

УДК 519.6

**Павел Александрович Сеченов**

ФГБОУ ВО «Сибирский государственный индустриальный университет», кандидат технических наук, доцент кафедры прикладных информационных технологий и программирования, Россия, Новокузнецк, e-mail: pavesa89@mail.ru

## Выбор критериев для сокращения неизвестных в методе Ньютона–Рафсона в задаче нахождения равновесного состава железной руды и топлива

### Авторское резюме

**Состояние вопроса.** Нахождение равновесного состава многокомпонентной системы требуется в различных отраслях промышленности, связанных с протеканием химических реакций. Сокращение неизвестных в исходном нелинейном уравнении возможно, если большая часть неизвестных в результате решения получает значения, равные нулю. Такая ситуация характерна для решения задачи нахождения равновесного состава железной руды и топлива, где в качестве неизвестных выступает количество молей всевозможных продуктов реакций из заданных простых веществ. Зависимость алгоритмической сложности от количества неизвестных для решения системы линейных алгебраических уравнений выражается через функцию  $O(N^3)$ , поэтому сокращение неизвестных позволит ускорить вычислительный процесс. В связи с этим решение задачи выбора критериев для сокращения количества неизвестных на каждой итерации метода Ньютона–Рафсона применительно к задаче нахождения равновесного состава железной руды и топлива является актуальным.

**Материалы и методы.** Уменьшение размерности матрицы осуществлено с применением 4 стратегий. Первые три стратегии связаны с поиском минимального порога (удаление значений, которые быстрее всех стремятся к нулю), после которого количество неизвестных будет сокращаться. Последняя стратегия связана с уменьшением размерности исходной матрицы.

**Результаты.** Приведены результаты численных экспериментов по сокращению неизвестных и ускорению вычислений. Найдены критерии, при которых скорость вычисления увеличивается в 2–4 раза, при этом не сокращаются переменные, значение которых не равно нулю.

**Выводы.** Реализованные в программном комплексе T-Energy критерии для сокращения неизвестных позволяют решать задачу нахождения равновесного состава железной руды и топлива быстрее в 2–4 раза. При этом полученное решение по составу компонентов равновесного состава с сокращением неизвестных соответствует полному решению с точностью  $10^{-3}$ . За счет ускорения за то же самое время можно построить равновесные составы на интервале температур с меньшим в 2–4 раза шагом.

**Ключевые слова:** редукция матрицы, итерационный процесс, метод Ньютона–Рафсона, задача нахождения равновесного состава

**Pavel Aleksandrovich Sechenov**

Siberian State Industrial University, Candidate of Engineering Sciences, (PhD), Associate Professor of Applied Information Technologies and Programming Department, Russia, Novokuznetsk, e-mail: pavesa89@mail.ru

## Selection of criteria to reduce the unknowns in Newton–Raphson method in the problem of finding an equilibrium composition of iron ore and fuel

### Abstract

**Background.** Finding the equilibrium composition of a multicomponent system is required in various industries associated with chemical reactions. Reduction of the unknowns in the original nonlinear equation is possible if most of the unknowns receive values equal to zero as a result of the solution. This situation is typical to solve the problem of finding an equilibrium composition of iron ore and fuel, where the unknowns are the number of moles of all possible reaction products from given simple substances. The dependence of algorithmic complexity on the number of unknowns to solve a SLAEs is expressed through the function  $O(N^3)$ . Therefore, reduction of the unknowns will speed up the computational process. Thus, the solution to the problem of selecting criteria to reduce the number of the unknowns at each iteration of the Newton-Raphson method as applied to the problem of finding the equilibrium composition of iron ore and fuel is relevant.

**Materials and methods.** The matrix dimensionality reduction has been achieved using four strategies. The first three strategies involve finding a minimum threshold (removing values that most quickly tend to zero), after which the number of unknowns will decrease. The fourth strategy is associated with reducing the dimension of the original matrix.

**Results.** The results of numerical experiments to reduce the unknowns and speed up calculations are presented. Criteria have been found under which the calculation speed increases by 2–4 times and variables whose value is not equal to zero are not reduced.

**Conclusions.** The criteria to reduce the unknowns implemented in the T-Energy software package make it possible to solve the problem of finding the equilibrium composition of iron ore and fuel 2–4,2 times faster. In this case, the obtained solution for the components of the equilibrium composition with the reduction of the unknowns corresponds to the complete solution with an accuracy of  $10^{-3}$ . Due to acceleration at the same time, it is possible to construct equilibrium compositions over a temperature range with a temperature step that is 4 times smaller.

**Key words:** matrix reduction, iterative process, Newton–Raphson method, equilibrium composition problem

**DOI:** 10.17588/2072-2672.2024.5.082-090

**Введение.** Нахождение равновесного состава многокомпонентной системы требуется в химической, металлургической и других отраслях промышленности, связанных с протеканием химических реакций. Методологию построения фазовых диаграмм в сочетании с машинным обучением применяют для нахождения состава продуктов реакций с заданными свойствами [1].

