



3. *Дмитриев В.М., Шутенков А.В., Зайченко Т.Н., Ганджа Т.В.* MAPC – среда моделирования технических устройств и систем – Томск: В-Спектр, 2011.
4. *Ганджа Т.В.* Формализованное представление технически сложного объекта с компьютерной моделью в контуре управления // Приборы и системы. Управление. Контроль. Диагностика. – 2012. – № 2. – С. 29-35.
5. *Дмитриев В.М., Шутенков А.В., Ганджа Т.В.* Универсальное вычислительное ядро для реализации виртуальных лабораторий // Приборы и системы. Управление. Контроль. Диагностика. – 2004. – № 2. – С. 24-28.
6. MPI: A Message-Passing Interface Standard. Version 2.1. Message Passing Interface Forum. June 23, 2008. – 586 P. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.mpi-forum.org/docs/mpi21-report.pdf>, свободный.
7. *Дмитриев В.М., Ганджа Т.В., Коротина Т.Ю.* Редактор виртуальных инструментов и приборов. // Приборы и системы. Управление. Контроль. Диагностика. – 2009. – № 6. – С.19–24.

Статья представлена к публикации членом редколлегии А.А. Шелупановым.

E-mail:

Дмитриев Вячеслав Михайлович – ofo45@mail.ru;

Ганджа Тарас Викторович – gandgatv@gmail.com.

УДК 519.622

© 2012 г. **Е.А. Новиков**, д-р физ.-мат. наук
(Институт вычислительного моделирования ИВМ СО РАН, Красноярск),
Л.В. Кнауб, канд. физ.-мат. наук,
А.Е. Новиков
(Сибирский федеральный университет, Красноярск)

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОРЕГОНАТОРА ТРЕХСТАДИЙНЫМИ ЯВНЫМИ МЕТОДАМИ*

Описан алгоритм формирования дифференциальных уравнений химической кинетики. Численное моделирование модифицированного орегонатора проведено алгоритмом переменного порядка и шага на основе явных методов с расширенными областями устойчивости.

Ключевые слова: химическая кинетика, орегонатор, жесткая задача, контроль точности и устойчивости.

Введение

Моделирование кинетики химических реакций применяется при исследовании разнообразных химических процессов [1 – 4]. Предмет изучения – временные зависимости концентраций реагентов, которые являются решением дифференци-

* Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 11-01-00106).

альных уравнений химической кинетики [5, 6]. Трудности решения таких задач связаны с жесткостью и большой размерностью. Современные методы решения жестких задач используют декомпозицию матрицы Якоби системы уравнений с выбором главного элемента по строке или столбцу, а иногда и по всей матрице [7]. При большой размерности исходной задачи декомпозиция практически полностью определяет общие вычислительные затраты. При решении умеренно жестких задач большой размерности в ряде случаев можно применять явные методы [8]. Они не требуют обращения матрицы Якоби и поэтому могут быть эффективнее L -устойчивых методов. Однако для их эффективного использования необходимо контролировать не только точность вычислений, но и устойчивость численной схемы.

В настоящее время можно выделить два подхода к контролю устойчивости [8, 9]. Первый связан с оценкой максимального собственного числа матрицы Якоби f_y через ее норму с последующим контролем неравенства $h\|f_y\| \leq D$ [9], где постоянная D зависит от размера области устойчивости. Ясно, что для явных методов это приводит к дополнительному нахождению матрицы Якоби и, следовательно, к значительному увеличению вычислительных затрат. Второй подход основан на оценке максимального собственного числа λ_{\max} матрицы Якоби степенным методом через приращения правой части системы дифференциальных уравнений с последующим контролем неравенства $h|\lambda_{\max}| \leq D$ [8]. Такая оценка фактически не вызывает увеличения вычислительных затрат.

Здесь на основе явных методов типа Рунге-Кутты первого и третьего порядков точности построен алгоритм интегрирования переменного порядка и шага. Интервал устойчивости алгоритма расширен до 18. Приведены результаты численного моделирования орегонатора, дающего сложный предельный цикл.

