

ИССЛЕДОВАНИЕ ОБОБЩЕННОГО МЕТОДА НЬЮТОНА ДЛЯ РЕШЕНИЯ СИСТЕМЫ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ НА ПРИМЕРЕ ГОРЕНИЯ УГЛЕВОДОРОДОВ В КИСЛОРОДЕ

Р.К. Селезнев^{1,2}

¹ *Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН, Москва, 119526, проспект Вернадского 101-1*

² *Московский физико-технический институт (государственный университет) г. Долгопрудный Московская область, Институтский пер. 9*

Аннотация

В данной работе описан обобщенный метод Ньютона, позволяющий описывать кинетику горения углеводородов в кислороде. Исследованы различные алгоритмы выбора шага по времени. Приведено сравнение расчетных данных с результатами экспериментов.

INVESTIGATION OF THE GENERALIZED NEWTON METHOD FOR SOLVING DIFFERENTIAL EQUATIONS OF CHEMICAL KINETICS ON THE EXAMPLE OF HYDROCARBONS COMBUSTION IN OXYGEN

R.K. Seleznev^{1,2}

¹ *Institute for Problems in Mechanics after A. Yu. Ishlinskiy RAS, Russia, Moscow, 119526*

² *Moscow Institute of Physics and Technology (MIPT), Russia, Moscow Region, 141700*

The generalized Newton method for solving the equations of chemical kinetics is presented. We design suitable algorithms for choosing time steps for the stiff differential systems integration arising in chemical kinetics. A realistic methane-air combustion model illustrates the numerical efficiency of our approach.

1. ВВЕДЕНИЕ

Актуальной проблемой физико-химической газовой динамики является разработка компьютерных моделей ПВРД и ГПВРД [1]. Правильное описание газодинамических процессов в камерах ПВРД и ГПВРД представляет наибольший научный интерес в данной области. Известны работы, в которых описаны численные методы, позволяющие описывать поведение подобных газодинамических систем [2-16]. Численное моделирование реагирующего газового потока включает в себя выбор кинетической схемы, а так же решение выбранной системы уравнений химической кинетики. Существует большое количество кинетических схем [17-45], в зависимости от типа топлива и условий работы двигателя, однако в этой работе мы рассмотрим только некоторые из них. После выбора кинетической схемы необходим метод, который позволит решать систему уравнений химической кинетики. Существует большое число методов решения систем уравнений химической кинетики (УКХ). Самыми известными и часто используемыми являются методы Розенброка [47-51] и Гира [52-56]. В данной работе подробно исследуется итерационный неявный метод. Этот метод хорошо зарекомендовал себя при решении задач радиационной газовой динамики [57]. Особое внимание уделяется проблемам оптимального выбора шага по времени. Приведены примеры решений систем кинетических уравнений.

Данные исследования должны выявить слабые стороны рассматриваемого метода и определить дальнейшие пути его развития.

2. ОПИСАНИЕ МЕТОДА

2.1. Постановка задачи

Рассмотрим смесь газов, помещенную в некоторый объем при условиях (P и T_0). Со временем происходит преобразование одних веществ в другие. Рассмотрим изобарический процесс. Основной нашей задачей является определение равновесных концентраций продуктов реакций и равновесной температуры. Таблицы термодинамического центра ИВТАНТЕРМО [63] используются для определения теплоемкости смеси газов и определения количества выделенного тепла. Для того чтобы изучать этот механизм химических превращений нужно записать совокупность реакций, в результате которых исходные вещества превращаются в продукты реакций.

Пусть у нас имеется N компонентов смеси и M реакций, тогда в общем виде уравнение для n -й реакции можно представить в виде

$$\sum_{k=1}^{N_s} a_{kr} X_k \leftrightarrow \sum_{k=1}^{N_s} b_{kr} X_k, \quad j = 1, \dots, N_r \quad (1)$$

Кинетическое описание этой системы реакций следующее [64, 65]:

$$\frac{dX_k}{dt} = \sum_{r=1}^{N_r} \left[(b_{kr} - a_{kr}) \left(k_r^f \prod_{i=1}^{N_s} X_i^{a_{ir}} - k_r^r \prod_{i=1}^{N_s} X_i^{b_{ir}} \right) \right], \quad (2)$$

где a, b – стехиометрические коэффициенты; X_i – молярная объемная концентрация; k_f, k_n – константы

прямой и обратной реакции. Для установления связи между этими параметрами используется принцип детального равновесия. Константы скоростей прямых и обратных химических реакций, а так же константы равновесия химических реакций записываются в форме обобщенного Аррениуса. Константы равновесия можно определить из таблиц Гурвича [63], а также из данных JANAF [66]. В данной работе брались значения из таблиц Гурвича.

2.2. Описание численного метода

Запишем систему (2) в векторной форме:

$$\frac{d\vec{X}}{dt} = F(X_1, X_2, \dots, X_{N_s}) \quad (3)$$

где $\vec{X} = [X_1 \ X_2 \ X_3 \ \dots \ X_{N_s}]^T$.

