

УДК 519.6:544.45

ОЦЕНКА ЭФФЕКТИВНОСТИ ПРОГРАММ РЕШЕНИЯ ЖЕСТКИХ СИСТЕМ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ ПРИМЕНИТЕЛЬНО К ЗАДАЧАМ ФИЗИКИ ГОРЕНИЯ

В. К. Рябинин
(Южно-Уральский ГУ, г. Челябинск)

Исследована эффективность применения трех программ — интеграторов систем обыкновенных дифференциальных уравнений с высокой степенью математической жесткости. Такие уравнения возникают при описании кинетики разветвленно-цепных реакций, свойственных для процессов горения и взрывного превращения. Тестирование программ-интеграторов выполнено на примере трех модельных задач, характерных для физики горения газов.

Ключевые слова: математическое моделирование, горение, химическая кинетика, жесткие дифференциальные уравнения, тестирование программного обеспечения.

Введение

Актуальной проблемой современной вычислительной физики является использование детальных кинетических механизмов химических процессов при решении задач макрокинетики процессов горения и химической газодинамики. При этом приходится описывать комплексы из сотен и даже тысяч (N_R) химических реакций с участием десятков-сотен (N_C) реагентов с включением в основную модель системы N_C обыкновенных дифференциальных уравнений химической кинетики, обладающей высокой степенью математической жесткости [1, 2]. Выбор технологии решения системы жестких дифференциальных уравнений при решении различных классов задач может определяться совершенно разными требованиями.

В данной работе исследуется сравнительная эффективность ряда актуальных жестко устойчивых методов применительно к набору характерных тестовых задач. Сравнивались следующие программы:

GEAR — разновидность реализации *эталонного* алгоритма, основанного на многошаговом методе Гира переменного порядка, специально адаптированного для решения задач химической кинетики [2]. Имеет весьма эффективный блок адаптивного выбора шага. Позволяет использовать для вычисления

матрицы Якоби внешнюю пользовательскую процедуру, хотя имеет и встроенные средства для ее численного расчета. Опыт применения данной программы показал ее высокую эффективность и устойчивость при решении широкого круга задач теории горения. Недостатками являются сравнительно медленный рестарт при многократном запуске и необходимость вычисления матрицы Якоби.

СНЕМЕQ2 — сравнительно новая программа, специально ориентированная на применение в пространственных задачах вычислительной механики реагирующих сред [3, 4]. По данным авторов этого алгоритма, его быстродействие в несколько раз выше, чем у метода Гира. Данный метод основан на приближенном аналитическом решении уравнений химической кинетики. Хотя он имеет невысокий порядок точности, но при этом является одношаговым, быстро стартовым и не требует вычисления матрицы Якоби, что может дать существенный выигрыш в быстродействии и экономии памяти при решении задач пространственной химической газодинамики.

МЕТAN1 — полунявный метод экстраполяции [1, 5], занимающий промежуточное положение между предыдущими методами: он

одношаговый, но требует вычисления матрицы Якоби. Явным недостатком имеющейся в наличии версии этой программы является невозможность применения внешней пользовательской процедуры вычисления матрицы Якоби — используется только встроенный численный расчет.

Для решения всех задач, описанных ниже, использована система программирования Compaq Digital Visual FORTRAN v. 6.6. Все расчеты выполнены на трех типах процессоров — Pentium 3 1200 MHz, Pentium 4 3000 MHz и Core 2 Duo 2930 MHz, далее они обозначены как P3, P4 и C2D соответственно.

При программировании модулей для расчета правых частей уравнений химической кинетики и матрицы Якоби использована технология прямых безындексных вычислений, что приводит к увеличению размера исполняемых модулей, но существенно повышает скорость вычислений. Исходные тексты соответствующих модулей на Фортране генерируются автоматически с помощью специально разработанной программы.

При выполнении тестов на быстродействие подавляются все записи в файлы и обращения к монитору, т. е. контролируется только время выполнения собственно математических операций.

Тестовая задача 1. Нестационарный тепловой взрыв в адиабатическом реакторе

Расчет адиабатического периода индукции t_{ad} для реагирующих смесей произвольного состава при заданной начальной температуре является задачей, необходимой для оценки пожаро-взрывобезопасности веществ и технологических процессов. В частности, знание подобной зависимости t_{ad} необходимо для современных методов численного моделирования детонационных волн.

Моделируемая система представляет собой замкнутый изохорный адиабатический реактор — идеально теплоизолированную емкость постоянного объема, в начальном состоянии заполненную смесью газообразных веществ, способных вступать в систему суммарно-экзотермических реакций [6, 7]. Состав смеси, ее начальная температура и давление задаются. Из-за адиабатичности реактора выделяющееся в ходе реакций тепло приводит к прогрессирующему разогреву

смеси, заканчивающемуся тепловым взрывом через время t_{ad} . В ходе процесса меняются химический состав реагирующей смеси и ее температура. Для расчета текущих соотношений концентраций, парциальных плотностей и давлений используются формулы для смеси идеальных газов.