Уравнения химической кинетики

Дифференциальные уравнения химической кинетики имеют достаточно простую структуру относительно концентраций реагентов. Кинетическая схема химической реакции состоит из элементарных стадий, записываемых в виде [10]:



где x_i , $1 \leq i \leq N_r$ – реагенты; k_j , $1 \leq j \leq N_s$ – константы скоростей стадий; N_r и N_s – соответственно число реагентов и число стадий в реакции; a_{ij} и b_{ij} , $1 \leq j \leq N_s$, $1 \leq i \leq N_r$, – стехиометрические коэффициенты. Процессу (1) в рамках сосредоточенной модели изотермического реактора постоянного объема соответствует система обыкновенных дифференциальных уравнений

$$C' = A^T V, \quad (2)$$

с заданным начальным условием $C(0) = C_0$. Здесь A^T – стехиометрическая матрица; C и V – соответственно вектор концентраций реагентов и скоростей стадий. В случае протекания реакции в неизотермических условиях к системе (2) добавляется уравнение теплового баланса

$$T' = [Q^T V - a(T - T_{01})] / C_V^T C, \quad (3)$$

где T – температура смеси в реакторе; T_{01} – температура стенок реактора; Q^T – вектор удельных теплот стадий; C_V^T – вектор теплоемкостей реагентов; $\alpha = \dot{a}s/r$, \dot{a} – коэффициент теплоотдачи; s и r – соответственно площадь поверхности и объем реактора. Теплоемкости реагентов и коэффициент теплоотдачи могут быть функциями концентраций реагентов, а α может еще зависеть и от температуры.

Если реакция протекает в изотермическом реакторе постоянного объема с обменом вещества (открытая система, реактор идеального смешения), система дифференциальных уравнений записывается в виде

$$C' = A^T V + (C_p - C) / \Theta, \quad (4)$$

где C_p – вектор концентраций реагентов на входе; θ – время пребывания смеси в реакторе; $\theta = r/u$, r – объем реактора; u – объемная скорость течения смеси через реактор. При протекании реакции в неизотермических условиях система (4) дополняется уравнением теплового баланса

$$T' = [Q^T V - a(T - T_{01})] / C_V^T C - (T - T_{02}) / \Theta, \quad (5)$$

где T_{02} – температура смеси на входе в реактор. Температура реагирующей смеси может задаваться в виде функции времени t и концентраций C соотношением вида $T = T(t, C)$.

Если стадия обратима, то скоростью стадии W_s принято считать разность скоростей прямого W_s^+ и обратного W_s^- процессов, т.е.:

$$W_s = W_s^+ - W_s^-, \quad 1 \leq s \leq N_s.$$

Если в стадии участвует третья частица, то скорость V_s вычисляется по формулам

$$V_s = p_s W_s, \quad p_s = \sum_{i=1}^{N_r + N_i} \varepsilon_{si} c_i, \quad 1 \leq s \leq N_s, \quad (6)$$

где ε_{si} , $1 \leq i \leq N_r$ – эффективности третьих частиц; N_i – число инертных веществ; ε_{si} и c_i , $N_r + 1 \leq i \leq N_r + N_i$ – соответственно эффективности и концентрации инертных веществ. Значения компонент вектора W_s определяются из схемы химической реакции (1) по соотношениям

$$W_s^+ = k_s \prod_{i=1}^{N_r + N_i} c_i^{a_{si}}, \quad W_s^- = k_{-s} \prod_{i=1}^{N_r + N_i} c_i^{b_{si}}, \quad (7)$$

где k_s и k_{-s} , $1 \leq s \leq N_s$ – константы скоростей прямой и обратной стадий соответственно. Они вычисляются по формулам

$$k_j = A_j T^{n_j} \exp(-E_j / [RT]),$$

где A_j , n_j и E_j/R – заданные постоянные. Константы скоростей в случае неизотермического реактора постоянными не являются – они зависят от температуры. Однако исторически сначала рассматривался изотермический реактор, и k_j , $1 \leq j \leq N_s$, в настоящее время по-прежнему называют константами.

Стехиометрическая матрица A^T с элементами a_{ij} формируется из кинетической схемы (1) по следующему правилу. Номер стадии совпадает с номером столбца, а номер реагента – с номером строки матрицы A^T . Если x_i выступает как исходный реагент, то $a_{ij} = -\alpha_{ij}$, если x_i – продукт, то $a_{ij} = \beta_{ij}$. Если x_i является одновременно исходным реагентом и продуктом, то $a_{ij} = -\alpha_{ij} + \beta_{ij}$. Обычно в элементарной стадии участвует небольшое количество реагентов, т.е. стехиометрическая матрица сильно разрежена. Кроме того, значительное количество элементов A^T

равны единице. Параметр α и теплоемкости реагентов C_v^T могут быть функциями температуры и концентраций реагентов.