Применим неявную схему:

$$\frac{\vec{X}^{p+1} - \vec{X}^p}{\tau} = \vec{F}(X_1^{p+1}, X_2^{p+1}, \dots, X_{N_s}^{p+1}) \quad (4)$$

$$\vec{X}^{p+1} = \vec{X}^p + \tau \cdot \vec{F}(X_1^{p+1}, X_2^{p+1}, \dots, X_{N_s}^{p+1}) \quad (5)$$

Воспользовавшись обобщенным методом Ньютона [67] получим

$$\vec{X}^{p+1,s+1} = \vec{X}^p + \tau \cdot \vec{F}^{p+1,s+1} \quad (6)$$

$$\vec{F}^{p+1,s+1} = \vec{F}^{p+1,s} + J^s (\vec{X}^{p+1,s+1} - \vec{X}^{p+1,s}) \quad (7)$$

Здесь индекс s – это параметр итераций, а J^s – матрица Якоби:

$$J^s = \begin{bmatrix} \left(\frac{\partial F_1}{\partial X_1}\right)^{p+1,s} & \dots & \left(\frac{\partial F_1}{\partial X_{N_s}}\right)^{p+1,s} \\ \dots & \dots & \dots \\ \left(\frac{\partial F_{N_s}}{\partial X_1}\right)^{p+1,s} & \dots & \left(\frac{\partial F_{N_s}}{\partial X_{N_s}}\right)^{p+1,s} \end{bmatrix} \quad (8)$$

Подставив (7) в (6), получим:

$$\vec{X}^{p+1,s+1} = \vec{X}^p + \tau \cdot \vec{F}^{p+1,s} + \tau \cdot J^s (\vec{X}^{p+1,s+1} - \vec{X}^{p+1,s}) \quad (9)$$

$$(E - \tau \cdot J^s) \vec{X}^{p+1,s+1} = \vec{X}^p + \tau \cdot (\vec{F}^{p+1,s} - J^s \cdot \vec{X}^{p+1,s}) \quad (10)$$

Введем обозначение $\vec{B} = \vec{X}^p + \tau \cdot (\vec{F}^{p+1,s} - J^s \vec{X}^{p+1,s})$, тогда получим:

$$\begin{bmatrix} B_1 \\ B_2 \\ \dots \\ B_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (1 - \tau \times J_{11}^s) & -\tau \times J_{12}^s & \dots & -\tau \times J_{1N_s}^s \\ -\tau \times J_{21}^s & (1 - \tau \times J_{22}^s) & \dots & -\tau \times J_{2N_s}^s \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ -\tau \times J_{N_s1}^s & -\tau \times J_{N_s2}^s & \dots & (1 - \tau \times J_{N_sN_s}^s) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X_1^{p+1,s+1} \\ X_2^{p+1,s+1} \\ \dots \\ X_{N_s}^{p+1,s+1} \end{bmatrix} \quad (11)$$

Введем обозначение $A\vec{X}^{p+1,s+1} = \vec{B}$, где

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & \dots & a_{1N_s} \\ \dots & \dots & \dots \\ a_{N_s1} & \dots & a_{N_sN_s} \end{bmatrix}, \quad a_{ij} = -\tau \cdot J_{ij}^s; \quad a_{ii} = 1 - \tau \cdot J_{ii}^s.$$

Используем метод Зейделя:

$$X_k^{m+1} = \frac{1}{a_{kk}} \left(B_k - \sum_{i=1}^{k-1} a_{ki} X_i^{m+1} - \sum_{i=k+1}^N a_{ki} X_i^m \right) \quad (12)$$

В данной работе мы используем метод нижней релаксации с $\omega=0.5$:

$$X_k^{m+1} = \frac{\omega}{a_{kk}} \left(B_k - \sum_{i=1}^{k-1} a_{ki} X_i^{m+1} - \sum_{i=k+1}^N a_{ki} X_i^m \right) + (1-\omega) X_k^m \quad (13)$$

2.3. Алгоритмы выбора временного шага

Основной трудностью при решении жестких систем является то, что для достаточно точного вычисления решения по быстрым переменным необходимо выбирать шаг интегрирования значительно меньшим, чем полное время протекания процесса, определяемое изменением медленных переменных. Поэтому используют различные алгоритмы выбора временного шага, позволяющие существенно ускорить работу алгоритма. Необходимо использовать наибольший шаг по времени, при котором решаемая система уравнений имеет сходящееся решение. Очевидно, необходимо использовать критерий положительной определенности. Таким образом, необходимо выбирать $\tau > 1/J_{ii}^s$. Однако, как показали численные эксперименты, при таком условии решение не сходится. Поэтому было принято решение использовать более сильное условие $\tau = 1/2|J_{ii}^s|$. Значение τ выбираем на каждом временном шаге. Данный алгоритм позволяет разрешить кинетическую схему горения метана в воздухе, состоящую из 63 уравнений и 23 компонентов. Расчеты проводятся до времени 1 секунда. Начальная температура $T_{in} = 1000$ К. Давление $P=1$ атм и остается постоянным на протяжении всего процесса. Время расчетов при таком выборе шага занимает час.

