

A. ROOSE

УСЛОВИЯ СХОДИМОСТИ ОДНОЙ ДВУХУРОВНЕВОЙ ИТЕРАЦИОННОЙ СХЕМЫ ДЛЯ ВЫЧИСЛЕНИЯ УСТАНОВИВШИХСЯ РЕЖИМОВ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ

A. ROOSE. ÜHE KEEMIAPROTSESSIDE TEHNOLOOGILISTE SÜSTEEMIDE STATSIONAARSETE REŽIIMIDE ARVUTAMISEKS ETTEENÄHTUD KAHENIVOOLISE ITERATSIOONIPROTSESSI KOONDUVUSEST

A. ROOSE. CONVERGENCE OF THE TWO-LEVEL ALGORITHM FOR CHEMICAL PLANT SIMULATION PROBLEMS

В [1] показано, что модель статики любой химико-технологической системы (ХТС) может быть сконструирована в т. н. двухуровневом виде. В частности, она может иметь вид [2]

$$x = A(z)y, \quad (1a)$$

$$F(x, z) = 0, \quad (1б)$$

где (1a) — верхний уровень, выписанный исходя из условий материального баланса ХТС в целом; (1б) — совокупность моделей ключевых аппаратов в ХТС; x — вектор всех входных потоков ключевых аппаратов в ХТС; y — вектор потоков сырья в ХТС в целом; z — вектор некоторых вспомогательных переменных; $A(z)$ — матричная функция, определенная на основе структуры рассматриваемой системы.

Проблема вычисления установившихся режимов ХТС в терминах модели (1) сводится к определению решения (z^*, x^*) системы уравнений (1) при фиксированном векторе y . Для этого в [2] применен следующий двухуровневый итерационный процесс:

$$x_{n+1} = A(z_n)y, \quad (2a)$$

$$F(x_{n+1}, z_{n+1}) = 0, \quad n = 0, 1, \dots, \quad (2б)$$

где z_0 — начальное приближение.

Нетрудно видеть, что для каждого $n = 0, 1, \dots$ система нелинейных уравнений (2б) должна быть решена заново. Отметим, что выражение (2) есть в сущности метод Гаусса—Зейделя для решения системы (1). Так как система нелинейных уравнений (2б) имеет специфическую структуру (см. подробнее в [2]), то для реализации на ЭВМ более удобен алгоритм (2), чем традиционные, т. н. последовательные алгоритмы вычисления установившихся режимов ХТС (см. [3]) или чем, например, алгоритм Ньютона—Канторовича для численного решения системы (1).

Условия, гарантирующие сходимость процесса (2), определяет следующая

Теорема. Пусть определен элемент z_1 , $\|\cdot\|$ обозначает норму элемента (вектора или матрицы) и

1) $\|y\| \leq U$;

2) матрица $A(z)$ однозначна и удовлетворяет условию Липшица $\|A(\mu) - A(\eta)\| \leq K\|\mu - \eta\|$ при

$$\mu, \eta \in S_1\left(z_0, \frac{1}{1-C}\|z_1 - z_0\|\right);$$

3) на прямом произведении сфер

$$S_1\left(z_0, \frac{1}{1-C}\|z_1 - z_0\|\right) \times S_2\left(x_1, KU \frac{1}{1-C}\|z_1 - z_0\|\right)$$

и в ее окрестности существуют непрерывные производные

$$\frac{\partial F(x, z)}{\partial z}, \quad \frac{\partial F(x, z)}{\partial x}, \quad \text{обратный оператор} \quad \left[\frac{\partial F(x, z)}{\partial z}\right]^{-1} = \Gamma \quad \text{и имеют}$$

$$\text{место оценки } \|\Gamma\| \leq M, \quad \left\|\frac{\partial F(x, z)}{\partial x}\right\| \leq N;$$

4) $C = MNKU < 1$.

