задается уравнением $q_1^3 \mid \varepsilon_{n,3} \mid = \varepsilon$. Шаг h^{st} по устойчивости запишем 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 следующей формуле:

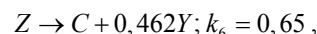
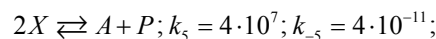
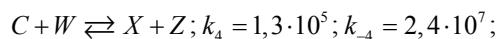
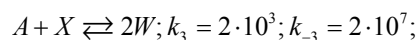
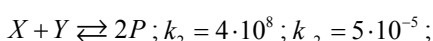
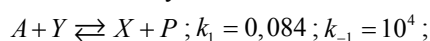
$$h_{n+1} = \max[h_n, \min(h^{ac}, h^{st})].$$

Данное выражение позволяет стабилизировать поведение шага на участке установления решения, где определяющую роль играет устойчивость. Собственно говоря, именно наличие данного участка существенно ограничивает возможности применения явных методов для решения жестких задач.

Расчеты проводились на Intel(R) Core 2 Quad CPU с двойной точностью. В конкретных расчетах левая часть неравенства для контроля точности вычислялась по формуле $\mid k_2 - k_1 \mid = \max_{1 \leq i \leq N} (\mid k_2^i - k_1^i \mid / \mid y_n^i \mid + r)$, где i – номер компоненты; r – положительный параметр. Если по i -й компоненте решения выполняется неравенство $\mid y_n^i \mid < r$, то контролируется абсолютная ошибка re , в противном случае – относительная ошибка ε . В расчетах параметр r выбирался таким образом, чтобы по всем компонентам решения фактическая точность была не хуже задаваемой. Значение ε полагалось равным 10^{-2} .

Сравнение эффективности проводилось с тринадцатистадийным методом Рунге-Кутты–Фельберга с контролем (RKF78ST) [4] и без контроля (RKF78) [5] устойчивости. В работе Е. Fehlberg [5] получены два комплекта коэффициентов вложенных методов седьмого и восьмого порядков точности, что позволяет оценить ошибку вычислений. Ниже через *isa*, *iwo* и *ifu* обозначены, соответственно, суммарное число шагов интегрирования, число повторных вычислений решения (возвратов) вследствие нарушения требуемой точности расчетов и число вычислений правой части задачи (1).

Сравнение эффективности методов проводилось на модели модифицированного орегонатора, дающего сложный предельный цикл. Соответствующая реакция состоит из шести стадий следующего вида:



где k_i , $-5 \leq i \leq 6$ – константы скоростей прямых (с положительными индексами) и обратных (с отрицательными индексами) стадий. В данной реакции участвуют 7 частиц, имеющие следующие обозначения: $A = \text{BrO}_3^-$, $C = \text{M}(n)$, $P = \text{HOBr}$, $W = \text{BrO}_2$, $X = \text{HBrO}_2$, $Y = \text{Br}^-$, $Z = \text{M}(n+1)$. В этих обозначениях $\text{M}(n)$ – ион металла катализатора, $\text{M}(n+1)$ – окисленная форма этого иона. Обозначим концентрации реагентов следующим образом:

$$c_1 = [\text{BrO}_3^-], c_2 = [\text{Br}^-], c_3 = [\text{M}(n)], c_4 = [\text{HBrO}_2],$$

$$c_5 = [\text{HOBr}], c_6 = [\text{BrO}_2], c_7 = [\text{M}(n+1)].$$

Данная реакция протекает в изотермическом реакторе постоянного объема с обменом вещества, то есть соответствующая система дифференциальных уравнений состоит из семи уравнений вида (например, [6; 7])

$$C' = AV^T + \frac{1}{\Theta}(C_p - C),$$

где $C = (c_1, c_2, \dots, c_7)^T$ – вектор концентраций реагентов; A – стехиометрическая матрица; $V = (v_1, v_2, \dots, v_6)^T$ – вектор скоростей стадий; $C_p = (c_{p1}, c_{p2}, \dots, c_{p7})^T$ – вектор концентраций реагентов на входе в реактор; Θ – время пребывания смеси в реакторе, $\Theta = r/u$; r – объем реактора; u – объемная скорость течения смеси через реактор.