Метод третьего порядка

Задачи (2), (3) и (4), (5) можно записать в виде

$$y' = f(y), \quad y(t_0) = y_0, \quad t_0 \leq t \leq t_k. \quad (8)$$

Для численного решения (8) рассмотрим явный метод типа Рунге-Кутты

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + p_1 b_1 + p_2 b_2 + p_3 b_3, \\ b_1 &= hf(y_n), \quad b_2 = hf(y_n + b_{21} b_1), \\ b_3 &= hf(y_n + b_{31} b_1 + b_{32} b_2), \end{aligned} \quad (9)$$

где h – шаг интегрирования; b_1 , b_2 и b_3 – стадии метода; p_1 , p_2 , p_3 , β_{21} , β_{31} и β_{32} – числовые коэффициенты, определяющие свойства точности и устойчивости (9). В случае неавтономной системы $y' = f(t, y)$ стадии схемы (9) имеют вид:

$$\begin{aligned} b_1 &= hf(t_n, y_n), \quad b_2 = hf(t_n + b_{21} h, y_n + b_{21} b_1), \\ b_3 &= hf(t_n + (b_{31} + b_{32}) h, y_n + b_{31} b_1 + b_{32} b_2). \end{aligned}$$

Для сокращения выкладок будем рассматривать задачу (8). Однако построенные ниже методы можно применять для решения неавтономных задач. Получим соотношения на коэффициенты метода (9) третьего порядка. Для этого разложим стадии b_1 , b_2 и b_3 в ряды Тейлора до членов с h^4 и подставим в первую формулу (8). В результате получим

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + (p_1 + p_2 + p_3) hf_n + [b_{21} p_2 + (b_{31} + b_{32}) p_3] h^2 f'_n f_n + h^3 [b_{21} b_{32} p_3 f_n'^2 f_n + \\ &+ 0.5(b_{21}^2 p_2 + (b_{31} + b_{32})^2 p_3) f_n'' f_n^2] + h^4 [0.5 b_{21}^2 b_{32} p_3 f_n' f_n'' f_n^2 + \\ &+ b_{21} (b_{31} + b_{32}) b_{32} p_3 f_n' f_n' f_n^2 + (b_{31} + b_{32})^3 p_3 f_n''' f_n^3 / 6] + O(h^5), \end{aligned}$$

где элементарные дифференциалы вычислены на приближенном решении y_n . Точное решение $y(t_{n+1})$ в окрестности точки t_n имеет вид

$$\begin{aligned} y(t_{n+1}) &= y(t_n) + hf + 0.5 h^2 f f' + h^3 [f'^2 f + f'' f^2] / 6 + \\ &+ h^4 [f'^3 f + f f' f'' + 3 f'' f f'^2 + f''' f^3] / 24 + O(h^4), \end{aligned}$$

где элементарные дифференциалы вычислены на точном решении $y(t_n)$. Сравнивая полученные ряды для точного и приближенного решений до членов с h^3 при условии $y_n = y(t_n)$, запишем условия третьего порядка схемы (9), т.е.:

$$\begin{aligned} p_1 + p_2 + p_3 &= 1, \quad b_{21} p_2 + (b_{31} + b_{32}) p_3 = 1/2, \\ b_{21}^2 p_2 + (b_{31} + b_{32})^2 p_3 &= 1/3, \quad b_{21} b_{32} p_3 = 1/6. \end{aligned} \quad (10)$$

С учетом представления $y(t_{n+1})$ и y_{n+1} локальная ошибка (9) приобретает вид

$$\begin{aligned} d_n &= y(t_{n+1}) - y_{n+1} = h^4 \{ f'^3 f / 24 + [1/24 - b_{21}^2 b_{32} p_3 / 2] f f' f''^2 + \\ &+ [1/8 - b_{21} (b_{31} + b_{32}) b_{32} p_3] f'' f f'^2 + \\ &+ [1/24 - b_{21}^3 p_2 / 6 - (b_{31} + b_{32})^3 p_3 / 6] f''' f^3 \} + O(h^5). \end{aligned} \quad (11)$$

В нелинейной системе (10) два свободных коэффициента. Минимизируем локальную ошибку (11). Учитывая вид (11), вместо (10) рассмотрим следующую

расширенную нелинейную систему

$$\begin{aligned} 1) p_1 + p_2 + p_3 = 1, 2) b_{21}p_2 + (b_{31} + b_{32})p_3 = 1/2, \\ 3) b_{21}^2 p_2 + (b_{31} + b_{32})^2 p_3 = 1/3, 4) b_{21}b_{32}p_3 = 1/6, \\ 5) b_{21}^2 b_{32}p_3 = 1/12, 6) b_{21}(b_{31} + b_{32})b_{32}p_3 = 1/8. \end{aligned} \quad (12)$$

