

## ОБРАТНАЯ ОПТИМИЗАЦИЯ В ЗАДАЧЕ ВЫБОРА НАЧАЛЬНОГО СОСТАВА РЕАГИРУЮЩИХ ВЕЩЕСТВ

Хамисов О.В., Шаманский В.А., Козлова М.А.

*Институт систем энергетики им.Л.А. Мелентьева СО РАН, Иркутск*  
*khamisov@isem.irk.ru*

Прямая задача определения равновесного состояния реагирующих веществ в газовой среде при постоянном давлении имеет следующий вид [1]

$$f(T, x) \rightarrow \min_x, Ax = b, \quad (1)$$

где  $f$  — некоторая термодинамическая функция, минимум которой характеризует искомое равновесное состояние (например, функция Гиббса),  $x \in \mathbb{R}^n$  — вектор количеств молей реагирующих веществ,  $A — m \times n$  — матрица содержания элементов в веществах,  $b$  — вектор количеств молей элементов,  $T$  — температура.

Известно [1], что задача (1) есть задача выпуклого программирования, имеющая при заданных параметрах  $A, b$  и  $T$  единственное решение  $x^{eq}$ . Вектор  $b$  определяется начальным составом  $x^0$ ,  $b = Ax^0$ .

Заданы индексные множества  $J_N \subset \{1, 2, \dots, n\}$  — номера вредных веществ и  $J_P \subset \{1, 2, \dots, n\}$  — номера полезных веществ. Суммарный вред определяется величиной  $\sum_{j \in J_N} \alpha_j x_j^{eq}$ , суммарная польза — величиной  $\sum_{j \in J_P} \beta_j x_j^{eq}$ . Здесь  $\alpha_j$  и  $\beta_j$  — оценочные весовые характеристики вредности и полезности компонентов реакционной среды.

Начальный состав можно выбирать из некоторого множества  $X^0$ , заданы максимально возможный суммарный показатель выхода вредных веществ  $\nu$  и минимально возможный показатель выхода полезных веществ  $\eta$ . Температура  $T$  должна находиться в пределах  $\underline{T} \leq T \leq \bar{T}$ , определяемых технологическими условиями проведения процесса. Решаемая обратная задача состоит в следующем. Требуется найти такой начальный состав  $\hat{x}^0 \in X^0$  и такой температурный режим  $\hat{T} \in [\underline{T}, \bar{T}]$ , что соответствующее решение  $\hat{x}^{eq}$  задачи (1) при  $b = A\hat{x}^0$  и  $T = \hat{T}$  удовлетворяет неравенствам

$$\sum_{j \in J_N} \alpha_j \hat{x}_j^{eq} \leq \nu, \sum_{j \in J_P} \beta_j \hat{x}_j^{eq} \geq \eta. \quad (2)$$

Для решения поставленной задачи используется методология нелинейных опорных функций [2].

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Каганович Б.М., Кейко А.В., Шаманский В.А., Ширкалин И.А., Зароднюк М.С. Технология термодинамического моделирования. Редукция моделей движения к моделям покоя. — Новосибирск: Наука, 2010. — 236 с.
2. Хамисов О.В. Невыпуклая оптимизация с нелинейными опорными функциями // Труды ИММ УрО РАН, т.12, №2, 2013, с. 295–306