Тогда итерационный процесс (2) определяет сходящиеся к решению (z^*, x^*) системы (1) последовательности $\{z_n\}_{n=0}^{\infty}$ и $\{x_n\}_{n=1}^{\infty}$ и имеют место оценки

$$\|z^* - z_n\| \leq \frac{C^n}{1-C}\|z_1 - z_0\|, \quad n=0, 1, \dots,$$

$$\|x^* - x_n\| \leq KU \frac{C^{n-1}}{1-C}\|z_1 - z_0\|, \quad n=1, 2, \dots,$$

причем (z^*, x^*) — единственное решение системы (1) в области

$$S_1\left(z_0, \frac{1}{1-C}\|z_1 - z_0\|\right) \times S_2\left(x_1, KU \frac{1}{1-C}\|z_1 - z_0\|\right).$$

Доказательство теоремы полностью приводить не будем. План доказательства следующий. Если $F(x, z) = 0$ определяет неявную функцию $z = \Phi(x)$, то процесс (2) можно переписать в виде

$$z_{n+1} = \Phi[A(z_n)y] = \bar{\Phi}(z_n), \quad n=0, 1, \dots \quad (3)$$

Это обыкновенный итерационный процесс, для которого на основе принципа сжимающих отображений легко выписать условия сходимости последовательности $\{z_n\}_{n=0}^{\infty}$ к точному решению уравнения $z = \bar{\Phi}(z)$ [4]. Единственная трудность состоит в том, что удовлетворяющая условию Липшица неявная функция $\Phi(x)$ должна быть определена в области, которая содержит всю последовательность $\{x_n\}_{n=1}^{\infty}$. Эта область вытекает из условий сходимости процесса (3). Условия существования неявной функции в наперед заданной области, в свою очередь, определяются нелокальной теоремой Лозинского [5]. Если эти условия добавить к условиям теоремы о сходимости процесса $z_{n+1} = \bar{\Phi}(z_n)$, $n=0, 1, \dots$, то в результате получим теорему о сходимости процесса (2). Надо отметить, что это не единственно возможный под-

ход к доказательству сходимости процесса (2). Приведенная выше методика имеет неконструктивный характер — она ничего не говорит о способах фактической реализации алгоритма (2), т. е. о способах решения уравнений (26). Основываясь на методе вариации параметра [4, 6], можно дать и конструктивное доказательство приведенной выше теоремы. При этом проблема численного решения последовательности уравнений (26) сводится к численному решению последовательности задач Коши

$$\frac{dz}{dt} = - \left\{ \frac{\partial F[t x_{n+1} + (1-t)x_n, z]}{\partial z} \right\}^{-1} \frac{\partial F[t x_{n+1} + (1-t)x_n, z]}{\partial x} (x_{n+1} - x_n),$$
$$z(0) = z_n, \quad t \in [0, 1], \quad n = 1, 2, \dots \quad (4)$$

При фиксированном $n = 1, 2, \dots$ задача Коши (4) определяет в условиях теоремы приближение z_{n+1} , причем z_n используется как начальное условие задачи Коши. Однако конструктивное доказательство теоремы из-за громоздкости обсуждать здесь не будем.

Алгоритм (1) был использован для вычисления установившихся режимов цеха производства карбамида при различных входных потоках сырья [2].

ЛИТЕРАТУРА

1. Нагиев М. Ф., Основы химической кинетики промышленных систем, Баку, 1950.
2. Tavast, R., Roose, A., In: Proc. of the Symposium «Computers in the Design and Erection of Chemical Plants», Karlovy Vary, Czechoslovakia, Aug.-Sept., 1975, p. 443.
3. Evans, L. B., Steward, D. G., Sprague, C. R., Chem. Engng Progr., 64, No. 4, 39 (1968).
4. Ortega, J. M., Rheinboldt, W. C., Iterative Solution of Nonlinear Equations in Several Variables, New York, 1970.
5. Лозинский С. М., Вестник ЛГУ, № 7, 131 (1957).
6. Давиденко Д. Ф., Докл. АН СССР, 88, № 4, 601 (1953).

Институт кибернетики
Академии наук Эстонской ССР

Поступила в редакцию
27/IX 1977