При $1.5\beta_{21} = \beta_{31} + \beta_{32}$ два последних уравнения (12) совпадают. Из четвертого и пятого соотношений (12) имеем $\beta_{21} = 0.5$. Из второго и третьего равенств получим $p_2 = 1/3$ и $p_3 = 4/9$. Из первого уравнения (12) 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 (9) с минимальной локальной ошибкой имеют вид:

$$b_{21} = 1/2, b_{31} = 0, b_{32} = 3/4, p_1 = 2/9, p_2 = 1/3, p_3 = 4/9. \quad (13)$$

При данных коэффициентах локальная ошибка δ_n схемы (9) имеет вид $\delta_n = h^4 f^3 f' / 24 - h^4 f' f'' / 288 + O(h^5)$. Неравенство для контроля точности вычислений метода третьего порядка построим с использованием идеи вложенных методов. Для этого рассмотрим вспомогательную схему $y_{n+1,1} = y_n + r_1 b_1 + r_2 b_2$, где b_1 и b_2 определены в (9). Потребуем, чтобы данный метод имел второй порядок точности. Разложение приближенного решения $y_{n+1,1}$ в ряд Тейлора имеет вид $y_{n+1,1} = y_n + (r_1 + r_2)hf_n + \beta_{21}r_2 h^2 f'_n f_n + O(h^3)$. Сравнивая ряды для $y(t_{n+1})$ и $y_{n+1,1}$, видим, что требование второго порядка будет выполнено при $r_1 + r_2 = 1$ и $\beta_{21}r_2 = 0.5$. Отсюда получим $r_1 = 0$ и $r_2 = 1$. Оценка ошибки $\varepsilon_{n,3}$ метода третьего порядка имеет вид $\varepsilon_{n,3} = y_{n+1} - y_{n+1,1} = 2[b_1 - 3b_2 + 2b_3]/9$, а неравенство для контроля точности вид

$$2 \| b_1 - 3b_2 + 2b_3 \| / 9 \leq \varepsilon,$$

где $\|\cdot\|$ – некоторая норма в R^N ; ε – точность интегрирования.

Неравенство для контроля устойчивости численной формулы (9) построим предложенным в [8] способом. Запишем стадии b_1 , b_2 и b_3 на задаче $y' = Ay$, где A есть матрица с постоянными коэффициентами. В результате получим $b_1 = Xy_n$, $b_2 = (X + 0.5X^2)y_n$ и $b_3 = (X + 0.75X^2 + 0.375X^3)y_n$, где $X = hA$. Найдем коэффициенты d_1 , d_2 и d_3 из условия выполнения равенства $d_1 b_1 + d_2 b_2 + d_3 b_3 = X^3 y_n$. Это требование выполняется при $d_1 = 4/3$, $d_2 = -4$ и $d_3 = 8/3$. Нетрудно видеть также, что $2(b_1 - b_2) = X^2 y_n$. Тогда, согласно [8], оценку максимального собственного числа $v_{n,3} = h\lambda_{n,\max}$ матрицы Якоби системы (8) можно вычислить по формуле

$$v_{n,3} = b_{21} \max_{1 \leq i \leq N} (|d_1 b_1^i + d_2 b_2^i + d_3 b_3^i| / |b_2^i - b_1^i|). \quad (14)$$

Область устойчивости метода третьего порядка приведена на рис. 1, где слева изображены линии уровня 0.3, 0.5, 0.7 и 1, а справа – объемные изображения областей устойчивости. Интервал устойчивости численной схемы (9) приблизительно равен 2.5. Для ее контроля устойчивости можно применять неравенство $v_{n,3} \leq 2.5$. Оценка (14) 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 вносят нелинейность задачи (1). Поэтому контроль устойчивости используется как ограничитель на размер шага интегрирования. Прогнозируемый шаг h_{n+1} задается следующим образом. Новый шаг h^{ac} по точности определяется 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 $q_1^3 \|\varepsilon_{n,3}\| = \varepsilon$.