Далее для того чтобы уменьшить время расчетов, на каждом временном шаге мы находили максимальное значение

$$\zeta_k = \frac{|X_k^{m+1} - X_k^m|}{|X_k^{m+1}|}$$

больше $a = 5\%$, то шаг по времени уменьшается в два раза, если же оно меньше $b = 1\%$, то шаг увеличивается на 1.1. Этот алгоритм позволяет уменьшить время расчетов до 8 минут.

Если находить максимальное значение величины ζ_k но, вещества с малой концентрацией не учитываются при поиске максимума. Это позволяет увеличить скорость счета до 1 минуты.

В дальнейшем по умолчанию будем пользоваться последним алгоритмом. График зависимости временного шага от числа итераций предоставлен на рис. 1. График зависимости общего времени от числа итераций представен на рис. 2.

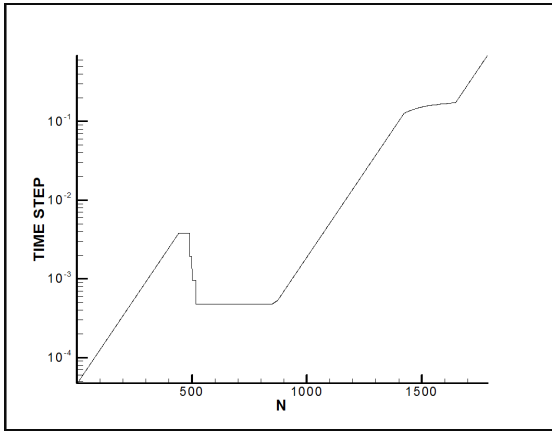


Рис. 1. Зависимость временного шага от числа итераций. TIME STEP – шаг итерации по времени, N – число итераций

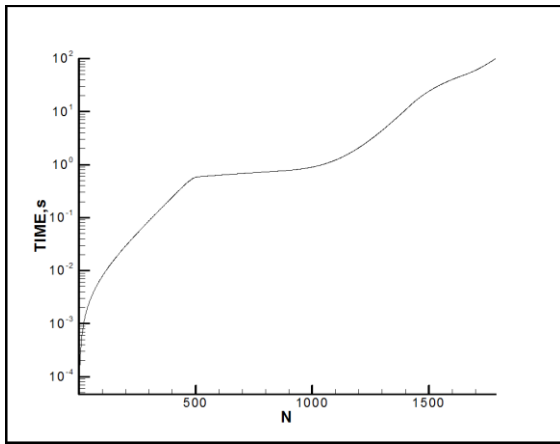


Рис. 2. Зависимость времени от числа итераций. TIME – время с начала процесса, N – число итераций

3. РЕЗУЛЬТАТЫ

В работе [68] приводятся экспериментальные данные, полученные на проточном реакторе полного смешения. При условии, что нет эффекта памяти химических возмущений в области смешения, экспериментальная область такого реактора может быть смоделирована как нульмерная система с изобарическими граничными условиями. Для описания горения углеводородов в кислороде мы используем кинетическую схему Скиннера [41], состоящую из 19 реакций и 9 компонент смеси. На рис. 3–8 приведены профили реакций и температурные профили реакций взаимодействия оксида углерода с кислородом при различных начальных давлениях и температурах. Концентрации рассчитываются в мольных долях. Линиями обозначены результаты расчетов, полученные в данной работе. Символами обозначены экспериментальные данные [68]. Следует заметить, что данные расчетов сдвинуты по оси времени, чтобы совпадать с экспериментальными данными в точке, когда концентрация водорода падает в два раза [39, 68]. Мы можем наблюдать хорошее соответствие полученных расчетов с экспериментальными значениями.

Начальные концентрации выбираются следующими: 0.98% CO/0.55% O₂/0.565% H₂O, 0.93% CO/1.05% O₂/0.58% H₂O и 0.92% CO/0.32% O₂/0.59% H₂O для экспериментов представленных на рис. 3, 4, рис. 5, 6 и рис. 7, 8 соответственно.

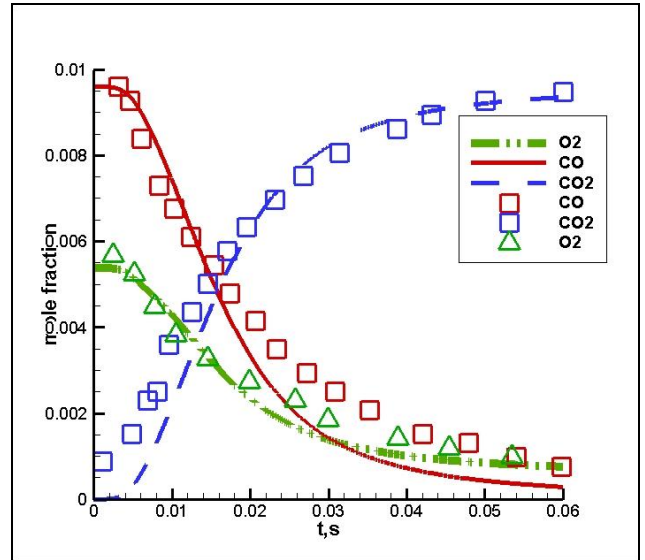


Рис. 3. Профиль CO/H₂O/O₂ реакции при 1.0 атм и начальной температуре T_{IN}=1032K