Как показано в [2], задача нахождения равновесного состава сводится к применению численных методов: Лагранжа, Ньютона–Рафсона, метода решения СЛАУ. Для более детальной информации требуется большее количество расчетов равновесного состава многокомпонентной системы на заданном интервале температур. На время вычисления влияют:  $f(k)$  – количество точек, в которых необходимо найти равновесный состав при заданной температуре;  $f(m)$  – выбор метода решения СЛАУ;  $f(n)$  – количество неизвестных в функции нахождения равновесного состава. Тогда общее время вычисления можно представить в виде функции

$$Q(t) = f(k) f(m) f(n). \quad (1)$$

Время вычисления первого параметра  $f(k)$  удалось сократить благодаря параллельной реализации алгоритма [2]. Для выбора оптимального метода решения были реализованы методы Гаусса, LUP-разложения, LDL<sup>T</sup>-разложения (разложение Холецкого для симметричной матрицы). Рассмотрим один из факторов, влияющих на общую скорость вычисления, а именно количество неизвестных, или число параметров системы [3], и способы их уменьшения.

Так, алгоритмическая сложность для методов Гаусса, LUP и LDL<sup>T</sup> [4] составляет в общем виде  $O(N^3)$  [5], в частном виде  $N^6$ ,  $2N^3/3$  [6] и  $N^3/3$  соответственно. Как видно из алгоритмической сложности, время вычисления кубически зависит от количества неизвестных.

**Методы исследования.** Задача нахождения равновесного состава – это задача нахождения минимума приведенной энергии Гиббса:

$$F(T, \bar{n}) \rightarrow \min. \quad (2)$$

В общем виде функция приведенной энергии Гиббса может быть представлена в виде уравнения [7]

$$F(T, \bar{n}) = \sum_{q=1}^Q F_q^0(T) n_q + \sum_{k=1}^K F_k^0(T) n_k - \sum_{k=1}^K n_k \cdot \ln \left( \sum_{k=1}^K n_k \right) + \sum_{k=1}^K (n_k \cdot \ln(n_k)), \quad (3)$$

где  $F_q^0$  и  $F_k^0$  – приведенная энергия Гиббса для  $q$ -й компоненты конденсированной фазы и  $k$ -й компоненты газовой фазы, кДж/моль;  $n_q$  и  $n_k$  – концентрации компонентов газовой фазы и конденсированной фазы.

Задача нахождения равновесного состава допускает сокращение количества неизвестных, так как при решении возможно получение неизвестных, которые принимают значения равные или близкие нулю.

Рассмотрим примеры решения задачи нахождения равновесного состава многокомпонентной системы.

**Пример 1.** Нахождение равновесного состава для 1 моля кислорода при температуре 300 К. В базе данных есть всего три простых вещества, состоящие только из кисло-

рода: O, O<sub>2</sub> и O<sub>3</sub>. Приведенная энергия Гиббса составляет 80,5; -24,6 и 80,8 Дж/(моль·К) соответственно. Задача равновесного состава сводится к нахождению минимума линейной функции:

$$F(300, \bar{n}) = 80,5 \cdot n_{\text{O}} - 24,7 \cdot n_{\text{O}_2} + 80,8 \cdot n_{\text{O}_3}. \quad (4)$$

Минимум достигается при  $n_{\text{O}} = 0$ ;  $n_{\text{O}_2} = 0,5$ ;  $n_{\text{O}_3} = 0$ .

*Пример 2.* Нахождение равновесного состава для 1 моля углерода при температуре 300 К. В данном случае в базе данных возможны шесть простых веществ: C(c), C, C<sub>2</sub>, C<sub>3</sub>, C<sub>4</sub>, C<sub>5</sub>. Задача линейная:

$$\begin{aligned} F(300, \bar{n}) = & -0,7 \cdot n_{\text{C(c)}} + 268,3 \cdot n_{\text{C}} + \\ & + 309,4 \cdot n_{\text{C}_2} + 308,2 \cdot n_{\text{C}_3} + \\ & + 384,1 \cdot n_{\text{C}_4} + 388,7 \cdot n_{\text{C}_5}. \end{aligned} \quad (5)$$

Минимум приведенной энергии Гиббса достигается, если взять 1 моль C(c), при этом количество других веществ равно нулю.

*Пример 3.* Нахождение равновесного состава для 1 моля кислорода и 1 моля углерода.

Уравнение для нахождения минимума функции приведенной энергии Гиббса включает как линейную составляющую, состоящую из произведений приведенной энергии Гиббса на количество возможных веществ в получаемом составе, так и логарифмические составляющие, которые характеризуют энергию смешения газов:

$$\begin{aligned} F(300, \bar{n}) = & 80,5n_{\text{O}} - 24,7n_{\text{O}_2} - 0,7n_{\text{C(c)}} + \\ & + 268,3n_{\text{C}} + 309,4n_{\text{C}_2} + 308,2n_{\text{C}_3} + \\ & + 384,1n_{\text{C}_4} + 388,7n_{\text{C}_5} - 68,1n_{\text{CO}} - \\ & - 183,5n_{\text{CO}_2} + 88,6n_{\text{C}_2\text{O}} - 72,4n_{\text{C}_3\text{O}_2} + 80,8n_{\text{O}_3} + \\ & + n_{\text{O}} \cdot \ln n_{\text{O}} + n_{\text{O}_2} \cdot \ln n_{\text{O}_2} + n_{\text{C}} \cdot \ln n_{\text{C}} + n_{\text{C}_2} \cdot \ln n_{\text{C}_2} + \\ & + n_{\text{C}_3} \cdot \ln n_{\text{C}_3} + n_{\text{C}_4} \cdot \ln n_{\text{C}_4} + n_{\text{C}_5} \cdot \ln n_{\text{C}_5} + \\ & + n_{\text{CO}} \cdot \ln n_{\text{CO}} + n_{\text{CO}_2} \cdot \ln n_{\text{CO}_2} + n_{\text{C}_2\text{O}} \cdot \ln n_{\text{C}_2\text{O}} + \\ & + n_{\text{C}_3\text{O}_2} \cdot \ln n_{\text{C}_3\text{O}_2} - (n_{\text{O}} + n_{\text{O}_2} + n_{\text{C}} + n_{\text{C}_2} + \\ & + n_{\text{C}_3} + n_{\text{C}_4} + n_{\text{C}_5} + n_{\text{CO}} + n_{\text{CO}_2} + n_{\text{C}_2\text{O}} + n_{\text{C}_3\text{O}_2}) \times \\ & \times \ln(n_{\text{O}} + n_{\text{O}_2} + n_{\text{C}} + n_{\text{C}_2} + n_{\text{C}_3} + n_{\text{C}_4} + n_{\text{C}_5} + \\ & + n_{\text{CO}} + n_{\text{CO}_2} + n_{\text{C}_2\text{O}} + n_{\text{C}_3\text{O}_2}). \end{aligned} \quad (6)$$

Ограничения по количеству веществ кислорода и углерода запишем в следующем уравнении:

$$\begin{aligned} L(v_1, v_2, \bar{n}) = & v_1 (n_{\text{O}} + 2n_{\text{O}_2} + 3n_{\text{O}_3} + n_{\text{CO}} + \\ & + 2n_{\text{CO}_2} + 3n_{\text{C}_2\text{O}_3} + 2n_{\text{C}_3\text{O}_2} - 1) + \\ & + v_2 (n_{\text{C(c)}} + n_{\text{C}} + 2n_{\text{C}_2} + 3n_{\text{C}_3} + 4n_{\text{C}_4} + 5n_{\text{C}_5} + \\ & + n_{\text{CO}_2} + 2n_{\text{C}_2\text{O}_3} + 3n_{\text{C}_3\text{O}_2} - 1). \end{aligned} \quad (7)$$

Решение уравнения (6) совместно с уравнением (7) в программе Terra, а также с помощью программы T-Energy показывает, что минимум достигается при количестве  $n_{\text{C(c)}} = n_{\text{CO}_2} = 0,5$ , значение остальных переменных равно нулю.

В программах расчета термодинамического равновесия Terra, Thermo-Calc, HSC Chemistry, Open Calphad, Pandat для заданных веществ в качестве неизвестных подбираются все возможные комбинации из продуктов реакций. В [7] приводится пример для входных элементов (кислорода и водорода), из которых возможно получить восемь продуктов реакций, а при заданных в задаче условиях получают четыре вещества больше нуля. Таким образом, количество неизвестных больше нуля составляет 50 %. Наибольший интерес с точки зрения сокращения количества неизвестных возникает при большем количестве входных параметров. Например, при количестве 8 входных веществ возможны около 400 различных веществ, а выходной состав составляет всего 15 веществ.

Алгоритм применения численных методов в задаче нахождения равновесного состава сложной многокомпонентной системы показан на рис. 1 (нами был добавлен блок «Сокращение количества неизвестных»).

Таким образом, после одной итерации метода Ньютона–Рафсона, после решения системы линейных алгебраических уравнений происходит процедура сокращения количества неизвестных. А матрица, передаваемая на вход следующей итерации, редуцируется [8] согласно стратегиям 1–4, перечисленным ниже.

С одной стороны, редукция матрицы позволит ускорить вычислительный процесс, с другой стороны, можно сократить переменные, которые в итоговом значении не окажутся нулевыми, что приведет к неправильному решению. На рис. 2 для симметричной матрицы показаны следующие этапы: а) исходная матрица 7×7; б) сокращение неизвестной под номером 6; в) перестроение исходной матрицы в матрицу меньшего размера.

