

PAD 编程技术在化学中的应用(Ⅱ)

化学反应式配平

郑 向 敏*

(应用化学系)

摘要 本文应用 PAD 编程技术,借助计算机配平化学反应方程式,使化学反应方程式的配平机器化、简单化,同时也解决了某些复杂反应方程式的配平问题。

关键词 问题分析图(PAD), 化学反应, 方程式, 配平

0 前言

当前,计算机软件的发展已进入软件工程时代,出现了以图形为工具表现软件设计、制造、检查和维护的工程方法。问题分析图(Problem Analysis Diagram,简称 PAD)就是当前一种最有生命力的软件设计表现法^[1-3]。PAD 是在改善 Warnier 图的基础上产生的一种二维树形结构的软件过程的逻辑,是一种可视的逻辑树图^[2]。借助它进行结构化程序设计能简洁地表现程序逻辑,提高程序设计、制造、检查和编辑效率。除此之外,在 PAD 系统支持下,只要向计算机键入 PAD 图,计算机就能根据所键入的 PAD 图自动编译出相应的源程序并运算程序、输出运算结果,从而减少非计算机专业人员在程序编辑中所遇到的许多麻烦,提高工作效率。

本文采用上述的 PAD 结构编程技术,编制了一个化学反应方程式配平的通用 PAD 图,并利用该图对某些复杂的化学反应方程式进行配平。

1 方法与实例

化学反应方程式的配平有多种方法,随着计算机在化学中的应用,代数法配平化学反应方程式已逐步受到重视^[4-6]。代数法不仅有利于编制各种化学反应方程式配平的通用程序,而且有利于某些复杂反应方程式的配平。采用上述 PAD 结构编程技术,按求解一次多元方程的代数方法所编制的化学反应方程式配平的通用 PAD 图如图 1 所示。

* 本文 1989-12-21 收到。

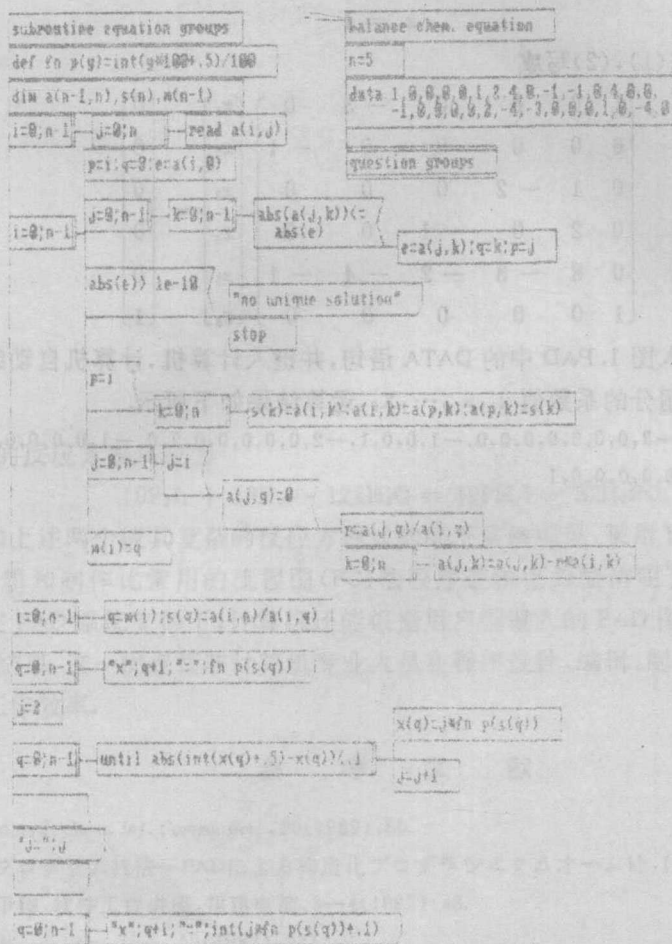


图1 化学反应方程式配平的通用 PAD 图

PAD 编程技术可适用于任何高级语言的编程。图 1 是采用 BASIC 语言编制的 PAD 图。把图 1 键入计算机，在 PAD 系统支持下，计算机则可自动将所键入的图 1 编译成化学反应方程式配平通用的源程序并根据所输入的数据对所给出化学反应方程式进行配平。

