

**ПРОГРАММА РАСЧЕТОВ НА ЭЛЕКТРОННОЙ ЦИФРОВОЙ
ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАШИНЕ «ПРОМИНЬ» РАВНОВЕСНЫХ
ВЫХОДОВ ПРОДУКТОВ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ**

И. Г. ВИНТИЗЕНКО, В. М. РЕЙДЕР

(Представлена научным семинаром вычислительной лаборатории ТПИ)

Имеются различные методы поиска корней линейных и нелинейных алгебраических уравнений. Сюда относятся метод хорд, метод Ньютона, итерационные методы и т. д. Однако все они, за исключением простого итерационного метода, достаточно сложны и не могут применяться на ЭЦВМ типа «ПРОМИНЬ» с малой памятью и малым числом операций.

Наиболее известными и часто применяемыми методами являются итерационные, простые как по содержанию, так и по реализации их на электронных цифровых вычислительных машинах.

Пусть имеется уравнение $F(x) = 0$, где $F(x)$ — вещественная функция. Могут иметь место два случая: уравнение $F(x) = 0$ можно непосредственно представить в виде

$$x = f(x), \quad (1)$$

итерационная формула будет иметь вид

$$x_{n+1} = f(x_n); \quad (2)$$

уравнение $F(x) = 0$ нельзя записать в виде (1), если не считать возможности просто прибавить x к обеим частям уравнения. итерационная формула имеет вид

$$x_{n+1} = x_n + AF(x_n), \quad (3)$$

где A — соответствующим образом выбранная постоянная, отличная от нуля.

Однако итерационные процедуры могут не приводить к решениям (расходиться). Если α — корень уравнения и рассматривается соотношение (2), то возможны следующие случаи:

а) значения x_i осциллируют и сходятся, это происходит, когда

$$-1 < f'(\alpha) < 0;$$

б) значения x_i осциллируют и расходятся, это происходит, когда

$$f'(\alpha) \leq -1;$$

в) значений x_i монотонно сходятся, это происходит, когда

$$0 < f'(\alpha) < 1;$$

г) значения x_i монотонно расходятся, это происходит, когда

$$f'(\alpha) \geq 0 \quad |1|.$$

Для обеспечения сходимости итерационного процесса во всех четырех указанных выше случаях были предложены различные методы. Рассмотрим один из них, наиболее просто, на наш взгляд, реализуемый на малых ЭЦВМ—метод Вегстейна.

Суть метода заключается в том, что после первого шага, когда уже использована формула (2) или (3) в виде $x_{n+1} = f(\bar{x}_n)$, применяется формула (4) для нахождения уточненного значения

$$\bar{x}_{n+1} = x_{n+1} - \frac{(x_{n+1} - x_n)(x_{n+1} - \bar{x}_n)}{(x_{n+1} - x_n - \bar{x}_n - \bar{x}_{n-1})} \quad (4)$$

Затем вычисляется величина $(\bar{x}_n - \bar{x}_{n+1}) \cdot (\bar{x}_{n-1})$, и если она становится меньше наперед заданной малой величины ϵ , то процесс заканчивается, и корень уравнения принимается равным $\bar{x}_{n+1}$, в противном случае операция повторяется.

При использовании ЭЦВМ „ПРОМИНЬ“ с относительно низкой точностью удобнее просто находить величину $(\bar{x}_n - \bar{x}_{n+1})$ и сравнивать ее с нулем. В [1] дается наглядная геометрическая интерпретация процесса.

Для проверки метода была составлена программа нахождения корня алгебраического уравнения

$$F(x) = x^3 - x - 1, \quad (5)$$

для которого при использовании простой итерационной процедуры

$$x_{n+1} = x_n^3 - 1$$

значения x_n расходятся.

Программа (приложение 1) содержит 28 команд, из них 4 команды выделяются для решения уравнения (5) и 24 — для уточнения значения корня по формуле (4). Результаты решения уравнения на ЭЦВМ методом Вегстейна и методом обычной итерации сведены в табл. 1. Метод Вегстейна обеспечил быструю сходимость итерационного процесса.

Этот метод был применен для решения системы алгебраических нелинейных уравнений, описывающих термодинамическое равновесие концентраций химических компонентов в реакции. Исходная система уравнений имеет вид:

$$W_1 + W_2 + W_3 + W_4 + W_5 + W_6 = 1; \quad (6)$$

$$(2a + b)W_4 = 2W_1 + W_2 + 6W_3; \quad (7)$$

$$\frac{2a + b}{c} W_6 = 2W_1 + W_2 + 6W_3, \quad (8)$$

$$\frac{2a + b}{b} (W_2 + 2W_5) = 2W_1 + W_2 + 6W_3; \quad (9)$$

$$W_3 \cdot W_5^2 Kp_1 = W_2; \quad (10)$$

$$W_1^2 Kp_2 = W_3 \cdot W_4, \quad (11)$$

где a, b, c — константы, Kp_1 и Kp_2 — константы равновесия, W_j — концентрации (парциальные давления в частном случае) взаимодействующих компонент.