Математическая модель подобного реактора описывается уравнением баланса энергии для определения температуры T реагирующей смеси и N_C уравнениями для мольных концентраций C_j каждого из реагентов:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\sum_{j=1}^{N_C} \left(-h_j(T) \frac{dC_j}{dt} \right)}{\sum_{j=1}^{N_C} C_j \mu_j c_{Vj}(T)}; \quad (1)$$

$$\frac{dC_j}{dt} = \sum_{i=1}^{N_R} \nu_{i,j} W_i, \quad j = 1, \dots, N_C \quad (2)$$

при начальных условиях

$$t = 0; \quad T = T_{\text{н}}; \quad C_j = C_{j,0}.$$

В (1), (2) использованы следующие обозначения: t — время; h_j , c_{Vj} , μ_j — энтальпия, изохорная теплоемкость и молекулярная масса j -го компонента смеси; $\nu_{i,j}$ — стехиометрический коэффициент j -го реагента в i -й реакции. В уравнении (1) тепловые эффекты реакций рассчитываются с помощью закона Гесса, что позволяет выразить мгновенную скорость тепловыделения через текущие энтальпии реагентов. Скорость i -й реакции определяется законом действующих масс и модифицированным законом Аррениуса

$$W_i = \prod_{j=1}^{N_C} C_j^{\nu_{i,j}} k_i T^{b_i} \exp\left(-\frac{E_i}{RT}\right), \quad (3)$$

где k_i , b_i , E_i — кинетические константы для расчета скорости i -й реакции; R — универсальная газовая постоянная.

Рассчитываются адиабатические периоды индукции для стехиометрической смеси $2\text{O}_2 + \text{CH}_4$ на основе кинетики [8] (156 реакций, 23 активных реагента и один инерт N_2). Решается система из 25 дифференциальных уравнений (24 концентрации + температура). Расчеты проводятся одним потоком последовательно для 19 начальных температур от 700 до 2500 K через 100 K при стехиометрическом соотношении метана и кислорода и начальном давлении 1 атм. Критерий

определения t_{ad} — достижение максимума скорости тепловыделения. Результаты расчетов приведены на рис. 1 и в табл. 1, где используются следующие обозначения: ε — относительная точность решения; it_{max} — максимальное количество итераций в программе CHEMEQ2; $N_{пр.ч}$, $N_{якоб}$ — количество вычислений правых частей уравнений и матрицы Якоби.

С математической точки зрения это достаточно несложная задача, поскольку в ходе расчета одного варианта температура только растет, а вычисления прекращаются задолго до завершения химических превращений. Однако при низких начальных температурах, когда период индукции велик и на большей его части изменения идут очень медленно и практически изотермически, подвергается испытанию алгоритм выбора шага, встроенный в программу. Возникает

конфликт между желанием увеличить шаг при расчете почти стационарного процесса и проявляющейся при этом математической жесткостью за счет быстрых химических реакций. Как показывает опыт, далеко не все программы успешно справляются с этой проблемой.

Все три программы дали практически идентичные зависимости адиабатического периода индукции, за исключением одной точки: при $T_n=1700$ К программа CHEMEQ2 дает завышенное значение; при изменении точности расчета и it_{max} этот результат сохраняется. Очевидно, аномальный результат является следствием особенности алгоритма выбора шага в программе CHEMEQ2. За исключением данной выпадающей точки, результаты расчетов, полученные по всем трем программам, согласуются с экспериментальными данными по задержке воспламенения метан-кислородных смесей [9, 10].

С точки зрения эффективности абсолютно лучший результат показала используемая версия метода Гира. Она успешно справилась со всеми расчетными режимами при минимальном объеме расчетов. Для программы CHEMEQ2 потребовался подбор параметра, определяющего ограничение на количество уточняющих итераций; в итоге в табл. 1 приведен наиболее быстрый вариант расчета. Самый худший результат продемонстрировала программа METAN1: на упомянутых выше низкотемпературных вариантах терялось решение. Для того чтобы его получить, в вызывающий модуль тестовой программы пришлось встроить довольно грубый ограничитель шага, что и привело к такому плохому результату.