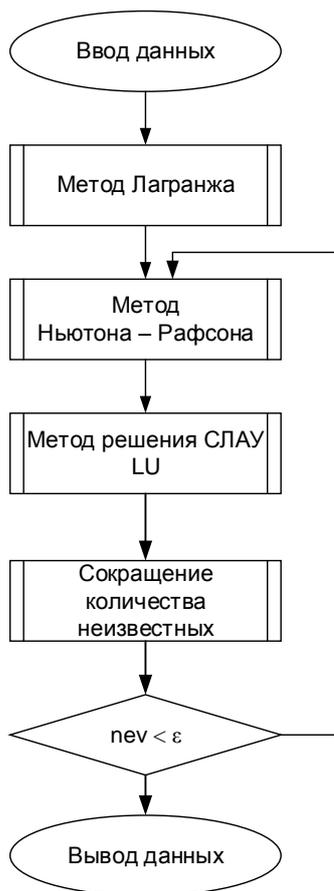


Рис. 1. Алгоритм решения задачи

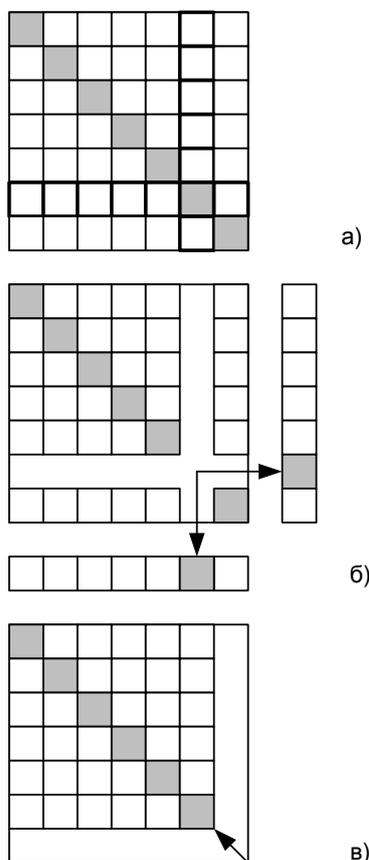


Рис. 2. Пример редукции матрицы

Далее рассмотрим основные стратегии по уменьшению количества неизвестных.

**Стратегия 1.** Если значение переменной становится менее  $p$  % от начального значения, то переменная становится незначимой и сокращается из расчета.

**Стратегия 2.** Сокращение неизвестных после достижения порога минимума.

**Стратегия 3.** Сокращение неизвестных, которые несколько раз подряд уменьшаются быстрее всех.

**Стратегия 4.** Уменьшение количества неизвестных в начале расчета (исключение из расчета тех переменных, которые заведомо не могут быть задействованы в решении [9]).

При выполнении стратегий 1–4 также учитывалось важное условие, что количество неизвестных не может быть менее 15.

**Результаты исследования.** В табл. 1, 2 приведены результаты сравнения времени выполнения и достижения правильного решения для квадратной матрицы размером  $384 \times 384$ , при этом равновесный состав считался в пяти точках от 1000 до 1400 К с шагом 100 К.

Таблица 1. Результаты сравнения времени расчета по стратегии 1

Процент сокращения размерности, %	Решение уравнения правильно	Время расчета, мс	Ускорение $\tau_0 / \tau_i$
0	Да	18962	1
1	Да	10014	1,89
1,5	Да	9159	2,07
1,75	Да	8449	2,24
1,8	Да	8311	2,28
1,85	Нет	8113	
1,9	Нет	8008	
2	Нет	4208	

Таблица 2. Результаты сравнения времени расчета по стратегии 2

Минимальный порог сокращения	Решение уравнения правильно	Время расчета, мс	Ускорение $\tau_0 / \tau_i$
0	Да	18962	1
0,01	Да	10574	1,79
0,05	Да	8644	2,19
0,075	Да	7864	2,41
0,08	Нет	7741	
0,1	Нет	7102	

Анализ полученных результатов (табл. 1) показывает: если  $p$  меньше 1,8 %, то найденные значения переменных совпадают с полным решением, если  $p$  больше 1,85 %, то найденные значения переменных отличаются от полного решения. Если  $p$  находится в диапазоне от 1 до 1,8 %, то время вычисления сокращается в два раза.

Объединение лучших по времени стратегий: 1) сокращение размерности при получении значения менее 1,8 % от начального или 2) при условии, что текущее значение неизвестной менее 0,075, позволяет выполнить расчет за 7742 мс, что оказывается чуть быстрее, чем только по второй стратегии.

На рис. 3 показан график зависимости количества неизвестных в уравнении (3) от номера итерации при объединении двух первых стратегий.

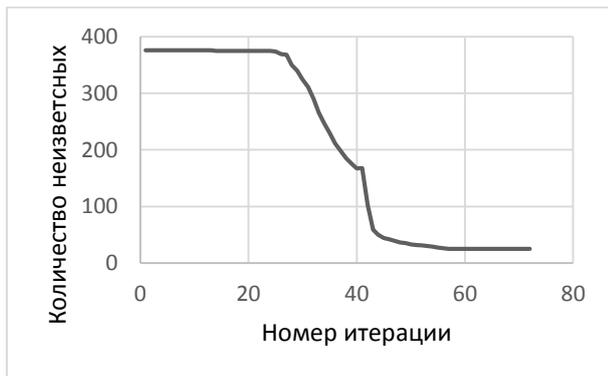


Рис. 3. График зависимости количества неизвестных от номера итерации при одновременном использовании стратегий 1 и 2

Общее количество итераций метода Ньютона–Рафсона [10] составило 72, при этом с 1 по 24 итерацию количество неизвестных сократилось с 384 до 382. Среднее количество неизвестных составило 203, а время расчета сократилось более чем в 2 раза.

В табл. 3 показаны результаты сокращения количества неизвестных, которые несколько раз подряд уменьшаются быстрее остальных неизвестных.

Анализ полученных результатов (табл. 3) показывает, что стратегия 3 не дала ощутимого прироста по скорости по сравнению с использованием условий из стратегий 1 и 2.