Расчеты по формулам (6) — (11) и уточнение значения каждого корня W_j по формулам (4) просты, при составлении программы ос-

Таблица 1

0	2,3333	1,3
1	0,734	1,197
2	0,9338	0,715
3	1,9552	-0,634
4	1,1366	-1,255
5	1,2421	-2,977
6	1,3425	-26,409
7	1,3233	
8	1,3247	
9	1,3247	

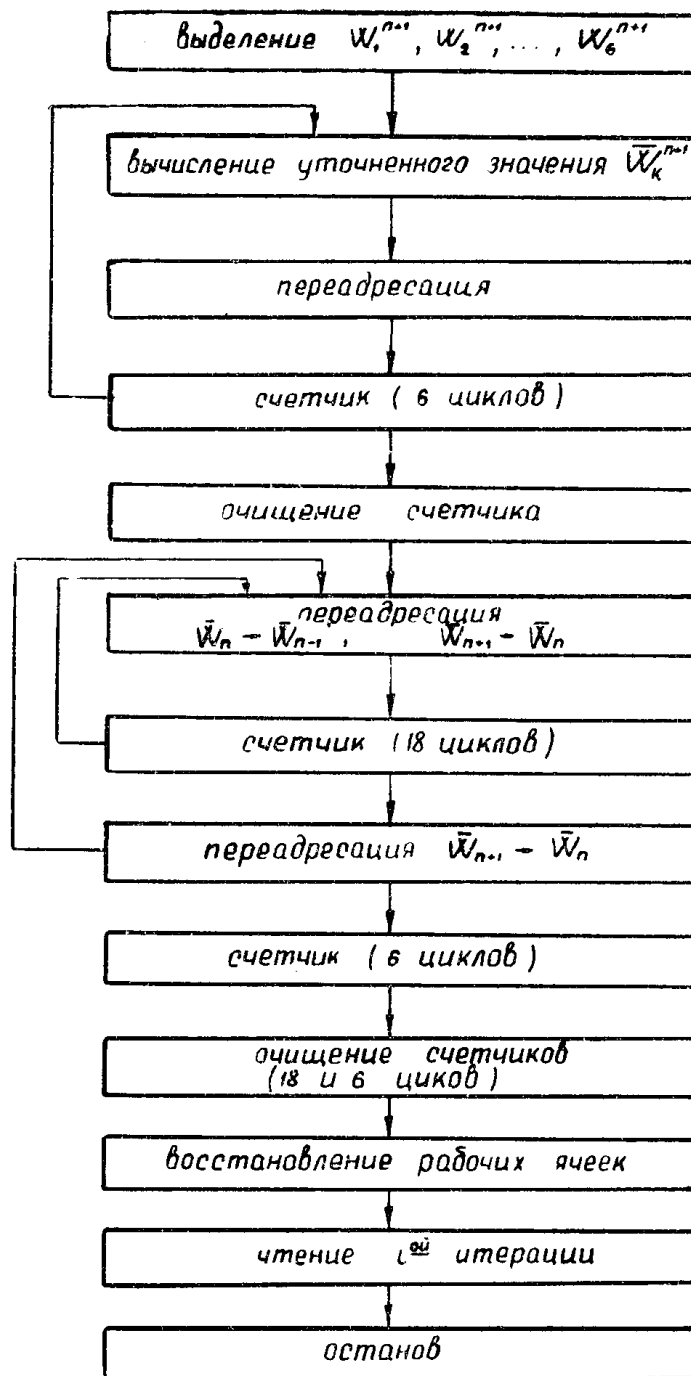


Рис. 1. Блок-схема программы

новная трудность заключается в переадресации значений $\overline{W}_n, W_{n+1}, \dots$, так как значения W_j , использованные в j -той итерации, должны быть заменены $W_k (\equiv W_{j+1})$ в k -той итерации ($k = j + 1$) и одновременно переписаны в ячейки для значений W_{k-1} .

