

УДК 541.123.7

ХИМИЧЕСКАЯ ТЕХНОЛОГИЯ

В. И. ПОСЫПАЙКО, Н. А. ВАСИНА

**О ВОЗМОЖНОСТЯХ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ
СВОЙСТВ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ ВЗАИМНЫХ СОЛЕВЫХ
СИСТЕМ С ПРИМЕНЕНИЕМ ЭЛЕКТРОННО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ
МАШИН**

(Представлено академиком И. В. Тананавым 14 XI 1973)

Развитие науки и техники в настоящее время требует постановки исследований на современном уровне, в частности широкого внедрения в технологические схемы машинных расчетов и прогнозов. Применение ЭВМ в химической технологии солевых расплавов до настоящего времени ограничивалось трудностями перевода на машинный язык понятий и символов многомерной геометрии, лежащих, как известно, в основе изучения многокомпонентных взаимных систем. Развиваемые в последние годы матричные способы изображения солевых взаимных систем с большим числом компонентов могут быть использованы для ввода в вычислительную машину.

Предложенные авторами ⁽¹⁾ элементарные матрицы, являющиеся по своему химическому содержанию матрицами взаимных пар солей, представляют, по нашему мнению, полную возможность выражения состава и свойств взаимных систем на алгоритмическом языке. Наибольшее распространение в нашей стране получил алгоритмический язык АЛГОЛ-60, характеризующийся удобством и доступностью. Матрицы взаимных пар солей и действия с ними легко записываются на АЛГОЛе.

В самом деле, элементы 1 и 0 введенных нами матриц взаимных пар солей являются булевскими элементами, которые могут принимать только два значения: true (1) и false (0) *. С булевскими элементами в АЛГОЛе можно производить арифметические и логические операции. Это и является основой того, что матрицы взаимных пар солей могут быть заложены в программу для ЭВМ.

Рассмотрим некоторые конкретные возможности. Ранее ⁽²⁾ было показано, как с помощью элементарных матриц можно осуществить переход от систем с малым числом компонентов к системам более высокой размерности и определять направление реакций обмена в последних. Также был рассмотрен переход от одних составляющих многокомпонентной взаимной системы к другим, например, от выражения состава системы в виде совокупности стабильных диагоналей (стабильных взаимных пар солей) к выражению состава в виде совокупности вершин (солей). Здесь мы покажем этот переход в виде записи программы на АЛГОЛе.

Задача: перейти от матрицы M (матрица взаимных пар солей) к матрице N (матрица индексов вершин) четверной взаимной системы $A, B||X, Y, Z$ (A, B — катионы, X, Y, Z — анионы).

* Здесь и далее запись символов и алгоритмов АЛГОЛа ведется на общепринятом эталонном языке, сохраняющем английское написание.

		B					
		X	Y	Z			
A	X	a_{11}	a_{12}	a_{13}	A	x_{11}	x_{12}
	Y	a_{21}	a_{22}	a_{23}	B	x_{21}	x_{22}
	Z	a_{31}	a_{32}	a_{33}	N		
		M					

Обозначения: матрица M имеет число строк $m=3$, число столбцов $n=3$; матрица N имеет число строк $p=2$, число столбцов $n=3$.

Программа:

```

begin  array M[1:m, 1:n], N[1:p, 1:n]
       integer i, j
       input (M)
       for i = 1 step 1 until n do
       for j = 1 step 1 until m do
       M[i, j] := 0.0.  comment очистка массива M
       x[1, 1] := i1,  x[1, 2] := i2,  x[1, 3] := i3,
       x[2, 1] := j1,  x[2, 2] := j2,  x[2, 3] := j3
       output (N)
       end
     end
  end

```

Переход от систем низкой размерности к системам более высокой осуществляется в АЛГОЛе с помощью математического действия сложения — суммирования индексов в соответствующих строках и столбцах матриц взаимных пар солей. При отсутствии полных исходных данных, что часто встречается в технологической практике, в программу необходимо вводить условные и составные операторы (односторонние, двухсторонние и т. п., в зависимости от числа компонентов) типа

if V then $S1$ else $S2$,

где V означает булевское выражение (0 или 1). Таким путем можно получить с помощью ЭВМ прогноз направления реакций обмена в пяти-, шести- и более компонентных системах при отсутствии данных о нескольких стабильных парах солей.