Соответствующая система дифференциальных уравнений имеет вид

$$c'_1 = -v_1 - v_3 + v_5 + (c_{p1} - c_1) / \Theta;$$

$$c'_2 = -v_1 - v_2 + 0,462v_6 + (c_{p2} - c_2) / \Theta;$$

$$c'_3 = -v_4 + v_6 + (c_{p3} - c_3) / \Theta;$$

$$c'_4 = v_1 - v_2 - v_3 + v_4 - 2v_5 + (c_{p4} - c_4) / \Theta; \quad (13)$$

$$c'_5 = v_1 + 2v_2 + v_3 + (c_{p5} - c_5) / \Theta;$$

$$c'_6 = 2v_3 - v_4 + (c_{p6} - c_6) / \Theta;$$

$$c'_7 = v_4 - v_6 + (c_{p7} - c_7) / \Theta,$$

где скорости $v_1, v_2, \dots, v_6$ стадий определяются по следующим формулам:

$$v_1 = k_1 c_1 c_2 - k_{-1} c_4 c_5; \quad v_2 = k_2 c_2 c_4 - k_{-2} c_5^2;$$

$$v_3 = k_3 c_1 c_4 - k_{-3} c_6^2; \quad v_4 = k_4 c_3 c_6 - k_{-4} c_4 c_7;$$

$$v_5 = k_5 c_4^2 - k_{-5} c_1 c_5; \quad v_6 = k_6 c_7.$$

Интегрирование системы (13) проводилось на промежутке $[0, 1000]$ с начальным шагом 10^{-5} . Концентрации реагентов на входе в реактор принимают значения $c_{p1} = 0,14$, $c_{p2} = 0,151 \cdot 10^{-5}$, $c_{p3} = 0,125 \cdot 10^{-3}$, $c_{p4} = c_{p5} = c_{p6} = c_{p7} = 0$, причем $\Theta = 125,5$. Начальные значения концентраций реагентов следующие:

$$c_1 = 0,1387; c_2 = 0,1534 \cdot 10^{-6};$$

$$c_3 = 0,1176 \cdot 10^{-3}; c_4 = 0,3165 \cdot 10^{-7};$$

$$c_5 = 0,1956 \cdot 10^{-3}; c_6 = 0,5814 \cdot 10^{-6}; c_7 = 0,631 \cdot 10^{-5}.$$

При решении задачи (13) методом третьего порядка RK3 без контроля устойчивости затраты *isa* = 274 247;

$iwo = 71\,808$; $ifu = 966\,357$, а для алгоритма RK3ST с контролем устойчивости – $isa = 233\,770$; $iwo = 3\,517$; $ifu = 708\,344$. Вычислительные затраты для метода Фельберга следующие: для RK78 – $isa = 140\,134$; $iwo = 140\,089$; $ifu = 3\,502\,810$; для RK78ST – $isa = 138\,912$; $iwo = 46\,378$; $ifu = 2\,362\,392$.

Рассмотрим простейшую модель орегонатора с периодическим решением [8], которая в последнее время активно используется для тестирования методов интегрирования

$$\begin{aligned} y_1' &= 77,27(y_2 - y_1 y_2 + y_1 - 8,375 \cdot 10^{-6} y_1^2); \\ y_2' &= (-y_2 - y_1 y_2 + y_3) / 77,27; \\ y_3' &= 0,161(y_1 - y_3); \\ t &\in [0, 300]; h_0 = 10^{-3}; y_1(0) = 4; \\ y_2(0) &= 1,1; y_3(0) = 4. \end{aligned} \quad (14)$$

При решении задачи (14) методом третьего порядка RK3 без контроля устойчивости затраты составляют $isa = 2\,903\,698$; $iwo = 769\,326$; $ifu = 10\,249\,746$, а для алгоритма RK3ST с контролем устойчивости – $isa = 2\,966\,743$; $iwo = 7\,764$; $ifu = 8\,915\,757$. Вычислительные затраты для метода Фельберга следующие: для RK78 – $isa = 1\,478\,475$; $iwo = 1\,477\,617$; $ifu = 38\,429\,196$; для RK78ST – $isa = 1\,507\,475$; $iwo = 21\,158$; $ifu = 19\,872\,229$.