Четвертая стратегия состоит в отборе веществ с отрицательными значениями приведенной энергии Гиббса. При таком

условии задача из 384 неизвестных сразу сокращается до 304 неизвестных, а конечный результат совпадает с результатом, который получается при решении полного количества неизвестных в исходном уравнении.

Таблица 3. Результаты сравнения времени расчета по стратегии 3

Количество раз, которое переменная была минимальной	Решение уравнения правильно	Время расчета, мс	Ускорение $\tau_0 / \tau_i$
0	Да	18962	1
18	Нет		
19	Да	7751	2,44
20	Да	7864	2,41

Было протестировано 7 тестовых задач (массовый состав представлен в табл. 4–10) на интервале температур от 300 до 2000 К с шагом 100 градусов. Задачи упорядочены по мере возрастания количества неизвестных (15, 79, 153, 173, 214, 354 и 384). Например, задача 1 и 4 – это задачи с образованием газов. А задачи 2, 3, 5 и 6 – получены в результате уменьшения количества простых веществ в задаче 7. Задача под номером 7 соответствует составу железной руды и топлива.

Таблица 4. Состав задачи 1

Простое вещество	Масса, кг
С	12,00
О	32,00

Таблица 5. Состав задачи 2

Простое вещество	Масса, кг
Fe	61,66
О	21,86
С	13,33
S	0,33
P	0,01
Mn	0,01

Таблица 6. Состав задачи 3

Простое вещество	Масса, кг
С	98,49
H	20,97
Fe	111,69
О	211,19

Таблица 7. Состав задачи 4

Простое вещество	Масса, кг
C	60,52
H	0,65
O	8,34
N	10,58

Таблица 8. Состав задачи 5

Простое вещество	Масса, кг
Fe	45,27
O	27,89
Mn	0,35
Si	4,98
Ca	4,26
Mg	0,83
Al	1,49
P	0,10
H	0,17
N	0,17
S	0,33

Таблица 9. Состав задачи 6

Простое вещество	Масса, кг
C	63,88
H	3,57
O	27,47
N	0,36
S	0,46
Fe	0,44
Al	0,17
Ca	1,98
Mg	0,22
P	0,01
Si	0,77

Таблица 10. Состав задачи 7

Простое вещество	Масса, кг
Fe	45,27
O	27,89
Mn	0,35
Si	4,98
Ca	4,26
Mg	0,83
Al	1,49
P	0,10
C	13,67
H	0,17
N	0,17
S	0,33

Тестирование на семи задачах показало, что для тестовой задачи 3 с исходным составом C – 36,0; CH<sub>4</sub> – 83,4; Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> – 159,6; O<sub>2</sub> – 163,1 получилось наибольшее отклонение между решениями без сокра-

щений переменных и с сокращением на интервале температур от 830 до 930 К.

Для совпадения полученных результатов ограничения были сделаны более строгими: 1) для первого ограничения минимальный порог сокращения составил 1 % между значениями от минимального до максимального; 2) для второго ограничения сокращение переменной возможно при относительном значении менее 0,03.

После применения более строгих ограничений для семи тестовых задач были проведены вычисления на интервале температур от 300 до 2000 К с шагом 100 градусов. В табл. 11 показано решение задачи 2 при температуре 300 К. Исходный состав состоял из 6 элементов, общее количество неизвестных 79, из которых 73 – возможные вещества, 6 – ограничения по элементам.

Максимальное по модулю отклонение в массовых долях полученных веществ составило  $|\Delta n_i| = 3,11E-10$  (при температуре 300 К).

Таблица 11. Сравнение полученных результатов для задачи 2 при температуре 300 К

Вещество	$n_{i, \text{полное}}$	$n_{i, \text{сокращ}}$	$ \Delta n_i $
O	8,24E-20	0,00E+00	8,24E-20
O <sub>2</sub>	2,96E-19	0,00E+00	2,96E-19
S(c)	3,87E-20	0,00E+00	3,87E-20
S	3,51E-21	0,00E+00	3,51E-21
S <sub>2</sub>	2,20E-20	0,00E+00	2,20E-20
S <sub>3</sub>	2,46E-20	0,00E+00	2,46E-20
S <sub>4</sub>	2,79E-20	0,00E+00	2,79E-20
S <sub>5</sub>	3,11E-20	0,00E+00	3,11E-20
S <sub>6</sub>	3,47E-20	0,00E+00	3,47E-20
S <sub>7</sub>	3,50E-20	0,00E+00	3,50E-20
S <sub>8</sub>	3,60E-20	0,00E+00	3,60E-20
SO	1,99E-20	0,00E+00	1,99E-20
SO <sub>2</sub>	7,04E-20	0,00E+00	7,04E-20
SO <sub>3</sub>	5,63E-20	0,00E+00	5,63E-20
S <sub>2</sub> O	3,05E-20	0,00E+00	3,05E-20
P(c)	1,12E-11	0,00E+00	1,12E-11
P	1,67E-12	0,00E+00	1,67E-12
P <sub>2</sub>	8,64E-12	0,00E+00	8,64E-12
P <sub>3</sub>	9,59E-12	0,00E+00	9,59E-12
P <sub>4</sub>	2,25E-11	0,00E+00	2,25E-11
PO	6,29E-12	0,00E+00	6,29E-12
PO <sub>2</sub>	1,08E-11	0,00E+00	1,08E-11
P <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	3,27E-11	3,49E-11	2,21E-12
P <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	3,58E-11	3,82E-11	2,45E-12

