

0.1. Янбекова К.Д. Разработка системы моделирования и расчета задач химической кинетики

Проблема разработки быстрых алгоритмов решения задач химической кинетики является актуальной поскольку подобные задачи особенно часто возникают в таких отраслях, как нефтехимия, медицина. В известных в мировой практике программных комплексах часть применяемых алгоритмов не способны в разумные сроки производить расчеты задач высокой жесткости. В [1] показано, что явные методы интегрирования по своей природе требуют меньших вычислительных затрат по сравнению с неявными методами, которые используются в большинстве современных программных комплексов. Важной задачей является не просто построение методов, но и разработка алгоритма выбора наиболее эффективного метода для решения конкретной задачи, информация о которой неизвестна заранее. Ожидается, что с применением кроссплатформенной IDE Qt и библиотек повышенной точности произойдет увеличение скорости вычислений на 15-30% (как за счет контроля устойчивости, так и за счет представления чисел в мантиссой большей длины) [2].

В рамках программного комплекса реализованы алгоритмы переменного шага и порядка, обеспечено выполнение численного эксперимента с отображением результатов в реальном времени (статистика работы алгоритма, в том числе количество шагов, возвратов, вычислений правой части дифференциальной задачи). В перспективе планируется разработка адаптивного алгоритма, подстраивающегося под задачу и позволяющего выбирать наиболее эффективный метод на различных интервалах.

Участие в XXII Всероссийской конференции молодых ученых по математическому моделированию и информационным технологиям обеспечено при поддержке Красноярского краевого фонда науки.

Научный руководитель — Рыбков М. В.

Список литературы

- [1] Новиков Е. А. Явные методы для жестких систем: монография / Новосибирск: Наука, 1997. — 195 с.
- [2] Rybkov M. V., Khorov D. V., Knaub L. V. First-Order Methods With Extended Stability Regions for Solving Electric Circuit Problems, J. Sib. Fed. Univ. Math. Phys., 2020, 13(2), 242-252. DOI: 10.17516/1997-1397-2020-13-2-242-252