Из сравнения результатов расчетов следует, что контроль устойчивости всегда приводит к повышению эффективности. Это является следствием устранения возвратов (повторных вычислений решения), возникающих из-за неустойчивости численной формулы. В конце интервала интегрирования фактическая точность вычислений для алгоритмов без контроля устойчивости примерно на порядок лучше задаваемой, а для алгоритмов с контролем – примерно на два порядка. Такая же тенденция сохраняется при интегрировании всех рассмотренных задач и, в частности, примеров [8; 9].

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. Более того, в некоторых случаях это приводит к нестандартно высокому повышению эффективности алгоритма. На участке установления за счет контроля устойчивости старые ошибки стремятся к нулю, а новые невелики за счет ма-

лости производных решения. В некоторых случаях вместо оценки максимального собственного числа оценивается следующее по порядку. Шаг интегрирования становится больше максимально допустимого и с таким шагом осуществляется интегрирование до тех пор, пока не нарушается неравенство для контроля точности. Как правило, число таких шагов невелико. Однако величина шага может на порядок превышать максимальный шаг по устойчивости. После нарушения неравенства для контроля точности шаг уменьшается до максимально возможного. Такой эффект может повторяться многократно в зависимости от длины участка установления. В результате средний шаг интегрирования может превышать максимально допустимый.

Библиографический список

1. Shampine, L. M. Implementation of Rosenbrock method / L. M. Shampine // ACM Transaction on Mathematical Software. 1982. Vol. 8. № 5. P. 93–113.
2. Новиков, Е. А. Контроль устойчивости явных методов интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений / Е. А. Новиков, В. А. Новиков // ДАН СССР. 1984. Т. 277. № 5. С. 1058–1062.
3. Новиков, Е. А. Явные методы для жестких систем / Е. А. Новиков. Новосибирск : Наука, 1997.
4. Новиков, Е. А. Контроль устойчивости метода Фельберга седьмого порядка точности / Е. А. Новиков, Ю. В. Шорников // Вычислительные технологии. 2006. Т. 11. № 4. С. 65–72.
5. Fehlberg, E. Classical fifth-, sixth-, seventh- and eighth order Runge-Kutta formulas with step size control / E. Fehlberg // Computing. 1969. Vol. 4. P. 93–106.
6. Бабкин, В. С. Автоматизированный банк кинетической информации (общее описание) / В. С. Бабкин, В. И. Бабушок, Ю. П. Дробышев, Ю. Н. Молин, Е. А. Новиков, Г. И. Скубневская // Препринт № 704. Новосибирск : ВЦ СО АН СССР. 1987.
7. Бабкин, В. С. Разработка банка кинетической информации / В. С. Бабкин, В. И. Бабушок, Ю. Н. Молин, Е. А. Новиков, Г. И. Скубневская // Гос. служба стандартных справочных данных. М. : Изд-во стандартов, 1989. Бюлл. 20. С. 8–10.
8. Enright, W. H. Comparing numerical methods for the solutions of systems of ODE's / W. H. Enright, T. E. Hull // BIT. 1975. № 15. P. 10–48.
9. Хайпер, Э. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи / Э. Хайпер, Г. Ваннер. М. : Мир, 1999.

E. A. Novikov, L. V. Knaub

APPLICATION OF EXPLICIT THREE-STAGE RUNGE-KUTTA METHOD FOR NUMERICAL MODELING OF CHEMICAL KINETICS PROBLEMS

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. Numerical results of oregonator two models with an additional stability control demonstrate an efficiency increase.

Keywords: Runge-Kutta methods, stability control, oregonator.