Как показали наши дальнейшие исследования свойств матриц взаимных пар солей, в них можно кодировать не только направление реакций взаимного обмена, но и отдельные физико-химические свойства составляющих матрицу солевых пар, например, наличие (1) или отсутствие (0) эвтектик, твердых растворов, комплексообразования, расслаивания и др.

В качестве примера приводим матрицы различных свойств четверной взаимной системы $Li, Na||Cl, NO_3, SO_4$, изученной нами (³).

		Na					Na		
		Cl	NO_3	SO_4			Cl	NO_3	SO_4
Li	Cl	0	0	0	Li	Cl	0	0	0
	NO_3	1	0	0		NO_3	1	1	0
	SO_4	1	1	0		SO_4	1	0	0
1) направление реакций обмена					2) эвтектики				
		Na					Na		
		Cl	NO_3	SO_4			Cl	NO_3	SO_4
Li	Cl	1	0	0	Li	Cl	0	0	0
	NO_3	0	0	0		NO_3	0	0	0
	SO_4	0	1	1		SO_4	0	0	0
3) комплексообразование					4) расслаивание				

При прогнозировании какого-либо свойства (наличия низкоплавкой эвтектики и т. п.) многокомпонентной взаимной системы следует рассмотреть соответствующее число матриц взаимных пар солей систем размерностью на 1 или 2 меньше с закодированным в них нужным свойством.

Например, требуется определить область существования низкоплавкой эвтектики в системе $\text{Li, Na}||\text{Cl, NO}_3, \text{SO}_4$, исходя из эвтектических свойств составляющих ее тройных взаимных систем:

		Na				Na				Na	
		Cl	NO ₃			Cl	SO ₄			NO ₃	SO ₄
Li	Cl	0	0	Li	Cl	0	0	iL	NO ₃	1	0
	NO ₃	1	1		SO ₄	1	0		SO ₄	0	0

Ручной алгоритм нахождения искомой области определяется следующим правилом: четверная эвтектика находится в четырехвершинниках, включающих наибольшее число единиц. В данном случае — в сфеноиде $\text{Li}_2\text{SO}_4\text{—LiNO}_3\text{—NaNO}_3\text{—NaCl}$, содержащем в таблице-матрице (2) три эвтектические единицы что подтверждают наши экспериментальные исследования данной системы.

При записи программы такого действия на АЛГОЛе необходимо использовать логические операции (отрицание, конъюнкцию, дизъюнкцию, импликацию, тождество). Применение ЭВМ позволяет прогнозировать перечисленные физико-химические свойства солевых систем и при отсутствии полных исходных данных о составляющих системах низшей размерности (путем перебора вариантов).

Таким образом, матрицы взаимных пар солей представляют собой основу машинного программирования прогнозов различных физико-химических свойств многокомпонентных взаимных систем, так как программы действия с ними легко записываются на алгоритмическом языке.

Умение исследователей многокомпонентных солевых равновесий выражать закономерности физико-химического анализа на алгоритмическом языке с последующим применением матриц и ЭВМ на их основе отвечает современным требованиям и открывает большие возможности по прогнозированию эвтектик, расслаивания, образования комплексных соединений в самых различных природных объектах и химико-технологических процессах.

Всесоюзный заочный политехнический
институт
Москва

Поступило
11 XI 1973

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

¹ Н. А. Васина, В. И. Посыпайко, ДАН, т. 203, № 6, 1303 (1972). ² Н. А. Васина, В. И. Посыпайко, ЖНХ, т. 17, 1450, 1731, 2780 (1972). ³ Н. А. Васина, Кандидатская диссертация, М., 1973.