EESTI NSV TEADUSTE AKADEEMIA TOIMETISED. 27. KÖIDE
FÜÜSIKA * MATEMAATIKA. 1978, NR. 2

ИЗВЕСТИЯ АКАДЕМИИ НАУК ЭСТОНСКОЙ ССР. ТОМ 27
ФИЗИКА * МАТЕМАТИКА. 1978, № 2

https://doi.org/10.3176/phys.math.1978.2.16

УДК 517.948 : 66.011

А. РООЗЕ

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

A. ROOSE. ÜHE KEEMIAPROTSESSIDE TEHNOLOOGILISTE SÜSTEEMIDE STATSIONAARSETE REŽIIMIDE ARVUTAMISEKS ETTENÄHTUD 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]

$$x=A(z)y, \tag{1а}$$

$$F(x,z)=0, \tag{1б}$$

где (1а) — 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 двухуровневой итерационный процесс:

$$x_{n+1}=A(z_n)y, \tag{2а}$$

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

где z_0 — начальное приближение.

Нетрудно видеть, что для каждого $n=0, 1, \ldots$ 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) $\|y\| \leqslant U$;

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

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

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

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*

$$\|z^* - z_n\| \leqslant \frac{C^n}{1-C}\|z_1 - z_0\|, \qquad n = 0, 1, \ldots,$$

$$\|x^* - x_n\| \leqslant KU\frac{C^{n-1}}{1-C}\|z_1 - z_0\|, \qquad n = 1, 2, \ldots,$$

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

$$z_{n+1} = \Phi[A(z_n)y] = \overline{\Phi}(z_n), \quad n = 0, 1, \ldots. \tag{3}$$

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 $z = \overline{\Phi}(z)$ [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 $z_{n+1} = \overline{\Phi}(z_n)$, $n = 0, 1, \ldots$, то в результате получим теорему о сходимости процесса (2). Надо отметить, что это не единственно возможный подход 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 (2б). Основываясь на методе вариации параметра [4, 6], можно дать и конструктивное доказательство приведенной выше теоремы. При этом проблема численного решения последовательности уравнений (2б) сводится к численному решению последовательности задач Коши

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

При фиксированном $n=1, 2, \ldots$ 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