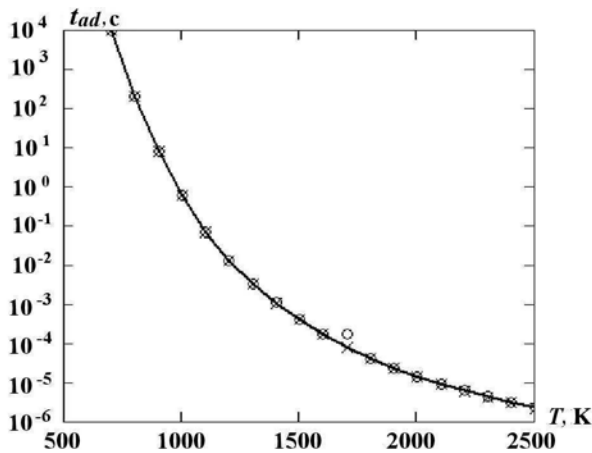


Рис. 1. Зависимость адиабатического периода индукции от начальной температуры: — — GEAR; ○ — CHEMEQ2; × — METAN1

Таблица 1

Результаты решения тестовой задачи 1

Показатель	GEAR* ($\varepsilon = 10^{-4}$)	CHEMEQ2 ($\varepsilon = 10^{-2}$, $it_{max} = 5$)	METAN1** ($\varepsilon = 10^{-4}$)
Время счета на P3/P4/C2D, с	0,75/0,438/0,25	19,36/11,61/6,3	57,22/32,45/17,98
$N_{пр.ч}/N_{якоб}$	13 199/1 052	389 717	1 084 519

*Расчет матрицы Якоби увеличивает время счета задачи примерно в 3,1 раза.

** $N_{якоб}$ не контролировалось, так как численный расчет выполняется только внутри программы-решателя.

Тестовая задача 2. Осцилляционное горение водород-кислородной смеси в проточном реакторе идеального смешения [11]

Схема проточного реактора идеального смешения показана на рис. 2. По сравнению с моделью из задачи 1 здесь добавляются теплообмен через стенку с окружающей средой, имеющей температуру T_0 , и объемный поток реагентов w , поступающих на вход с температурой T_{in} и заданными мольными концентрациями, $C_{j,in}$ [6, 7]. На выходе из реактора этот поток имеет температуру T и состав реагирующей смеси с C_j . Идеальное смешение обеспечивает отсутствие градиентов температуры и концентрации в объеме реактора.

Уравнения из задачи 1 дополняются слагаемыми для тепло- и массообмена с окружающей средой:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\sum_{j=1}^{N_C} -h_j(T) \frac{dC_j}{dt}}{\sum_{j=1}^{N_C} C_j \mu_j c_{Vj}(T)} - \frac{T - T_0}{t_q} - \frac{T - T_{in}}{t_{\pi}}; \quad (4)$$

$$\frac{dC_j}{dt} = \sum_{i=1}^{N_R} \nu_{i,j} W_i + \frac{C_{j,in} - C_j}{t_{\pi}}, \quad j = 1, \dots, N_C. \quad (5)$$

Интенсивности тепло- и массообмена задаются в виде характерных времен t_q и t_{π} теплообмена и пребывания вещества в реакторе (t_{π} есть отношение объема реактора к потоку реагентов w); считаем, что они не меняются в ходе процесса. Соотношения (4), (5) дополняются соотношением (3) для скорости реакций и такими же начальными условиями, как в задаче 1.

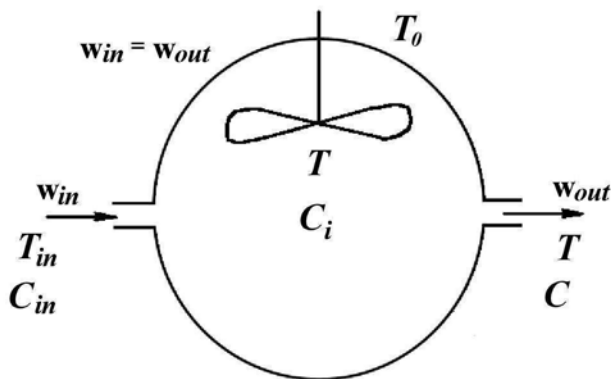


Рис. 2. Схема реактора идеального смешения

Рассчитывается поведение реактора идеально-го смешения для стехиометрической смеси $2\text{H}_2 + \text{O}_2$ на основе кинетики [12] (44 реакции, 8 активных реагентов и один инерт N_2). Решается система из 10 дифференциальных уравнений. Расчеты проводятся для случая линейного роста температуры окружающей среды по формуле $T_0 = (700 + 5t)\text{K}$; $t_q = 0,04\text{c}$; $t_{\pi} = 4\text{c}$. На вход реактора подается стехиометрическая смесь водорода и кислорода при температуре $T_{in} = 700\text{K}$. При таких параметрах в реакторе наблюдается переход от режима без горения к устойчивому горению через сложную последовательность релаксационных автоколебаний с убывающими амплитудой и периодом (рис. 3) [11].

Расчет такого процесса представляет сложность для любого интегратора, так как последовательность вспышек с полным выгоранием исходных веществ и последующих периодов депрессии при обновлении реагирующей смеси приводит к многократной перестройке структуры спектра матрицы Якоби и изменению характера жесткости решаемой задачи. Это требует наличия "сильного" алгоритма адаптивного выбора шага и высокой точности расчета.