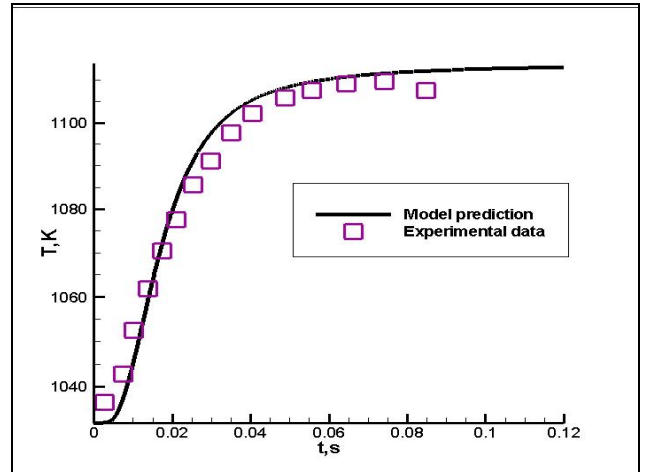


Рис. 4. Температурный профиль CO/H₂O/O₂ реакции при 1.0 атм и начальной температуре T_{IN} = 1032K

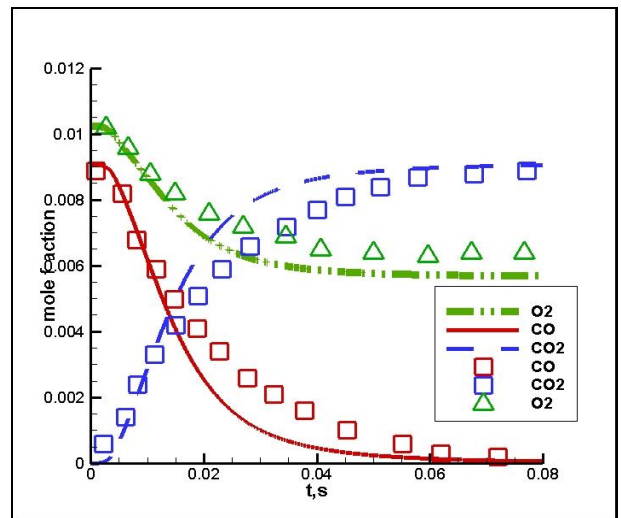


Рис. 5. Профиль CO/H₂O/O₂ реакции при 1.0 атм и начальной температуре T_{IN} = 1033 K

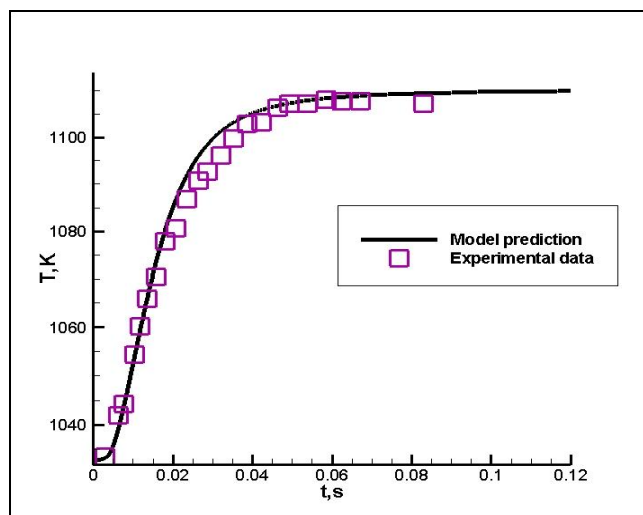


Рис. 6. Температурный профиль $\text{CO}/\text{H}_2\text{O}/\text{O}_2$ реакции при 1.0 атм и начальной температуре $T_{IN} = 1033$ К

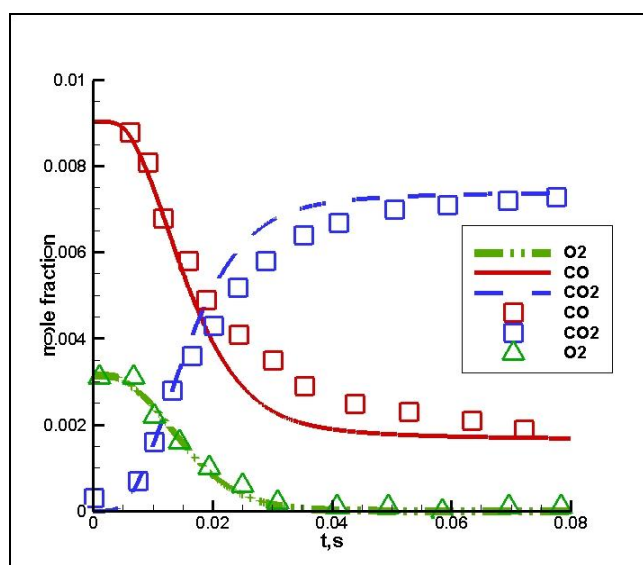


Рис. 7. Профиль $\text{CO}/\text{H}_2\text{O}/\text{O}_2$ реакции при 1.0 атм и начальной температуре $T_{IN} = 1034$ К