Окончание таблицы 11

Вещество	$n_{i, \text{полное}}$	$n_{i, \text{сокращ}}$	$ \Delta n_i $
P <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	3,33E-11	3,56E-11	2,29E-12
P <sub>3</sub> O <sub>6</sub>	7,57E-11	8,10E-11	5,23E-12
P <sub>4</sub> O <sub>6</sub>	7,50E-11	8,01E-11	5,14E-12
P <sub>4</sub> O <sub>7</sub>	1,58E-10	1,68E-10	1,07E-11
P <sub>4</sub> O <sub>8</sub>	2,55E-10	2,86E-20	2,55E-10
P <sub>4</sub> O <sub>9</sub>	6,65E-20	7,54E-20	8,89E-21
P <sub>4</sub> O <sub>10</sub> (c)	1,18E-04	1,18E-04	1,73E-13
P <sub>4</sub> O <sub>10</sub>	9,61E-20	1,09E-19	1,30E-20
PS	8,43E-12	0,00E+00	8,43E-12
C(c)	1,37E-01	1,37E-01	1,48E-10
C	4,16E-21	0,00E+00	4,16E-21
C <sub>2</sub>	1,13E-20	0,00E+00	1,13E-20
C <sub>3</sub>	2,41E-20	0,00E+00	2,41E-20
C <sub>4</sub>	2,72E-20	0,00E+00	2,72E-20
C <sub>5</sub>	4,03E-20	0,00E+00	4,03E-20
CO	7,35E-18	0,00E+00	7,35E-18
CO <sub>2</sub>	1,91E-17	2,14E-17	2,34E-18
C <sub>2</sub> O	6,22E-19	0,00E+00	6,22E-19
C <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	3,12E-18	0,00E+00	3,12E-18
CS	1,76E-20	0,00E+00	1,76E-20
CS <sub>2</sub>	5,74E-20	0,00E+00	5,74E-20
COS	1,79E-19	0,00E+00	1,79E-19
CP	2,71E-12	0,00E+00	2,71E-12
Fe(c)	4,00E-02	4,00E-02	1,80E-10
Fe	6,36E-20	0,00E+00	6,36E-20
FeO(c)	3,89E-16	4,53E-16	6,45E-17
FeO	1,59E-19	0,00E+00	1,59E-19
FeO <sub>2</sub>	1,21E-18	0,00E+00	1,21E-18
Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> (c)	4,05E-16	4,76E-16	7,11E-17
Fe <sub>3</sub> O <sub>4</sub> (c)	8,13E-01	8,13E-01	3,11E-10
FeS(c)	9,23E-03	9,23E-03	1,12E-11
FeS	5,36E-11	0,00E+00	5,36E-11
FeS <sub>2</sub> (c)	2,27E-18	2,57E-18	3,01E-19
Fe <sub>3</sub> C(c)	4,93E-16	5,88E-16	9,47E-17
O <sub>3</sub>	1,51E-19	0,00E+00	1,51E-19
Mn(c)	7,43E-12	0,00E+00	7,43E-12
Mn	2,65E-12	0,00E+00	2,65E-12
MnO(c)	8,58E-20	9,91E-20	1,33E-20
MnO	4,48E-12	0,00E+00	4,48E-12
MnO <sub>2</sub> (c)	5,89E-11	0,00E+00	5,89E-11
MnO <sub>2</sub>	1,65E-11	0,00E+00	1,65E-11
Mn <sub>2</sub> O <sub>3</sub> (c)	6,49E-11	7,01E-11	5,22E-12
Mn <sub>2</sub> O <sub>7</sub> (c)	3,82E-11	0,00E+00	3,82E-11
Mn <sub>3</sub> O <sub>4</sub> (c)	1,42E-10	1,54E-10	1,13E-11
MnS(c)	1,68E-04	1,68E-04	8,17E-14
MnS	6,36E-12	0,00E+00	6,36E-12
MnS <sub>2</sub> (c)	1,17E-10	1,25E-20	1,17E-10
Mn <sub>3</sub> C(c)	1,78E-11	0,00E+00	1,78E-11
Mn <sub>7</sub> C <sub>3</sub> (c)	3,40E-11	0,00E+00	3,40E-11

Для оставшихся 17 температур были получены аналогичные таблицы. В табл. 12 показаны максимальные по модулю отклонения в составах для семи задач на интервале температур от 300 до 2000 К с шагом в 100 градусов.

Анализ данных табл. 12 показывает, что максимальное отклонение по составу между полным решением и решением с сокращением размерности матрицы не превышает  $10^{-3}$ .

Объединение успешных стратегий 1, 2 и 4 в одно условие показало сокращение времени расчета. Результаты сравнения скоростей вычисления приведены в табл. 13.