Результаты применения тестируемых программ обобщены в табл. 2.

И здесь наилучшие результаты показал метод Гира. Его адаптивные свойства позволили по-

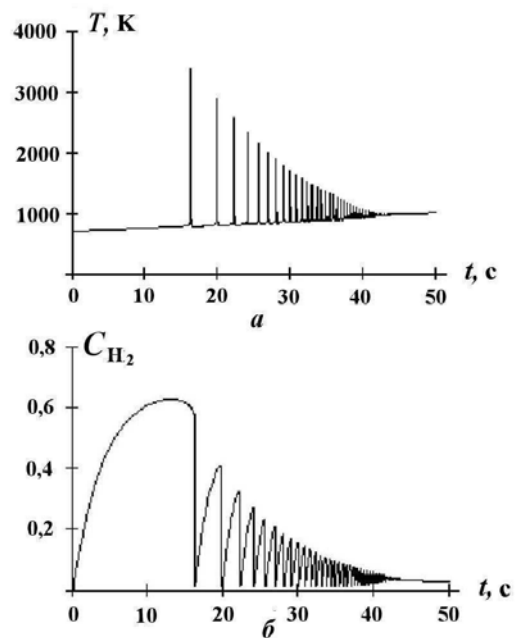


Рис. 3. Релаксационные колебания в реакторе: а — температура; б — мольная доля H_2

Результаты решения тестовой задачи 2

Показатель	GEAR ($\varepsilon = 10^{-4}$)	СНЕМЕQ2 ($\varepsilon = 10^{-4}$, $it_{\max} = 1$)	МЕТАН1* ($\varepsilon = 10^{-4}$)
Время счета на P3/P4/C2D, с	0,593/0,312/0,172	158,6/91,1/51	3,34/2,73/1,05
$N_{\text{пр.ч}}/N_{\text{якоб}}$	33 674/5 144	11 271 140	214 444

* $N_{\text{якоб}}$ не контролировалось, так как численный расчет выполнялся только внутри программы-решателя.

лучить решение за минимальное время и с минимальным количеством вычислений правых частей и матрицы Якоби. Интегратор МЕТАН1 позволил получить практически такое же решение с несколько большими затратами. Однако следует отметить, что при его использовании изменение параметров расчета (заданной точности, начального шага по времени) может вообще привести к потере решения, в то время как метод Гира с такими ситуациями успешно справляется. Применение интегратора СНЕМЕQ2 при указанных параметрах дало похожее решение (с отклонениями в несколько процентов в послевзрывных областях), очень сильно проигрывая в эффективности. При снижении точности СНЕМЕQ2 дает качественно совершенно непохожие результаты. Это, по всей видимости, объясняется его изначально низким порядком точности, не позволяющим отслеживать сложный характер моделируемого процесса.

Тестовая задача 3. Макрокинетическая модель дефлаграционной волны горения

Как отмечено в [1], моделирование сложных химических процессов как составляющей пространственных задач физики горения и химической газодинамики сильно отличается от раздельного решения системы уравнений химической кинетики. В этих задачах уравнения химической кинетики должны быть проинтегрированы на относительно малых шагах по времени и во многих расчетных ячейках совместно с расчетом диффузионных и конвективных членов в уравнениях. Кроме того, требуемое большое число расчетных ячеек, достигающее в многомерной области десятков или сотен тысяч, не позволяет хранить дополнительную информацию обо всех компонентах в каждой ячейке между шагами по времени. Следует учесть и то, что ошибки при расчете газовой динамики редко оказываются меньше нескольких процентов, так

что при расчете химических процессов не нужна высокая точность. Константы скоростей химических реакций, в лучшем случае, известны неточно. Именно поэтому при решении задач химической газодинамики целесообразно применять одношаговые самостартующие алгоритмы, использующие вычислительные методы низкого порядка. Этим требованиям отвечает программа СНЕМЕQ2 [3, 4].

Для проверки применимости интеграторов в условиях пространственных расчетов была выбрана модель распространения одномерного дефлаграционного пламени, основанная на макрокинетическом подходе [6, 7]. В этом случае слабые, описывающие процессы переноса, задаются наиболее формальным образом, позволяя при этом сохранить химическую часть задачи в полном виде.