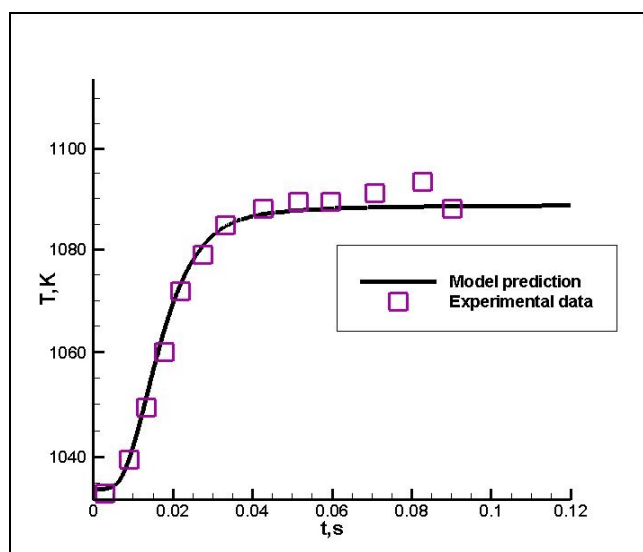


Рис. 8. Температурный профиль $\text{CO}/\text{H}_2\text{O}/\text{O}_2$ реакции при 1.0 атм и начальной температуре $T_{IN} = 1034$ К

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Данная работа отвечает направлению численного моделирования газодинамических энергетических установок, развиваемому в рамках научной программы лаборатории радиационной газовой динамики ИПМех РАН по созданию компьютерных (цифровых) моделей гиперзвуковых летательных аппаратов [69–88].

В данной работе на примере горения оксида углерода в кислороде было проведено исследование численного метода решения систем уравнений химической кинетики. Были предложены различные численные алгоритмы выбора шага по времени, которые позволяют существенно уменьшать время расчетов. Было хорошее соответствие полученных результатов с экспериментальными значениями.

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена в Лаборатории радиационной газовой динамики ИПМех РАН и на базовой кафедре МФТИ «Физическая и химическая механика» в рамках программы фундаментальных исследований Президиума РАН «Горение и взрыв». Автор хотел бы выразить благодарность своему научному руководителю С.Т. Суржикову за ценные советы и идею написания данной статьи.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Metev S.M. and Veiko V.P., *Laser Assisted Microtechnology*, 2nd ed., R. M. Osgood, Jr., Ed. Berlin, Germany: Springer-Verlag, 2005.
2. Bertin H.J., "Hypersonic Aerothermodynamics. Propulsion," *AIAA Education Series*. J.S.Przemieniecki Series Editor-in-Chief. 1994. 608 p.
3. Curran, E.T., "Scramjet Engines: The First Forty Years," *Journal of Propulsion and Power*, Vol. 17, No. 6, 2001, pp. 1138-1148.
4. Ingenito, A. and Bruno, C., "Physics and Regimes of Supersonic Combustion", *AIAA Journal*, Vol. 48, No. 13, pp. 515-525, 2010.
5. Ladeinde, F., "A Critical Review of Scramjet Combustion Simulation", *47th AIAA Aerospace Sciences Meeting, AIAA-2009-127*, 2009.
6. Mudford, N. R., Mulreany, P. J., McGuire, J. R., Odam, J., Boyce, R. R., and Paull, A., "CFD Calculations for Intake-Injection Shock-Induced-Combustion Scramjet Flight Experiments," *The 12th AIAA International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies*, AIAA Paper 2003-7034, Dec. 2003.
7. Nelson, H.F., "Radiative Heating in Scramjet combustor," *J. Thermophysics and Heat Transfer*, 1997, Vol. 11, No.1.
8. Crow A., Boyd I., Terrapon V., "Radiation Modeling of a Hydrogen-Fueled Scramjet," *AIAA 2011-3769*, 2011. 15 p.
9. Norris, J. W. and Edwards, J. R., "Large-Eddy Simulation of High-Speed, Turbulent Diffusion Flames with Detailed Chemistry", *35th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, AIAA-1997-370*, 1997.
10. Peterson, D.M., Candler, G.V. and Drayna, T.W., "Detached Eddy Simulation of a Generic Scramjet Inlet and Combustor", *47th AIAA Aerospace Sciences Meeting, AIAA-2009-130*, 2009.
11. Rodriguez, C. G. and Cutler, A. D., "Computational Simulation of a Supersonic-Combustion Benchmark Experiment", *41st AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference & Exhibit, AIAA-2005-4424*, 2005.
12. Rubins, P.M., and Bauer, R.C., "Review of Shock-Induced Supersonic Combustion Research and Hypersonic Applica-