Для уменьшения числа команд программы перезапись $\overline{W}_n, W_{n+1}, \overline{W}_{n-1}, W_n, \overline{W}_{n+1}$ значений корня n -той итерации в соответственно $\overline{W}_{n-1}, W_n, \overline{W}_n$, значения в $n + 1$ -ой итерации проводятся одним циклом (команды 66 — 85), для чего рекомендуется вышеупомянутые значения корня записывать в следующие ячейки:

$$\begin{aligned} &\overline{W}_n (01 \div 06), \\ &W_{n+1} (07 \div 12), \\ &\overline{W}_{n-1} (21 \div 26), \\ &W_n (27 \div 32), \\ &\overline{W}_{n+1} (13 \div 18). \end{aligned}$$

Программа приведена в приложении 2, в своей рабочей части она содержит 100 команд, из них 30 используются для вычисления корней w_j , 70 — для уточнения корней $\overline{w}_j$ и переадресации. Построение программы иллюстрируется блок-схемой рис. 1.

Расчеты производились для 15 значений температуры (от которой зависят значения K_{p1}) и нескольких десятков значений параметров a, b, c и их различных комбинаций.

Использование электронных цифровых вычислительных машин значительно ускоряет расчеты, а знание столь большого числа вариантов концентраций равновесных выходов дает возможность вести химический процесс в наиболее выгодном направлении.

ЛИТЕРАТУРА

1. Дж. Н. Ланс. Численные методы для быстродействующих вычислительных машин. ИИЛ, М., 1962.

Приложение 1

Программа 1

Номер команды	Операция	Адрес	Пояснения
00	чт.	01	
01	умн.	01	
02	умн.	01	
03	выч. 1	86	
04	зп.	02	
05	выч. 1	04	
06	выч. 1	01	
07	сл.	03	
08	зп.	10	
09	чт.	02	
10	выч. 1	04	
11	зп.	11	
12	чт.	02	
13	выч. 1	01	
14	умн.	11	
15	дел.	10	
16	выч. 2	02	
17	зп.	05	
18	чт.	01	
19	зп.	03	
20	чт.	02	
21	зп.	04	
22	чт.	05	
23	зп.	01	
24	выч. 1	03	
25	дел.	01	
26	выч. 2	12	
27	уп. 1	00	
28	ост.		

Приложение 2

Программа 2

Номер команды	Операция	Адрес	Пояснения
1	2	3	4
00	чт.	04	
01	умн.	03	
02	дел.	61	
03	✓		
04	зп.	07	
05	чт.	01	
06	сл.	01	
07	сл.	02	
08	дел.	62	
09	сл.	03	
10	умн.	72	
11	зп.	10	
12	умн.	53	
13	зп.	12	
14	умн.	64	
15	выч. 1	02	
16	умн.	88	
17	зп.	11	
18	чт.	86	
19	выч. 1	01	
20	выч. 1	02	
21	выч. 1	04	
22	выч. 1	05	
23	выч. 1	06	
24	зп.	09	
25	чт.	03	
26	умн.	60	
27	✓		
28	умн.	05	
29	✓		
30	зп.	08	
31	чт. II	50	
32	зп.	33	
33	чт. II	51	
34	зп.	34	
35	чт. II	53	
36	зп.	35	
37	чт. II	52	
38	выч. 1	33	
39	выч. 1	35	
40	сл.	34	
41	зп.	78	
42	чт.	34	
43	выч. 1	35	
44	зп.	77	
45	чт.	34	
46	выч. 1	33	
47	умн.	77	

Продолжение приложения 2

1	2	3	4
48	дел.	78	
49	выч. 2	34	
50	зп. II	54	
51	чт. II	40	
52	сл. ф.	90	
53	зп. II	40	
54	чт.	40	
55	сл. ф.	90	
56	зп.	40	
57	выч. ф.	41	
58	уп. 1	51	
59	чт.	42	
60	зп.	40	
61	чт.	71	
62	сл. ф.	90	
63	зп.	71	
64	выч. ф.	65	
65	уп. 1	31	
66	чт.	66	
67	зп.	50	
68	чт.	68	
69	зп.	52	
70	чт. II	50	
71	зп. II	52	
72	чт.	52	
73	сл.	90	
74	зп.	52	
75	чт.	50	
76	сл. ф.	90	
77	зп.	50	
78	выч. ф.	44	
79	уп. 1	70	
80	чт.	46	
81	сл. ф.	90	
82	зп.	46	
83	зп.	52	
84	выч. ф.	67	
85	уп. 1	70	
86	чт.	66	
87	зп.	50	
88	чт.	67	
89	зп.	51	
90	чт.	68	
91	зп.	52	
92	чт.	69	
93	зп.	53	
94	чт.	70	
95	зп.	54	
96	чт.	00	
97	зп.	46	
98	зп.	71	
99	ост.		