Как известно, основным механизмом распространения волны дефлаграционного горения является молекулярный перенос тепла из зоны горения в непрореагировавшее вещество. В газах параллельно возможна и молекулярная диффузия химически активных реагентов. В использованной модели диффузия для простоты не учитывается. Кроме того, не учтена и сжимаемость газа. Модели подобного типа применяются для моделирования твердопламенного горения [13], где диффузия и сжимаемость не существенны. Тем не менее данная модель была применена для описания в качестве модельной задачи газофазного пламени, поскольку Я. Б. Зельдовичем и Д. А. Франк-Каменецким [6, 7] были получены базовые результаты по скорости горения газовых смесей с использованием только уравнения теплопроводности. Для тестовой задачи, в которой достаточно сохранить только доминирующие физические механизмы, получение количественно точных результатов — не главная цель. Учет диффузии и теплового расширения газа носит поправочный характер, и такое упрощение модели вполне допустимо. В

частности, можно отметить, что тепловое расширение газа в зоне прогрева увеличивает длину волны $\delta_{\text{тепл}}$ (рис. 4), градиент температуры уменьшается, снижая тепловой поток из узкой зоны химической реакции, что в соответствии с теорией Зельдовича—Франк-Каменецкого должно приводить к уменьшению нормальной скорости горения. Поэтому предлагаемая модель должна демонстрировать завышенную скорость распространения фронта пламени по сравнению с наблюдаемой в эксперименте.

С учетом принятых допущений уравнение баланса энергии (1) должно быть дополнено слагаемым, описывающим молекулярную теплопередачу, т. е.

$$\frac{dT}{dt} = a \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\sum_{j=1}^{N_C} -h_j(T) \frac{dC_j}{dt}}{\sum_{j=1}^{N_C} C_j \mu_j c_{Vj}(T)}$$

Уравнения для концентраций реагентов аналогичны (2).

Начальные условия: $t = 0; T(x) = T_n; C_j(0) = C_{j,0}$.

Граничные условия:

$$\begin{aligned} T(0, t) &= T_{ign} \text{ при } 0 \leq t \leq t_{ign}; \\ \frac{\partial T(0, t)}{\partial x} &= 0 \text{ при } t > t_{ign}; \\ \frac{\partial T(L, t)}{\partial x} &= 0 \text{ при } t > 0. \end{aligned}$$

Здесь a — коэффициент температуропроводности; L — длина расчетной области; T_{ign} и t_{ign} — температура и длительность зажигающего импульса.

Рассчитывается процесс распространения дефлаграционной волны горения в близкой к сте-

хиометрической метан-воздушной смеси $2O_2 + CH_4 + 7N_2$ на основе кинетики [8] (156 реакций, 23 активных реагента и один инерт N_2). Решается система из 25 дифференциальных уравнений. Исходная смесь с температурой 300 К при давлении 1 атм поджигается слева накаливаемым телом с температурой 2500 К в течение 0,0005 с. Образуемый фронт пламени движется вправо до столкновения с противоположной адиабатической границей.

Основная пространственная задача решается с помощью полунейвной схемы методом прогонки. Для расчета химических процессов использован принцип расщепления по процессам [1]. Химические реакции рассчитываются в автономном программном блоке, вызываемом при расчете каждой ячейки. Длина расчетной области $L = 10^{-3}$ м, длительность рассчитываемого процесса 0,002 с. Параметры сетки определяются исходя из оценок характерной ширины зоны прогрева $\sqrt{at_{ad}}$ и характерного времени реакции t_{ad} . Расчет выполняется на 500 пространственных узлах, расположенных на равномерной сетке, за 2500 временных шагов одинаковой длины.

На рис. 5 показаны рассчитанные профили температуры в разные моменты времени, что демонстрирует структуру волны горения. На рис. 6 приведены зависимости координаты фронта пламени и его скорости при оптимальных для программ параметрах точности.

Видно, что все три программы демонстрируют близкие (но не идентичные) результаты. Наблюдаются небольшие колебания скорости горения. Отметим, что при этом для программы GEAR потребовалось задать довольно высокую точность $\varepsilon = 10^{-6}$. При уменьшении заданной точности расчета до $\varepsilon = 10^{-4}$ решение методом Гира начинает отклоняться от решений по CHEMEQ2 и METAN1 (рис. 7) — наблюдается более высокая скорость фронта пламени, а колебания скорости почти исчезают. При дальнейшем уменьшении точности решения еще сильнее расходятся.

Несмотря на принятые допущения при формулировке задачи, рассчитанная температура продуктов горения $T = 2190$ К согласуется с экспериментальными данными (2180—2240 К) [14]. Скорость же фронта пламени 0,45—0,5 м/с, как и предполагалось, оказалась несколько выше экспериментально определенной нормальной скорости горения (0,28—0,4 м/с) [10, 14, 15].