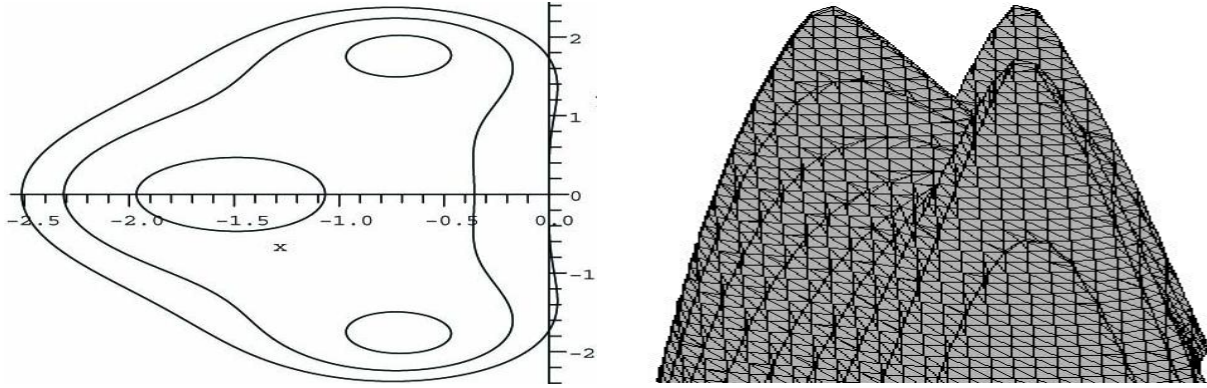


Рис. 1. Область устойчивости метода (16), (21).

Шаг h^{st} по устойчивости задается формулой $h^{st} = q_2 h_n$, где q_2 , учитывая равенство $v_{n,3} = O(h_n)$, определяется из уравнения $q_2 v_{n,3} = 2.5$. В результате h_{n+1} вычисляется по формуле

$$h_{n+1} = \max[h_n, \min(h^{ac}, h^{st})]. \quad (15)$$

Отметим, что формула (15) применяется для прогноза величины шага интегрирования h_{n+1} после успешного вычисления решения с предыдущим шагом h_n и фактически не приводит к увеличению вычислительных затрат.

Метод первого порядка

Для численного решения задачи (1) рассмотрим схему вида

$$y_{n+1} = y_n + r_1 b_1 + r_2 b_2 + r_3 b_3, \quad (16)$$

где стадии b_1 , b_2 и b_3 заданы в методе третьего порядка, а коэффициенты r_1 , r_2 и r_3 подлежат определению. Построим схему первого порядка с максимальным интервалом устойчивости. Для этого применим (16) для решения тестового уравнения $y' = \lambda y$. Получим $y_{n+1} = Q(x)y_n$, где функция устойчивости $Q(x)$ имеет вид

$$Q(x) = 1 + (r_1 + r_2 + r_3)x + [r_2 / 2 + 3r_3 / 4]x^2 + 3r_3 x^3 / 8, \quad x = h\lambda.$$

Требование первого порядка точности приводит к соотношению $r_1 + r_2 + r_3 = 1$, которое ниже будем считать выполненным. Выберем r_2 и r_3 так, чтобы метод (16) имел максимальный интервал устойчивости. Для этого рассмотрим многочлен Чебышева $T_3(z) = 4z^3 - 3z$ на промежутке $[-1, 1]$. Проведем замену переменных, полагая $z = 1 - 2x/\gamma$. Получим $T_3(z) = 1 - 18/\gamma + 48/\gamma^2 - 32/\gamma^3$, при этом отрезок $[\gamma, 0]$ отображается на отрезок $[-1, 1]$. Среди всех многочленов вида $P_3(x) = 1 + c_2 x^2 + c_3 x^3$ для $T_3(x)$ неравенство $|T_3(x)| \leq 1$ выполняется на максимальном интервале $[\gamma, 0]$, $\gamma = -18$ [8]. Потребуем совпадения $Q(x)$ и $T_3(x)$. Это приводит к соотношениям $r_1 + r_2 + r_3 = 1$, $r_2/2 + 3r_3/4 = 4/27$ и $3r_3/8 = 4/729$. В результате имеем коэффициенты

$$r_1 = 332/2187, \quad r_2 = 100/729, \quad r_3 = 32/2187 \quad (17)$$

метода первого порядка с максимальным интервалом устойчивости, локальная ошибка $\delta_{n,1}$ которого имеет вид $\delta_{n,1} = 19h^2 f' f / 54 + O(h^3)$. Метод первого порядка

предполагается использовать на участке установления, где ошибки невелики. Поэтому для контроля точности схемы (16), (17) будем использовать оценку локальной ошибки. Учитывая, что $b_2 - b_1 = h^2 f_n' f_n / 2 + O(h^3)$, и вид локальной ошибки, неравенство для контроля точности записывается:

$$19 \|b_2 - b_1\| / 27 \leq \varepsilon,$$

где $\|\cdot\|$ – норма в R^N ; ε – точность расчетов. Интервал устойчивости схемы (16), (17) равен 18 [8]. Поэтому для ее контроля устойчивости можно применять неравенство $v_{n,3} \leq 18$, где $v_{n,3}$ определяется по формуле (14).

