Решение одной обратной задачи химического равновесия

Хамисов О.В., Донской И.Г.
ИСЭМ СО РАН, Иркутск, Россия
khamisov@isem.irk.ru

Рассматривается следующая задача параметрической оптимизации, соответствующая нахождению равновесия веществ в газовой среде,

$$f(x,T,P) = \sum_{j=1}^{n} \left[\mu_j^0(T) + RT \ln\left(\frac{Px_i}{\sigma(x)}\right) \right] x_j \to \min_x, \tag{1}$$

$$Ax = b, \tag{2}$$

$$x \geqslant 0, \tag{3}$$

T — температура, P — давление, R — универсальная газовая постоянная, $x \in \mathbb{R}^n$ — вектор количеств молей реагирующих веществ, A — $m \times n$ матрица содержания элементв в веществах, $b \in \mathbb{R}^m$ — вектор количеств молей элементов,

$$\sigma(x) = \sum_{j=1}^{n} x_j.$$

Элементы матрицы A неотрицательны, матрица A не содержит нулевых столбцов, элементы вектора b положительны. Функции $\mu_j^0 : \mathbb{R} \to \mathbb{R},\ j = 1, \ldots, n$ — непрерывно дифференцируемые функции, представимые в виде разности двух выпуклых функций. Параметры T и P варьируются в заданных пределах, $T \in [\underline{T}, \overline{T}],\ P \in [\underline{P}, \overline{P}]$. Целевая функция задачи (1)-(3) — строго выпуклая функция переменной x, поэтому решение $x^*(T,P)$ этой задачи единственно.

Задано целевое множество

$$D = \{x \in \mathbb{R}^n_+ : x_j \leqslant \overline{x}_j,\ j \in \overline{J},\ x_j \geqslant \underline{x}_j,\ j \in \underline{J}\},$$

$\overline{J},\ \underline{J} \subset \{1, \ldots, n\}$. Требуется определить параметры $\hat{T} \in [\underline{T}, \overline{T}],\ \hat{P} \in [\underline{P}, \overline{P}]$, при которых $x^*(\hat{T}, \hat{P}) \in D$ или установить, что таких параметров а заданных пределах не существует.

Для решения поставленной обратной задачи используется аппарат нелинейных опорных функций, ранее использованный для решения задач выпуклой параметрической оптимизации [1]. Приводятся результаты чнсленных экспериментов.

Список литературы

1. *Хамисов О. В.* Оптимизации функции оптимального значения в задачах выпуклого параметрического программирования // Тр. Ин-та математики и механики УрО РАН. 2023. Т. 29, № 3. С. 247–260.