В табл. 3 обобщены результаты, позволяющие получить представление об эффективности те-

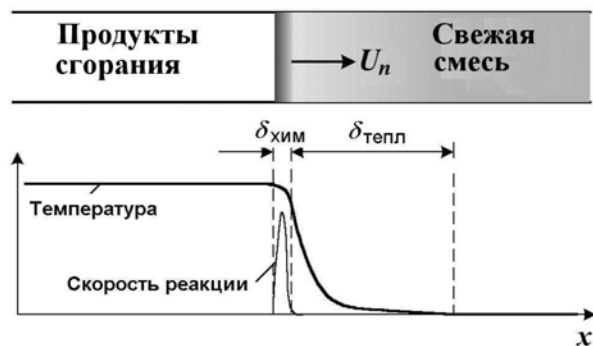


Рис. 4. Структура волны дефлаграционного горения

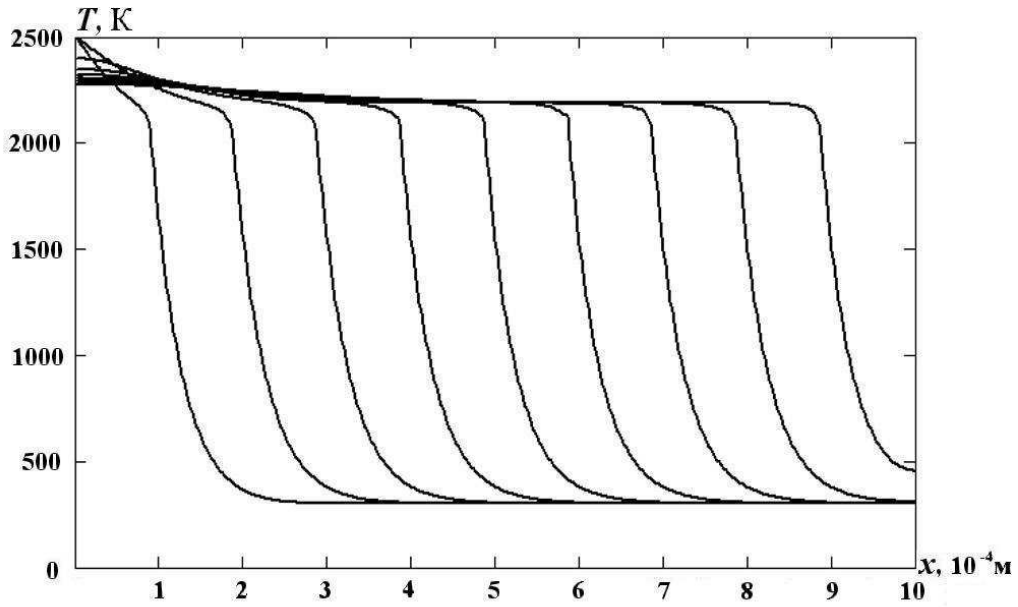


Рис. 5. Профили температуры в волне горения в разные моменты времени

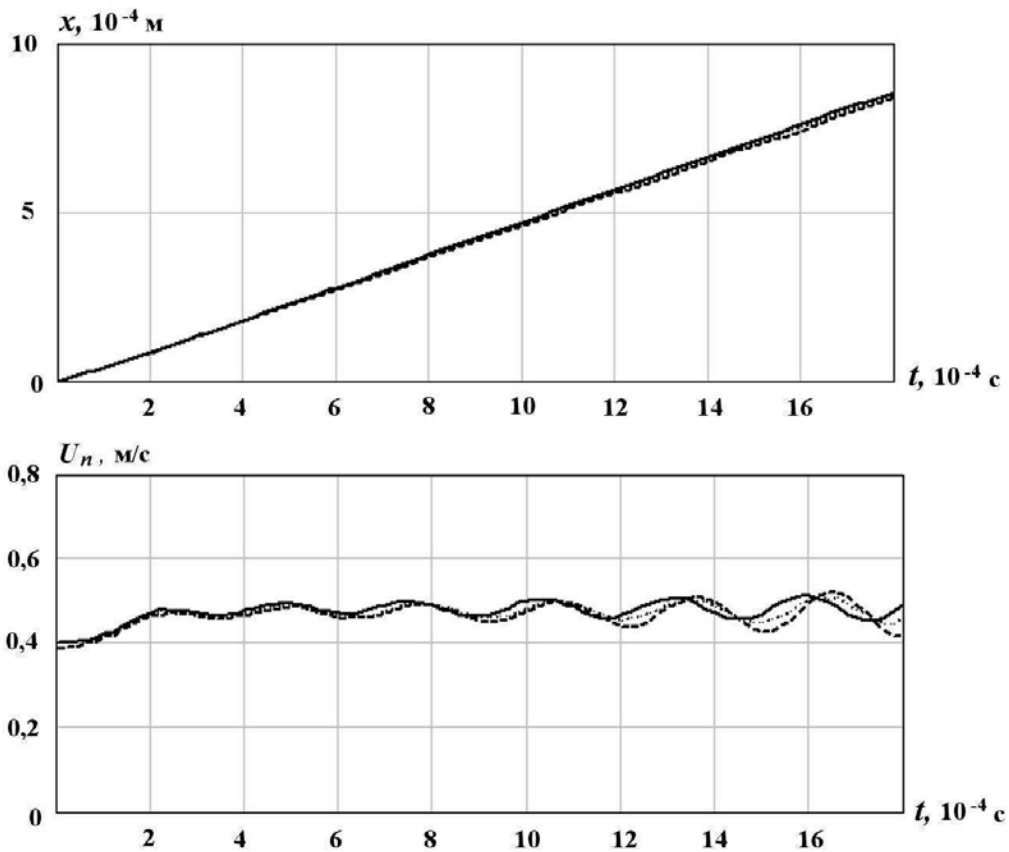


Рис. 6. Зависимости координаты фронта пламени и его скорости при оптимальных для программ параметрах точности: — — GEAR, $\varepsilon = 10^{-6}$; ... — CHEMEQ2, $\varepsilon = 10^{-2}$; - - - — METAN1, $\varepsilon = 10^{-4}$

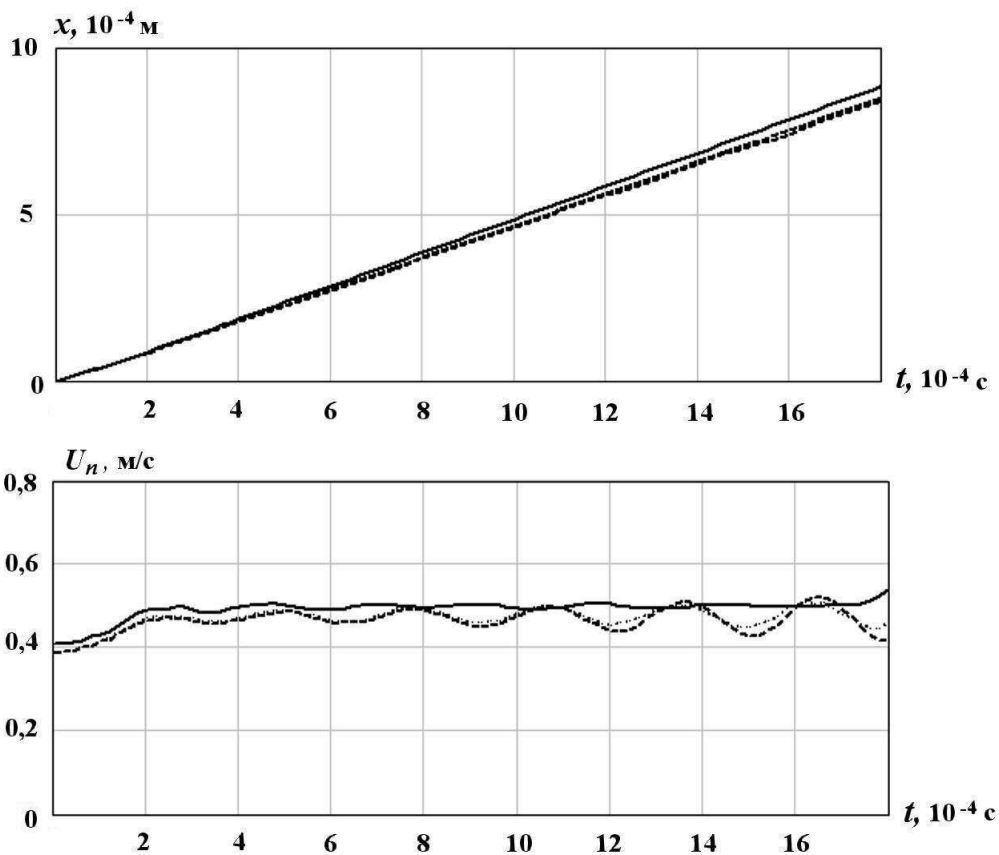


Рис. 7. Зависимости координаты фронта пламени и его скорости при пониженной точности для программы GEAR: — — GEAR, $\varepsilon = 10^{-4}$; ... — CHEMEQ2, $\varepsilon = 10^{-2}$; - - - - METAN1, $\varepsilon = 10^{-4}$

Таблица 3

Результаты решения тестовой задачи 3

Показатель	GEAR* ($\varepsilon = 10^{-6}$)	CHEMEQ2 ($\varepsilon = 10^{-2}$, $it_{\max} = 1$)	METAN1** ($\varepsilon = 10^{-4}$)
Время счета на P3/P4/C2D	1 614/1 050/605	737,5/416,4/234,6	3 490/2 022/1 124
$N_{\text{пр.ч.}}/N_{\text{якоб}}$	24 665 703/4 744 623	14 656 582	65 818 06
Среднее время одного обращения к хим. блоку, мс	1,29/0,84/0,485	0,59/0,333/0,188	2,79/1,62/0,899

* Расчет якобиана увеличивает время счета задачи примерно в 3,7 раза; снижение точности до $\varepsilon = 10^{-4}$ уменьшает время счета в 1,85 раза.