Таблица 12. Максимальные отклонения в полученном составе между полным и сокращенным решениями

Задача	$\max \Delta n_i $
1	0
2	0,0002393
3	0,000877462
4	0,000000425
5	0,000071423
6	0,000977638
7	0,000411234

Таблица 13. Сравнение скорости вычисления с сокращением количества переменных и без сокращения

Количество неиз- вестных	Количество то- чек рас- чета	Есть со- кращение	Время вычисле- ния, мс
15	271	Да	545
15	271	Нет	389
79	271	Да	4429
79	271	Нет	9253
153	171	Да	11602
153	171	Нет	36825
173	171	Да	12476
173	171	Нет	46713
214	71	Да	11223
214	71	Нет	43123
354	36	Да	20039
354	36	Нет	82530
384	36	Да	24264
384	36	Нет	104327

Анализ данных табл. 13 показывает, что сокращение количества переменных, за исключением первой тестовой задачи, дает ускорение от 2 до 4,2 раза. При этом половина прироста скорости достигается за счет исключения переменных, которые до-

стигли определенного минимального порога, а вторая половина – за счет уменьшения начального количества неизвестных в уравнении.

На рис. 4 показан график, аналогичный графику на рис. 2, но в данном случае использовалось сокращение неизвестных на первой итерации с 384 до 304, за счет этого общее количество итераций также сократилось – с 72 до 35.

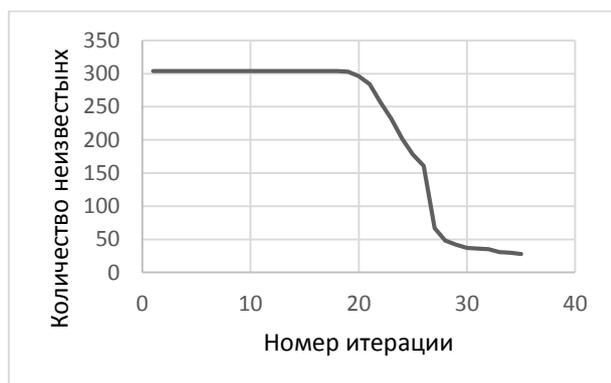


Рис. 4. График зависимости количества неизвестных от номера итерации при использовании всех успешных стратегий

**Выводы.** Если при решении нелинейного уравнения большой размерности большая часть неизвестных равна нулю, как в задаче нахождения равновесного состава, то уменьшение количества неизвестных позволяет ускорить процесс вычисления. Ускорение удалось достичь за счет: 1) исключения из набора возможных переменных при поиске минимума приведенной энергии Гиббса веществ с положительным значением; 2) исключения переменных, которые достигли определенного минимального порога. Отклонение по составу при решении задачи с сокращением неизвестных не превышает  $10^{-3}$ . При решении задачи с 79 неизвестными удалось сократить время вычисления в 2 раза, при решении задачи с 384 неизвестными – в 4,2 раза. Ускорение по времени расчета за счет сокращения количества переменных позволит проводить большее количество вычислительных экспериментов за одно и то же время.

#### Список литературы

1. **Search** for eutectic high entropy alloys by integrating high-throughput CALPHAD, machine learning and experiments / Zeng Y., Man M., Aitken Z., etc. // *Materials & Design*. – 2024. – Vol. 241. – P. 112929. DOI: 10.1016/j.matdes.2024.112929

2. **Сеченов П.А., Кожемяченко В.И., Рыбенко И.А.** Параллельная реализация алгоритма расчета равновесного состава в программном комплексе T-Energy // *Вестник Поволжского государственного технологического университета*. Сер.: Радиотехнические и инфокоммуникационные системы. – 2023. – № 1(57). – С. 64–73.

3. **Чернышева Л.П., Харитонов Д.П.** Эффективное использование гетерогенных вычислительных систем // *Вестник ИГЭУ*. – 2012. – Вып. 5. – С. 47–51.

4. **Иванов В.Н.** Алгоритмы решения уравнений движения в импульсах Пуассона систем твердых тел со структурой дерева // *Вестник Пермского университета. Математика. Механика. Информатика*. – 2017. – Вып. 4(39). – С. 25–31. DOI: 10.17072/1993-0550-2017-4-25-31.

5. **Свириденко А.Б.** Прямые мультипликативные методы для разреженных матриц. Несимметричные линейные системы // *Компьютерные исследования и моделирование*. – 2016. – Т. 8, № 6. – С. 833–860.

6. **Семушин И.В.** Еще раз о больших обратных матрицах: от формализмов к реализации // *Автоматизация процессов управления*. – 2017. – № 4(50). – С. 36–41.

7. **Сеченов П.А., Рыбенко И.А.** Численный метод и математическая модель нахождения равновесного состава термодинамической системы программного комплекса T-Energy // *Вестник Дагестанского государственного технического университета. Технические науки*. – 2022. – Т. 49. – № 4. – С. 104–112. DOI: 10.21822/2073-6185-2022-49-4-104-112.

8. **Мищенкова О.В., Воеводина О.А.** Применение LU- и QR-методов при решении задачи о равновесном составе продуктов химической реакции // *Вестник ИжГТУ имени М.Т. Калашникова*. – 2014. – № 3(63). – С. 172–176.

9. **Крюков А.В., Закарюкин В.П., Абрамов Н.А.** Ситуационное управление режимами систем тягового электроснабжения на основе методов нечеткой кластеризации // *Вестник ИГЭУ*. – 2010. – Вып. 2. – С. 36–41.