- tions," *Journal of Propulsion and Power*, Vol. 10, No.5, 1994, Pp. 593–601.
13. Star, J.B., Edwards, J.R., Smart, M.K., and Baurle, R.A., "Numerical Simulation of Scramjet Combustion in a Shock Tunnel," *The 43rd Aerospace Science Meeting and Exhibit*, AIAA Paper 2005-0428, 2005.
 14. Turner, J.C. and Smart, M.K., "Application of Inlet Injection to a Three-Dimensional Scramjet at Mach 8," *AIAA Journal*, Vol. 48, No. 4, 2010, pp. 829–838.
 15. Wilson, G.J. and MacCormack, R.W., "Modeling Supersonic Combustion Using a Fully Implicit Numerical Method," *AIAA Journal*, Vol. 30, No. 4, Pp. 1008–1015, 1992.
 16. Bilger R.W., Stamer S.H., "On Reduced Mechanisms for Methane - Air Combustion in Nonpremixed Flames," *Combustion and Flame*. 1990. Vol.80. Pp.135–149.
 17. Billig, F.S., "Research on Supersonic Combustion," *Journal of Propulsion and Power*, Vol. 9, No. 4, 1993, pp. 499-514.
 18. Brindle, A., Boyce, R. R., and Neely, A. J., "CFD Analysis of an Ethylene-Fueled Intake-Injection Shock-Induced-Combustion Scramjet Configuration," *AIAA/CIRA 13th International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies*, AIAA Paper 2005-3239, 2005.
 19. Coffee T.P., "Kinetic Mechanisms for Premixed, Laminar, Steady State Methane/Air Flames," *Combustion and Flame*. 1984. Vol.55. Pp.161–170.
 20. Coffee T.P., Kotlar A.J., Miller M.S., "The Overall Reaction Concept in Premixed, Laminar, Steady-State Flames. I. Stoichiometries," *Combustion and Flame*. 1983. Vol.54. pp.155-169.
 21. Coffee T.P., Kotlar A.J., Miller M.S., "The Overall Reaction Concept in Premixed, Laminar, Steady-State Flames. II. Initial Temperatures and Pressures," *Combustion and Flame*. 1984. Vol.58. Pp.59–67.
 22. Curran, E. T., Heiser, W. H., and Pratt, D. T., "Fluid Phenomena in Scramjet Combustion Systems," *Annual Review of Fluid Mechanics*, Vol. 28, Jan. 1996, Pp. 323–360.
 23. Dagaut P., Bakali A.E., Ristori A., "The combustion of kerosene: Experimental results and kinetic modelling using 1- to 3-component surrogate model fuels," *Fuel*. 2006. Vol. 85. Pp. 944–956.
 24. Dagaut P., Cathonnet M., "The ignition, oxidation, and combustion of kerosene: A review of experimental and kinetic modeling," *Progress in Energy and Combustion Science*. 2006. Vol. 32. Pp. 48-92.
 25. Dryer F.L., Glassman I., "High-Temperature Oxidation of CO and CH₄," *14th Symp. on Comb.* 1972. pp.987-1003.
 26. Evans, J. S.; Schexnayder, C. J., Jr., "Influence of chemical kinetics and Unmixedness on burning in supersonic hydrogen flames," *AIAA J*, vol. 18, No 2, Pp. 188–193.
 27. Gardner, A.D., Paull, A., and McIntyre, T.J., "Upstream Porthole Injection in a 2D Scramjet Model," *Shock Waves*, Vol. 11, No. 5, 2002, Pp. 369–375.
 28. Gerlinger, P., Nold, K. and Aigner, M., "Influence of reaction mechanisms, grid spacing, and inflow conditions on the numerical simulation of lifted supersonic flames," *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, Vol. 62, No. 12, pp. 1357-1380, 2010.
 29. G. J. Wilson and R. W. MacCormack, "Modeling Supersonic Combustion Using a Fully Implicit Numerical Method," *AIAA Journal*, vol. 30, no. 4, pp. 1008–1015, 1992.
 30. Jachimowski, C. J., "An Analytical Study of the Hydrogen-Air Reaction Mechanism With Application to Scramjet Combustion," *NASA Technical Paper 2791*, 1988
 31. Maniscalco F., D'Anna A., Di Martino P., Cinque G., Colantuoni S., "Validation of Soot Formation and Oxidation models for a Kerosene Flame," *31st Meeting on Combustion*. Italian Section of the Combustion Institute.
