

СРАВНЕНИЕ ПРОГРАММНЫХ РЕАЛИЗАЦИЙ МЕТОДА НЕОПРЕДЕЛЕННЫХ МНОЖИТЕЛЕЙ ЛАГРАНЖА И МЕТОДА ШТРАФНЫХ ФУНКЦИЙ ПРИ РЕШЕНИИ ЗАДАЧИ ОПРЕДЕЛЕНИЯ РАВНОВЕСНОГО СОСТАВА НА ПРИМЕРЕ СИСТЕМЫ С-О

П. А. Сеченов¹, И. А. Рыбенко²

^{1,2}Сибирский государственный индустриальный университет, Новокузнецк, Россия
¹pavesa89@mail.ru, ²tybenkoi@mail.ru

Аннотация. Актуальность и цели. Задача нахождения равновесного состава сложной многокомпонентной системы выполняется путем определения минимума приведенной энергии Гиббса при ограничениях, связанных с учетом баланса массы. Материалы и методы. Рассмотрен выбор методов перехода от задачи условной оптимизации к задаче безусловной оптимизации. Сравнивались методы неопределенных множителей Лагранжа и метод штрафных функций с различными параметрами. Выбор метода перехода от задачи безусловной оптимизации к задаче условной оптимизации повлиял на вид целевой функции приведенной энергии Гиббса. Результаты. При изменении целевой функции потребовалась модификация алгоритма определения первых и вторых производных в методе Ньютона – Рафсона, который используется для решения системы нелинейных алгебраических уравнений. Выводы. Проведен сравнительный анализ двух программных реализаций метода штрафных функций (с постоянным значением штрафа и с монотонно возрастающим значением штрафа) и метода множителей Лагранжа.

Ключевые слова: термодинамическая система, равновесный состав, поиск минимума приведенной энергии Гиббса, метод неопределенных множителей Лагранжа, метод штрафных функций

Для цитирования: Сеченов П. А., Рыбенко И. А. Сравнение программных реализаций метода неопределенных множителей Лагранжа и метода штрафных функций при решении задачи определения равновесного состава на примере системы С-О // Модели, системы, сети в экономике, технике, природе и обществе. 2025. № 3. С. 127–140. doi: 10.21685/2227-8486-2025-3-10

COMPARISON OF SOFTWARE IMPLEMENTATIONS OF THE METHOD OF UNCERTAIN LAGRANGE MULTIPLIERS AND THE METHOD OF PENALTY FUNCTIONS IN SOLVING THE PROBLEM OF DETERMINING THE EQUILIBRIUM COMPOSITION USING THE EXAMPLE OF THE C-O SYSTEM

P.A. Sechenov¹, I.A. Rybenko²

^{1,2}Siberian State Industrial University, Novokuznetsk, Russia
¹pavesa89@mail.ru, ²tybenkoi@mail.ru

© Сеченов П. А., Рыбенко И. А., 2025. Контент доступен по лицензии Creative Commons Attribution 4.0 License / This work is licensed under a Creative Commons Attribution 4.0 License.

Abstract. *Background.* The problem of finding the equilibrium composition of a complex multicomponent system is accomplished by determining the minimum of the reduced Gibbs energy under constraints associated with taking into account the mass balance. *Materials and methods.* The choice of methods for transition from a conditional optimization problem to an unconditional optimization problem is considered. The methods of undetermined Lagrange multipliers and the penalty function method with different parameters were compared. The choice of the method for transition from the unconditional optimization problem to the conditional optimization problem affected the form of the objective function of the reduced Gibbs energy. *Results.* When changing the objective function, it was necessary to modify the algorithm for determining the first and second derivatives in the Newton – Raphson method, which is used to solve a system of nonlinear algebraic equations. *Conclusions.* A comparative analysis of two software implementations of the penalty function method is carried out: with a constant penalty value and with a monotonically increasing penalty value, and the Lagrange multiplier method.

Keywords: thermodynamic system, equilibrium composition, search for the minimum of the reduced Gibbs energy, method of undetermined Lagrange multipliers, penalty function method

For citation: Sechenov P.A., Rybenko I.A. Comparison of software implementations of the method of uncertain Lagrange multipliers and the method of penalty functions in solving the problem of determining the equilibrium composition using the example of the C-O system. *Modeli, sistemy, seti v ekonomike, tekhnike, prirode i obshchestve = Models, systems, networks in economics, technology, nature and society.* 2025;(3):127–140. (In Russ.). doi: 10.21685/2227-8486-2025-3-10

Введение

Проведен сравнительный анализ применения численных методов оптимизации при решении задачи определения равновесного состава термодинамической системы, которая решается путем поиска минимума приведенной энергии Гиббса. Эта задача представляет собой задачу нелинейного программирования, т.е. задачу с ограничениями на входные параметры системы. При решении рассматривали два метода нелинейного программирования: метод множителей Лагранжа и метод штрафных функций. С помощью метода множителей Лагранжа задача с ограничениями типа равенств преобразуется в эквивалентную задачу безусловной оптимизации, в которой добавляются неизвестные параметры, определяемые как множители Лагранжа [1]. Метод штрафных функций является одним из наиболее распространенных методов решения задач нелинейного программирования [2]. Вспомогательная функция в методе штрафных функций выбирается так, чтобы она совпадала с минимизированной функцией внутри области допустимых решений и быстро возрастала вне ее [3]. Метод штрафных функций, так же как и метод неопределенных множителей Лагранжа, позволяет перейти от функции с ограничениями к функции без них [4].

Целью данной работы является выбор метода для ограничений типа равенств в задаче нахождения равновесного состава на примере системы модельной термодинамической системы С-О.

Материалы и методы

Задача нахождения равновесного состава сложной многокомпонентной системы сводится к поиску минимума приведенной энергии Гиббса [5].