10. **Белоусов Ф.А., Хачатрян Н.К., Невалин И.В.** Снижение размерности в задаче оптимального управления парком грузовых вагонов с использованием беспилотных локомотивов // *Бизнес-информатика*. – 2022. – Т. 16, № 2. – С. 7–20. DOI: 10.17323/2587-814X.2022.2.7.20

11. **Компьютерное моделирование** оценивания координат точки беспроводного доступа по измерениям мощности принимаемых сигналов / Д.Н. Лавров, О.А. Вишнякова, Е.И. Дудяк, С.Ю. Лаврова // *Математические структуры и моделирование*. – 2014. – № 2(30). – С. 62–76.

#### References

1. Zeng, Y., Man, M., Ng, Ch.K., Aitken, Z., Bai, K., Wu, D., Lee, J.J., Ng, S.R., Wei, F.,

Wang, P., Tan, D.Ch.Ch., Zhang, Y.-W. Search for eutectic high entropy alloys by integrating high-throughput CALPHAD, machine learning and experiments. *Materials & Design*, 2024, vol. 241, pp. 112929. DOI: 10.1016/j.matdes.2024.112929.

2. Sechenov, P.A., Kozhemyachenko, V.I., Rybenko, I.A. Parallelnaya realizatsiya algoritma rascheta ravnovesnogo sostava v programnom komplekse T-Energy [Parallel implementation of the equilibrium composition calculation algorithm in the T-Energy software package]. *Vestnik Povolzhskogo gosudarstvennogo tekhnologicheskogo universiteta. Seriya: Radiotekhnicheskie i infokommunikatsionnye sistemy*, 2022, no. 1(57), pp. 64–73.

3. Chernysheva, L.P., Kharitonov, D.P. Effektivnoe ispol'zovanie geterogennykh vychislitel'nykh sistem [Effective usage of heterogeneous computing systems]. *Vestnik IGEU*, 2012, issue 5, pp. 47–51.

4. Ivanov, V.N. Algoritmy resheniya uravneniy dvizheniya v impul'sakh Puassona sistem tverdykh tel so strukturoy dereva [Algorithms for solving the equations of motion with Poisson impulses of multi-body systems with tree structure]. *Vestnik Permskogo Universiteta. Matematika, Mekhanika, Informatika*, 2017, issue 4(39), pp. 25–31. DOI: 10.17072/1993-0550-2017-4-25-31.

5. Sviridenko, A.B. Pryamyie mul'tiplikativnye metody dlya razrezhennykh matrits. Nesimmetrichnye lineynye sistemy [Direct multiplicative methods for sparse matrices. Unbalanced linear systems]. *Komp'yuternye issledovaniya i modelirovanie*, 2016, vol. 8, no. 6, pp. 833–860.

6. Semushin, I.V. Eshche raz o bol'shikh obratnykh matritsakh: ot formalizmov k realizatsii [Once again about large inverse matrices: from formalisms to implementation]. *Avtomatizatsiya protsessov upravleniya*, 2017, vol. 50, no. 4, pp. 36–41.

7. Sechenov, P.A., Rybenko, I.A. Chislennyi metod i matematicheskaya model' nakhozheniya

ravnovesnogo sostava termodinamicheskoy sistemy programmno kompleksa T-Energy [Numerical method and mathematical model for finding the equilibrium composition of the thermodynamic system of the T-Energy software package]. *Vestnik Dagestanskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta. Tekhnicheskie nauki*, 2022, vol. 49, no. 4, pp. 104–112. DOI: 10.21822/2073-6185-2022-49-4-104-112.

8. Mishchenkova, O.V., Voevodina, O.A. Primenenie LU- i QR-metodov pri reshenii zadachi o ravnovesnom sostave produktov khimicheskoy reaktsii [Application of LU- and QR-methods to solve the task on equilibrium structure of products of chemical reaction]. *Vestnik IzhGTU imeni M.T. Kalashnikova*, 2014, vol. 63, no. 3, pp. 172–176.

9. Kryukov, A.V., Zakaryukin, V.P., Abramov, N.A. Situatsionnoe upravlenie rezhimami sistem tyagovogo elektrosnabzheniya na osnove metodov nechetkoy klasterizatsii [Situation control of modes of railway electric supply system based on fuzzy clusterization methods]. *Vestnik IGEU*, 2010, issue 2, pp. 36–41.

10. Belousov, F.A., Khachatryan, N.K., Nevolin, I.V. Snizhenie razmernosti v zadache optimal'nogo upravleniya parkom gruzovykh vagonov s ispol'zovaniem bespilotnykh lokomotivov [Reduction of dimension in the problem of optimal management of a freight cars fleet using unmanned locomotives]. *Biznes-informatika*, 2022, vol. 16, no. 2, pp. 7–20. DOI: 10.17323/2587-814X.2022.2.7.20.

11. Lavrov, D.N., Vishnyakova, O.A., Dudyak, E.I., Lavrova, S.Yu. Komp'yuternoe modelirovanie otsenivaniya koordinat toчки besprovodnogo dostupa po izmereniyam moshchnosti prinimayemykh signalov [Computer modeling of estimating of wireless access point coordinates by measuring the received signal power]. *Matematicheskie struktury i modelirovanie*, 2014, vol. 30, no. 2, pp. 62–76.