В случае применения полинома Чебышева в качестве многочлена устойчивости область устойчивости "почти" многосвязная (рис. 2). Появление мнимых частей собственных чисел матрицы Якоби за счет ошибок округлений может приводить к ее сокращению.

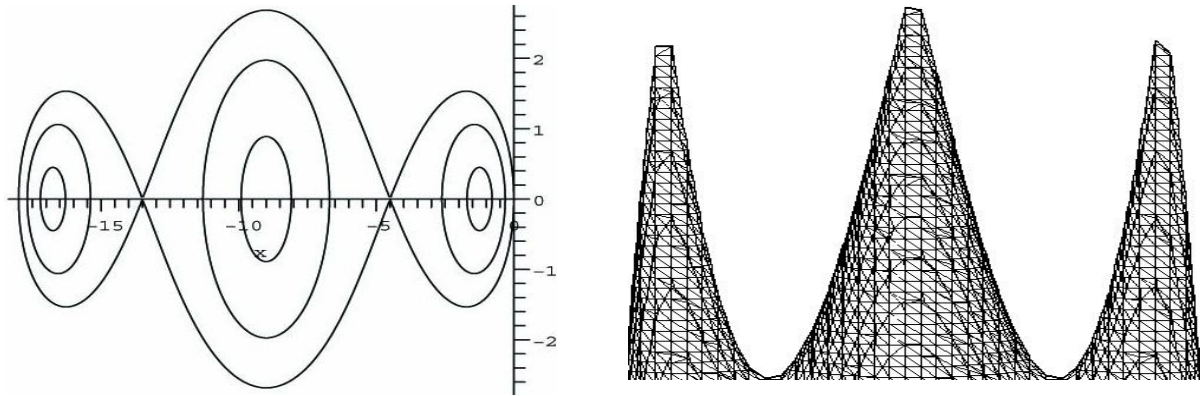


Рис. 2. Область устойчивости метода (16), (17).

Поэтому алгоритмом из [8] построим многочлен устойчивости $Q(x) = 1 + c_2 x^2 + c_3 x^3$, для которого в экстремальных точках $|Q(x)| = 0.9$. Получим $c_2 = 0.15625736489384$ и $c_3 = 0.0061526400319$, а коэффициенты r_i метода первого порядка определяются формулами $r_3 = c_3$, $r_2 = 2(c_2 - c_3)$ и $r_1 = 1 - 2c_3 + c_3$. В итоге имеем

$$\begin{aligned} r_1 &= 0.6936379102\ 4424, \quad r_2 = 0.3002094497\ 2383, \\ r_3 &= 0.0061526400\ 319238, \end{aligned} \tag{18}$$

причем длина интервала устойчивости (16), (18) примерно 17 (рис. 3, $\gamma = -16.93$).

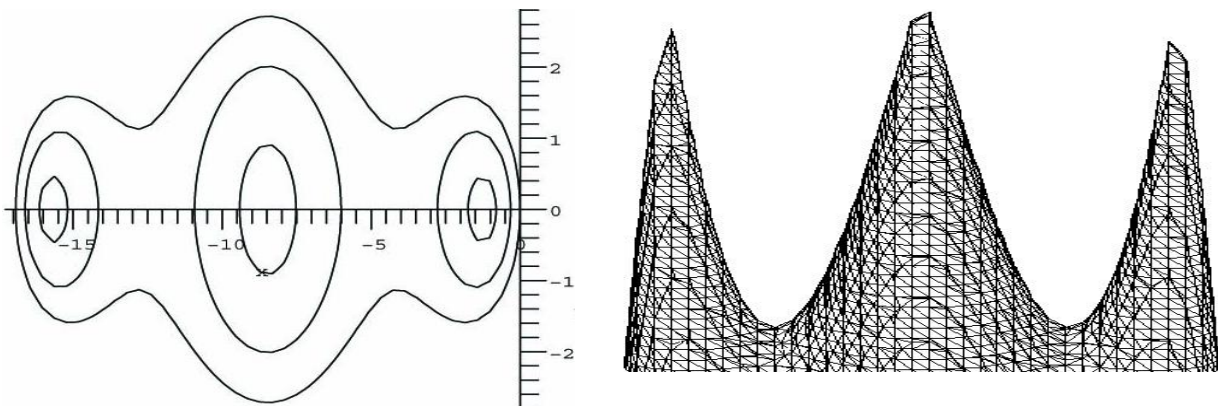


Рис. 3. Область устойчивости метода (16), (18).