 32. Marinov, N.M., Westbrook, C.K. and Pitz, W.J., "Detailed and global chemical kinetics model for hydrogen," *Proceedings of the Eighth International Symposium on Transport Phenomena in Combustion*, edited by S. H. Chan, Taylor & Francis: London, 118-129, 1995.
 33. O'Conaire, M., Curran, H. J., Simmie, J. M., Pitz, R. W. and Westbrook, C. G., "A comprehensive modeling study of hydrogen oxidation," *International Journal of Chemical Kinetics*, Vol. 11, Pp. 602–622, 2004.
 34. Odam, J. and Paull, A., "Radical Farming in Scramjets," *New Res. in Num. and Exp. Fluid Mech.*, VI, NNFM 96, 2007, pp.276–283.
 35. Singh, D. J. and Jachimowski, C. J., "Quasi-global Reaction Model for Ethylene Combustion," *AIAA Journal*, Vol. 32, No.1, 1994, Pp. 213–216.
 36. Tsatsaronis G., "Prediction of Propagating Laminar Flames in Methane, Oxygen, Nitrogen Mixtures," *Combustion and Flame*. 1978. Vol.33. Pp.217–239.
 37. Varatharajan B., Petrova M., Williams F.A., Tangirala V., "Two-step chemical-kinetic descriptions for hydrocarbon-oxygen-diluent ignition and detonation applications," *Proceedings of the Combustion Institute*. 2005. V.30. pp. 1869–1877.
 38. Won, S.-H., Jeung, I.-S., Parent, B. and Choi, J.-Y., "Numerical Investigation of Transverse Hydrogen Jet into Supersonic Crossflow Using Detached-Eddy Simulation," *AIAA Journal*, Vol. 48, No. 6, pp. 1047-1058, 2010.
 39. Mueller, M. A., Kim, T. J., Yetter, R. A. and Dryer, F. L. (1999), Flow reactor studies and kinetic modeling of the H₂/O₂ reaction. *International Journal of Chemical Kinetics* Volume 31, Issue 2, pages 113–125, 1999).
 40. Michael Frenklach, Hai Wang, Martin J. Rabinowitz. Optimization and analysis of large chemical kinetic mechanisms using the solution mapping method—combustion of methane. *Progress in Energy and Combustion Science*. Volume 18, Issue 1, 1992, P.p. 47–73.
 41. Skinner G.B. Kinetics of Methane Oxidation. *THE Journal of chemical physics* V. 56, N. 8 IS April 1972.
 42. Gokcen, T., N₂-CH₄-Ar Chemical Kinetic Model for Simulations of Atmospheric Entry to Titan, AIAA Paper 2004-2469, June–July. 2004.
 43. Park C., Jaffe R.L., Partridge H. Chemical-Kinetic Parameters of Hyperbolic Earth Entry// *J. of Thermophysics and Heat Transfer*. 2001. Vol.15.No.1. Pp. 76–90.
 44. Soetrismo M., Imlay S.T., Roberts D.W. Numerical Simulations of the Transdetonative Ram Accelerator Combusting Flow Field on a Parallel Computer AIAA-9293249.
 45. Baurle R.A., Eklund, D.R., "Analysis of Dual-Mode Hydrocarbon Scramjet Operation at Mach 4-6.5," *Journal of Propulsion and Power*, 2002, Vol.18, No.5. pp.990-1002
 46. H.H. Rosenbrock *Comput. J.*, 5 (1963), p. 329.
 47. E. Hairer, G. Wanner Solving Ordinary Differential Equations II, Stiff and Differential–Algebraic Equations Springer-Verlag, Berlin (1996).
 48. Cash J.R. A semi-implicit Runge–Kutta formula for the integration of stiff systems of ordinary differential equations *Chem. Eng. J.*, 20 (1980), Pp. 219–224.
 49. Verwer J.G., Spee E.J., Blom J.G., Hundsdorfer W. A second-order Rosenbrock method applied to photochemical dispersion problems/SIAM. *J. Sci. Comput.*, 20 (1999), Pp. 1456–1480.
 50. Voss D.A., Khaliq A.Q.M. Parallel Rosenbrock methods for chemical systems Department of Mathematics, Western Illinois University, 1 University Circle, Macomb, IL 61455-1390, USA.
 51. Gear C.W., The automatic integration of ordinary differential equations. *Communications of the ACM*, 14, 3 (March 1971), Pp. 176–179.
 52. Gear C.W., Numerical initial value problems in ordinary differential equations, Prentice - Hall, Englewood Cliffs, N.J., 1971.