** $N_{\text{якоб}}$ не контролировалось, так как численный расчет выполнялся только внутри программы-решателя.

стируемых программ. Здесь наилучшим образом проявил себя интегратор CHEMEQ2. Он позволил получить решение за минимальное время при заданной точности $\varepsilon = 10^{-2}$. Программа, основанная на методе Гира, в данном случае показала вдвое худшие результаты. Отметим, что при снижении точности расчета до $\varepsilon = 10^{-4}$ эффективности GEAR и CHEMEQ2 становятся сопоставимыми, хотя при этом, как отмечено вы-

ше, появляются качественные отличия в решении данной задачи. Если учесть, что интегратор CHEMEQ2 не требует модуля вычисления матрицы Якоби, что весьма облегчает процесс разработки программ, выгоды его применения становятся очевидными. Программа METAN1 и здесь оказалась на последнем месте, хотя и не с таким отрывом, как в предыдущих задачах.

В заключение отметим, что решение этой же задачи с одной эффективной реакцией без применения внешнего интегратора было получено на P3 менее чем за одну секунду. При этом полученные температура продуктов горения и скорость фронта были близки к приведенным выше значениям, но профиль температуры в фронте пламени был более крутым, а колебания скорости пламени отсутствовали.

Выводы

Программа, основанная на методе Гира, хорошо себя зарекомендовала при решении всех задач. Для задач неизотермической химической кинетики она лидирует с огромным отрывом, но при решении пространственной задачи несколько проигрывает CHEMEQ2.

Программа CHEMEQ2 неэффективна при решении задач неизотермической химической кинетики. Напротив, при решении пространственной задачи ее использование дало лучшие результаты.

По программе METAN1 везде получены посредственные результаты, при этом она очень "капризна" и неустойчива. При решении каждой задачи потребовалось приложить заметные усилия по подбору параметров программы, при которых не теряется решение.

Во всех случаях изменение типа процессора не отразилось на параметрах расчета — количества расчетов правых частей уравнений и матрицы Якоби остались одними и теми же, как и численные результаты. Изменилось лишь время расчета, определяемое быстродействием процессора, причем соотношение времен счета для всех задач оказалось одинаковым.

Работа выполнена при поддержке программы развития Южно-Уральского государственного университета (Национальный исследовательский университет).

Список литературы

1. *Оран Э., Борис Дж.* Численное моделирование реагирующих потоков. М.: Мир, 1990.
2. *Полак Л. С., Гольденберг М. Я., Левицкий А. А.* Вычислительные методы в химической кинетике. М.: Наука, 1984.

3. *Oran E., Boris J.* Numerical Simulation of Reactive Flow. Second ed. Cambridge University Press, 2001.
4. *Mott D. R., Oran E. S.* CHEMEQ2: A Solver for the Stiff Ordinary Differential Equations of Chemical Kinetics. NRL Memorandum Report No. 6400-01-8553, 2001.
5. *Deufhard P.* A semi-implicit midpoint rule for stiff systems of ordinary differential equations // Num. Math. 1983. Vol. 41. P. 373—398.
6. *Зельдович Я. Б., Баренблатт Г. И., Либрович Б. Б., Махвиладзе Г. М.* Математическая теория горения и взрыва. М.: Наука, 1980.
7. *Франк-Каменецкий Д. А.* Диффузия и теплопередача в химической кинетике. М.: Наука, 1987.
8. *Вестбрук Ч., Уртъев П.* Применение химической кинетики для определения критических параметров газовой детонации // ФГВ. 1983. Т. 19. Вып. 6. С. 65—76.
9. *Борисов А. А., Драгалова Е. В., Заманский В. М. и др.* Механизм и кинетика самовоспламенения метана // Химическая физика. 1982. № 4. С. 536—543.
10. *Варнатц Ю., Маас У., Диббл Р.* Горение. Физические и химические аспекты, моделирование, эксперименты, образование загрязняющих веществ. М.: Физматлит, 2006.
11. *Виллюнов В. Н., Рябинин В. К.* О моделировании колебательных режимов горения водорода и метана в проточном реакторе с перемешиванием // ФГВ. 1989. Т. 25. Вып. 1. С. 16—26.
12. *Бабушок В. И., Крахтинова Т. В., Бабкин В. С.* Структура предела цепочно-теплового самовоспламенения // Кинетика и катализ. 1984. Т. 25. Вып. 1. С. 5—12.
13. *Мержанов А. Г.* Твердопламенное горение. Черноголовка: ИСМАН, 2000.
14. *Мальцев В. М., Мальцев М. И., Кашпоров Л. Я.* Основные характеристики горения. М.: Химия, 1977.
15. *Иссерлин А. С.* Основы сжигания газового топлива. Л.: Недра, 1987.

Статья поступила в редакцию 15.03.12.