Алгоритм интегрирования переменного порядка и шага

Расчеты всегда начинаются методом третьего порядка как более точным. Переход на схему первого порядка осуществляется при нарушении неравенства $v_{n,3} \leq 2.5$. Обратный переход на метод третьего порядка происходит в случае выполнения данного неравенства. При расчетах по методу первого порядка наряду с точностью контролируется устойчивость, а выбор прогнозируемого шага производится по аналогии с методом третьего порядка точности по формуле типа (15). В методе третьего порядка устойчивость не контролируется, а неравенство для контроля устойчивости используется для переключения на метод первого порядка. Норма $\|\mu\|$ в левой части неравенств для контроля точности вычисляется по формуле $\|\mu\| = \max_{1 \leq i \leq N} \{|\mu_i|/(|y_n^i| + r)\}$, где i – номер компоненты; r – параметр. Если по i -й компоненте решения выполняется неравенство $|y_n^i| \leq r$, то контролируется абсолютная ошибка $r \cdot \varepsilon$, в противном случае – относительная ошибка ε . Построенный алгоритм переменной структуры будем называть RK3_P.

Модифицированный орегонатор

Модель модифицированного орегонатора, дающего сложный предельный цикл, состоит из 6 стадий [11]:

1. $A + Y \quad X + P, k_1 = 0.084, k_{-1} = 10^4,$
2. $X + Y \quad 2P, k_2 = 4 \cdot 10^8, k_{-2} = 5 \cdot 10^{-5},$
3. $A + X \quad 2W, k_3 = 2 \cdot 10^3, k_{-3} = 2 \cdot 10^7,$
4. $C + W \quad X + Z, k_4 = 1.3 \cdot 10^5, k_{-4} = 2.4 \cdot 10^7,$
5. $2X \quad A + P, k_5 = 4 \cdot 10^4, k_{-5} = 4 \cdot 10^{-11},$ 6. $Z \rightarrow C + 0.462Y, k_6 = 0.65.$

В данной реакции участвуют 7 частиц, имеющих следующие обозначения: $A = BrO_3^-$; $C = M(n)$; $P = HOBr$; $W = BrO_2$; $X = HBrO_2$; $Y = Br^-$; $Z = M(n + 1)$. В этих обозначениях $M(n)$ – ион металла катализатора, а $M(n + 1)$ – окисленная форма этого иона. Обозначим концентрации реагентов в виде

$$c_1 = [BrO_3^-], c_2 = [Br^-], c_3 = [M(n)], c_4 = [HBrO_2],$$

$$c_5 = [HOBr], c_6 = [BrO_2], c_7 = [M(n + 1)].$$

Данная реакция протекает в изотермическом реакторе постоянного объема с обменом вещества. Соответствующая система дифференциальных уравнений состоит из 7 уравнений вида (4), т.е.:

$$\begin{aligned} c'_1 &= -v_1 - v_3 + v_5 + (c_{p1} - c_1) / \Theta, \\ c'_2 &= -v_1 - v_2 + 0.462v_6 + (c_{p2} - c_2) / \Theta, \\ c'_3 &= -v_4 + v_6 + (c_{p3} - c_3) / \Theta, \\ c'_4 &= v_1 - v_2 - v_3 + v_4 - 2v_5 + (c_{p4} - c_4) / \Theta, \\ c'_5 &= v_1 + 2v_2 + v_5 + (c_{p5} - c_5) / \Theta, \\ c'_6 &= 2v_3 - v_4 + (c_{p6} - c_6) / \Theta, \\ c'_7 &= v_4 - v_6 + (c_{p7} - c_7) / \Theta, \end{aligned} \tag{19}$$

где скорости v_1, \dots, v_6 стадий задаются формулами

$$v_1 = k_1 c_1 c_2 - k_{-1} c_4 c_5, v_2 = k_2 c_2 c_4 - k_{-2} c_5^2, v_3 = k_3 c_1 c_4 - k_{-3} c_6^2, \\ v_4 = k_4 c_3 c_6 - k_{-4} c_4 c_7, v_5 = k_5 c_4^2 - k_{-5} c_1 c_5, v_6 = k_6 c_7, \Theta = 125.5,$$

а концентрации реагентов на входе в реактор принимают значения

$$c_{p1} = 0.14, c_{p2} = 0.151 \cdot 10^{-5}, c_{p3} = 0.125 \cdot 10^{-3}, c_{p4} = c_{p5} = c_{p6} = c_{p7} = 0.$$