53. Gear C.W., The automatic integration of stiff ordinary differential equations. Information Processing 68, A.J.H.
54. Gear C. W., Information Processing 68, v. 1, Amst., 1969, Pp. 187–193.
55. Gear C.W. The simultaneous numerical solution of differential-algebraic equations // IEEE Trans. Circuit Theory. CT.-18. 1971. Pp.89–95.
56. Суржиков С.Т. Актуальные проблемы механики. Физико-химическая механика жидкостей и газов. М.: Наука. 2010. 350 с.
57. Полак Л.С., Гольденберг М.Я., Левицкий А.А. Вычислительные методы в химической кинетике, М.: Наука, 1984. – 280 с.
58. Хартман Ф. Обыкновенные дифференциальные уравнения. М.: Мир, 1970, 720 с
59. Ракитский Ю.В., Устинов С.М., Черноуцкий И.Г. Численные методы решения жестких систем. — М.: Наука, 1979. — 208 с.
60. Ватолин Н.А., Моисеев Г.К., Трусов Б.Г. Термодинамическое моделирование в высокотемпературных неорганических системах PDF.M.: Металлургия, 1994. - 352 с.
61. Воеводин В. В., Кузнецов Ю. А. Матрицы и вычисления М.: Наука, 1984, 320 с.
62. Коновалов А.Н. Введение в вычислительные методы линейной алгебры Новосибирск, Наука, 1993. 158 с.
63. Гурвич Л.В., Вейц И.В., Медведев В.А. и др. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. - М.: Наука. 1978.
64. Эйринг Г., Лин С.Г., Лин С.М. Основы химической кинетики. - М.: Мир. 1983. 527 с.
65. Эммануэль Н.М., Кнорре Д.Г. Курс химической кинетики. - М.: Высшая школа, 1974.
66. JANAF Thermochemical Tables, PB 168370, Clearinghouse for Federal Scientific and Technical Information, Springfield, Virginia, 1965.
67. Беллман Р., Калаба Р., Квазилинеаризация и нелинейные краевые задачи, пер. с англ., М., 1968.
68. Yetter, R. A.; Dryer, F. L.; Rabitz, H. Combust Sci andTech 1991, 79, 97–128.
69. Железнякова А.Л., Суржиков С.Т. Расчет дозвукового обтекания локальной области тепловыделения // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2008. Т.7. <http://www.chemphys.edu.ru/pdf/2008-09-01-034.pdf>
70. Железнякова А.Л., Суржиков С.Т. Численное моделирование гиперзвукового обтекания цилиндра // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2008. Т.7. <http://www.chemphys.edu.ru/pdf/2008-09-01-035.pdf>
71. Железнякова А.Л., Суржиков С.Т. Поле течения около космического аппарата Fire II под углом атаки. // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2010. Т.9. <http://www.chemphys.edu.ru/pdf/2010-01-12-020.pdf>
72. Железнякова А.Л., Суржиков С.Т. Численное моделирование гиперзвукового обтекания модели летательного аппарата X-43 // Физико-химическая кинетика в газовой динамике, 2011. Т.11. <http://www.chemphys.edu.ru/pdf/2011-02-01-030.pdf>
73. Железнякова А.Л., Суржиков С.Т. Построение двумерных неструктурированных сеток методом молекулярной динамики // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2011. Т.11. <http://www.chemphys.edu.ru/pdf/2011-02-01-031.pdf>
74. Железнякова А.Л. Метод расщепления по физическим процессам для решения задач гиперзвуковой аэродинамики на неструктурированных сетках // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2013. Т.15. <http://www.chemphys.edu.ru/pdf/2013-04-29-010.pdf>
75. Иванов И.Э., Крюков И.А., Тимохин М.Ю. Численное моделирование ударно-волновых течений с помощью моментных уравнений // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2011. Т.11. <http://www.chemphys.edu.ru/pdf/2011-02-01-010.pdf>
76. Глушко Г.С., Иванов И.Э., Крюков И.А. Моделирование турбулентности в сверхзвуковых струйных течениях // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2010. Т.9. <http://www.chemphys.edu.ru/pdf/2010-01-12-023.pdf>
77. Глушко Г.С., Иванов И.Э., Крюков И.А. Численное моделирование отрывных течений в соплах // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2010. Т.9. <http://www.chemphys.edu.ru/pdf/2010-01-12-024.pdf>
78. Ермаков М.К. Исследование возможностей матричных методов для решения уравнений Навье–Стокса // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2010. Т.9. <http://www.chemphys.edu.ru/pdf/2010-01-12-031.pdf>
79. Котов М.А., Кузенов В.В. Создание сложных поверхностей гиперзвуковых летательных аппаратов системами САПР // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2010. Т.9. <http://www.chemphys.edu.ru/pdf/2010-01-12-039.pdf>
80. Суржиков С.Т. Перспективы многоуровневого подхода к задачам компьютерной аэрофизики // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2008. Т.7. <http://www.chemphys.edu.ru/pdf/2008-09-01-002.pdf>
81. Суржиков С.Т. Методы Монте-Карло в задачах расчета направленной излучательной способности струи продуктов сгорания // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2008. Т.7. <http://www.chemphys.edu.ru/pdf/2008-09-01-008.pdf>
82. Дикалюк А.С., Суржиков С.Т. Применение прогонки четвертого порядка точности для решения двумерного уравнения Пуассона // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2008. Т.7. <http://www.chemphys.edu.ru/pdf/2008-09-01-036.pdf>
83. Суржиков С.Т. Расчет обтекания модели космического аппарата MSRO с использованием кодов NERAT-2D и NERAT-3D // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2010. Т.9. <http://www.chemphys.edu.ru/pdf/2010-01-12-003.pdf>
84. Дикалюк А.С., Суржиков С.Т. Сравнение прогонки четвертого и второго порядков точности на примере задачи, имеющей аналитическое решение // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2010. Т.9. <http://www.chemphys.edu.ru/pdf/2010-01-12-037.pdf>
85. Французов М.С., Кузенов В.В. Модификация метода коррекции потоков для задач газовой динамики // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2008. Т.7. <http://www.chemphys.edu.ru/pdf/2008-09-01-041.pdf>
86. Моисеев К.В., Кузенов В.В. Численный анализ одномерной задачи Стефана при лазерном воздействии на металлические преграды // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2008. Т.7. <http://www.chemphys.edu.ru/pdf/2008-09-01-042.pdf>
87. Кузенов В.В., Филипский М.В. Численное моделирование отдельных теплофизических параметров лазерной плазмы // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2010. Т.9. <http://www.chemphys.edu.ru/pdf/2010-01-12-021.pdf>
88. Кузенов В.В. Использование регулярных адаптивных сеток для анализа импульсных сверхзвуковых струй плазмы // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2008. Т.7. <http://www.chemphys.edu.ru/pdf/2008-09-01-016.pdf>