下面介绍二个具体运算实例。

(1) 配平反应式 $\text{Pb}(\text{N}_3)_2 + \text{Cr}(\text{MnO}_4)_2 \longrightarrow \text{Cr}_2\text{O}_3 + \text{MnO}_2 + \text{Pb}_3\text{O}_4 + \text{NO}$ 。若设配平后的反应式为 $x_1\text{Pb}(\text{N}_3)_2 + x_2\text{Cr}(\text{MnO}_4)_2 = x_3\text{Cr}_2\text{O}_3 + x_4\text{MnO}_2 + x_5\text{Pb}_3\text{O}_4 + x_6\text{NO}$ ，则可写出上述反应式等号两边各元素的原子数之间关系式为

$$\begin{array}{rcl}
 \text{Pb:} & x_1 - 3x_5 & = 0 \\
 \text{N:} & 6x_1 - x_6 & = 0 \\
 \text{Cr:} & x_2 - 2x_3 & = 0 \\
 \text{Mn:} & 2x_2 - x_4 & = 0 \\
 \text{O:} & 8x_2 - 3x_3 - 2x_4 - 4x_5 - x_6 & = 0
 \end{array} \quad (1)$$

并令

$$x_1 = 1 \quad (2)$$

采用矩阵符号,可将式(1),(2)写成

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & -3 & 0 \\ 6 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & -2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 8 & -3 & -2 & -4 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \\ x_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

将上述矩阵各数值填入图 1. PAD 中的 DATA 语句,并键入计算机,计算机自动编译,运算后可获得反应式中各反应组分的系数值 x_1, x_2, \dots, x_6 ,运算结果如下所示.

```
20 DATA 1,0,0,0,-3,0,0,6,0,0,0,0,-1,0,0,1,-2,0,0,0,0,0,2,0,-1,0,0,0,0,8,-3,-2,-4,
-1,0,1,0,0,0,0,0,1
```

```
run
```

```
N=? 6
```

```
x1=1
```

```
x2=2.93
```

```
x3=1.47
```

```
x4=5.87
```

```
x5=.33
```

```
x6=6
```

```
J=15
```

```
x1=15
```

```
x2=44
```

```
x3=22
```

```
x4=88
```

```
x5=5
```

```
x6=90
```

```
OK
```

因此,配平后的反应方程式应为



(2) 配平反应 $\text{P}_2\text{I}_4 + \text{P}_4 + \text{H}_2\text{O} \longrightarrow \text{PH}_4\text{I} + \text{H}_3\text{PO}_4$. 若设配平后的反应式为 $x_1\text{P}_2\text{I}_4 + x_2\text{P}_4 + x_3\text{H}_2\text{O} = x_4\text{PH}_4\text{I} + x_5\text{H}_3\text{PO}_4$, 按(1)的方法,同样可以写出矩阵

$$\begin{bmatrix} 2 & 4 & 0 & -1 & -1 \\ 4 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 4 & -3 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -4 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

把上述矩阵各数值填入图 1. PAD 中的 DATA 语句,并键入计算机后运算结果如下所示

```
20 DATA 2,4,0,-1,-1,0,4,0,0,-1,0,0,0,0,2,-4,-3,0,0,0,1,0,-4,0,1,0,0,0,0,1
```

```

run
N=7.5
x1=1
x2=1.3
x3=12.8
x4=4
x5=3.2
J=10
x1=10
x2=13
x3=128
x4=40
x5=32
OK

```

可见,配平后的反应方程式应为



由图1和上述两个极其复杂的反应方程式的配平实例可见,采用PAD结构编程技术进行程序设计、编辑和制作比常用的流程图(FC)法程序逻辑更为简洁明了,透明度高且易读、易记、易理解;在PAD系统支持下,计算机还能根据用户所键入的PAD图自动编译程序、运算程序、输出运算结果.这一优点使非计算机专业人员在程序设计、编辑、制作的检查中避免了许多麻烦而提高工作效率.

参 考 文 献

- [1] Zheng Xianmin, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, 29(1989), 60.
- [2] 二村良彦, *プログラム技法—PADによる構造化プログラミング* オーム社, (1985).
- [3] 严桂兰, 刘甲耀, 软件工程讲座, 福建电脑, 3—4(1986), 48.
- [4] Kennedy, J. H., *J. Chem. educ.*, 59(1982), 523.
- [5] Blakely, G. R., *J. Chem. educ.*, 59(1982), 728.

PAD Programming and Its application in Chemistry (II)

Balancing equation of Chemical Reaction

Zheng Xianmin

(Department of Applied Chemistry)

Abstract for balancing equation of chemical reaction in computerized way, PADprogramming technique is applied in this paper. The balancing of some complex equations could be solved by PAD programming as well.

Key words problem analysis diagram(PAD), chemical reaction, equation, balancing