Интегрирование проводилось на промежутке $[0, 1000]$ с начальным шагом 10^{-5} при следующих начальных концентрациях реагентов:

$$c_1 = 0.1387, c_2 = 0.1534 \cdot 10^{-6}, c_3 = 0.1176 \cdot 10^{-3}, \\ c_4 = 0.3165 \cdot 10^{-7}, c_5 = 0.1956 \cdot 10^{-3}, c_6 = 0.5814 \cdot 10^{-6}, c_7 = 0.631 \cdot 10^{-5}.$$

Расчеты осуществлялись таким образом, чтобы в приближенном и точном решениях совпали по три значащие цифры. Под точным решением понимается решение, вычисленное с задаваемой точностью $\varepsilon = 10^{-9}$.

Сравнение эффективности проводилось по числу вычислений *if* правой части задачи (19).

Для алгоритма интегрирования RK3_P затраты *if* = 192 638. При расчетах классическим вариантом трехстадийного метода RK3 третьего порядка *if* = 966 638, а при вычислениях RK3 с контролем устойчивости – *if* = 650 342.

Заключение

Использование неравенства для контроля устойчивости фактически не приводит к увеличению вычислительных затрат, потому что оценка максимального собственного числа матрицы Якоби системы (8) 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 малости 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. После нарушения неравенства для контроля точности шаг уменьшается до максимально возможного. Этот эффект может повторяться многократно в зависимости от длины участка установления. В результате средний шаг интегрирования может превышать максимально допустимый.

ЛИТЕРАТУРА

1. Эммануэль Н.М., Кнорре Д.Г. Курс химической кинетики. – М.: Высшая школа. 1974.
2. Полак Л.С., Гольденберг М.Я., Левицкий А.А. Вычислительные методы в химической кинетике. – М.: Наука. 1984.



3. *Stabler R.W., Chesick J.P.* A program system for computer integration of multistep reaction rate equations using the heur integration methods // *J. of Chem. Kinetics.* – 1978. – Vol. 10, №5. – P.461–469.
4. *Carrer M.B., Boyd A.W.* A program packade using stiff sparse integration methods for automatic solution of mass action kinetics equations // *J. Chem. Kinetics.*– 1979.– Vol. 11.– P. 1097–1108.
5. *Babusok V.I., Novikov E.A.* Numerical solution of direct kinetic problems // *React. Kinet. Catal. Lett.* – 1982. – Vol. 21, №1–2. – P. 121–124.
6. *Бабушок В.И., Новиков Е.А.* Генератор правой части и матрицы Якоби дифференциальных уравнений химической кинетики // Препринт ВЦ СО АН СССР. – 1982. – №359.
7. *Хайпер Э., Ваннер Г.* Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи. – М.: Мир, 1999.
8. *Новиков Е.А.* Явные методы для жестких систем. – Новосибирск: Наука, 1997.
9. *Shampine L.M.* Implementation of Rosenbrock method // *ACM Transaction on Mathematical Software.* – 1982. – Vol.8, №5. – P. 93–113.
10. Новиков Е.А. Численное моделирование модифицированного орегонатора (2,1)-методом решения жестких задач // *Вычислительные методы и программирование.* – 2010. – Т.11, №2. – С. 123–130.
11. *Showalter K., Noyes R.M., Bar-Eli K.* A modified oregonator model, exhibiting complicated limit cycle behaviour in a flow system // *J. Chem. Phys.* – 1978. – Vol. 69. – P. 2514–2515.

Статья представлена к публикации членом редколлегии Е.А. Ереминым.

E-mail:

Новиков Евгений Александрович – novikov@icm.krasn.ru;

Кнауб Людмила Владимировна – lvknaub@yandex.ru;

Новиков Антон Евгеньевич – aenovikov@bk.ru.

УДК 004.75

© 2012 г. **Д.В. Христенко**, канд. техн. наук,
В.Г. Гришаков, канд. техн. наук,
И.В. Логинов, канд. техн. наук
(Академия Федеральной службы охраны РФ, Орел)

МНОГОУРОВНЕВАЯ СИСТЕМА АДМИНИСТРАТИВНОГО УПРАВЛЕНИЯ ИТ-ИНФРАСТРУКТУРОЙ ПРЕДПРИЯТИЯ

В работе рассмотрена многоуровневая система административного управления ИТ-инфраструктурой, выполняющая функции управления ее развитием в соответствии с потребностями предприятия. Представлена модель иерархии системы административного управления с ИТ-подразделением в качестве центрального звена.

Ключевые слова: административное управление, развитие ИТ-инфраструктуры, система административного управления, модель, ИТ-подразделение.