Необходимо найти минимум функции приведенной энергии Гиббса

$$F(T, \bar{x}) \rightarrow \min \quad (1)$$

при ограничениях, учитывающих баланс сохранения массы.

На рис. 1 изображена схема применения численных методов при решении задачи определения равновесного состава термодинамической системы. Данное исследование посвящено выбору метода нелинейного программирования для перехода от задачи условной оптимизации к задаче безусловной оптимизации.

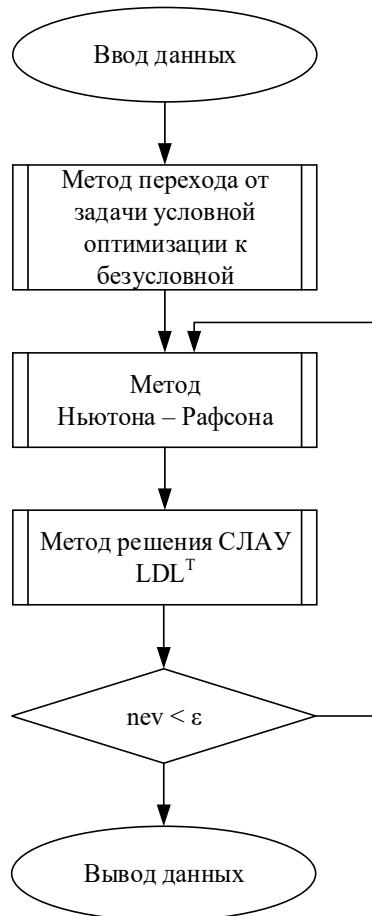


Рис. 1. Применение численных методов при нахождении равновесного состава сложной многокомпонентной системы

Среди аналитических методов решения оптимизационных задач перехода от задачи условной оптимизации к задаче безусловной оптимизации особую роль играет метод множителей Лагранжа [6], который будет сравниваться с методом штрафных функций. В методе множителей Лагранжа количество неизвестных увеличивается за счет добавления неизвестных для каждого ограничения [7]. Этот выбор влияет на вид функции задачи безусловной оптимизации, а следовательно, и на определение первых и вторых производных в методе Ньютона – Рафсона, который используется для решения системы

нелинейных алгебраических уравнений. Данный метод был выбран, потому что методы первого порядка просты в реализации, но работают медленно. Методы второго порядка определяют экстремум функции за гораздо меньшее число итераций [8], но сложны и ресурсоемки, т.е. одна итерация занимает много времени и требует большого количества памяти [9]. Выбор метода LDL^T [9] для решения системы линейных алгебраических уравнений рассмотрен в статье [10]. Данный метод применяется для симметричных положительно определенных матриц, и в отличие от метода Холецкого в нем не применяется операция извлечения квадратного корня [9].

Так как применение метода неопределенных множителей Лагранжа было представлено ранее в статье [5], рассмотрим метод штрафных функций применительно к задаче нахождения равновесного состава системы С-О. Со-гласно данным из термодинамической базы данных ТСИВ [11], возможно по-лучение 13 веществ: O, O₂, C(c), C, C₂, C₃, C₄, C₅, CO, CO₂, C₂O, C₃O₂, O₃.

Будем считать, что в системе С-О в равновесном состоянии возможно образование только четырех веществ: O₂, C(c), CO и CO₂. В рассматриваемой задаче количество вещества продуктов реакций представлено в табл. 1.

Таблица 1

Количество вещества в продуктах реакций для системы С-О

Количество веществ, моль	Продукты реакций			
	O ₂	C(c)	CO	CO ₂
O	2	0	1	0,5
C	1	1	1	1

Количество вещества для O₂, C(c), CO и CO₂ в функции обозначим соот-ветственно через переменные x₀, x₁, x₂ и x₃. Следует отметить, что у углерода стоит индекс (с) – конденсированная фаза, это означает, что углерод находится в твердом состоянии, остальные вещества – в газообразном состоянии.

Исходную функцию для приведенной энергии Гиббса с учетом состояния (твердое или газообразное) для четырех возможных веществ можно запи-сать в следующем виде:

$$F(T, \bar{x}) = c_0 x_0 + c_1 x_1 + c_2 x_2 + c_3 x_3 + x_0 \ln x_0 + x_2 \ln x_2 + x_3 \ln x_3 - (x_0 + x_2 + x_3) \ln(x_0 + x_2 + x_3), \quad (2)$$

где c_i – коэффициенты приведенной энергии Гиббса для определенного вещества, зависящие от температуры.

Функцию ограничений, отражающую закон сохранения массы, можно записать в следующем виде:

$$l(\bar{x}) = \mu \cdot ((2x_0 + x_2 + 2x_3 - 1)^l + (2x_1 + x_2 + x_3 - 1)^l), \quad (3)$$

где μ – первый параметр штрафной функции; l – второй параметр штрафной функции, целое число, $l = 1, 2, \dots, n$.

Тогда исходную функцию (2) с учетом ограничений можно преобразо-вать следующим образом:

$$\begin{aligned} F^*(T, \bar{x}) = & F(T, \bar{x}) + l(\bar{x}) = c_0 x_0 + c_1 x_1 + c_2 x_2 + c_3 x_3 + x_0 \ln x_0 + \\ & + x_2 \ln x_2 + x_3 \ln x_3 - (x_0 + x_2 + x_3) \ln(x_0 + x_2 + x_3) + \\ & + \mu \cdot ((2x_0 + x_2 + 2x_3 - 1)^l + (x_1 + x_2 + x_3 - 1)^l). \end{aligned} \quad (4)$$

Согласно алгоритму, изображенном на рис. 1, следующим этапом является применение метода Ньютона – Рафсона. В данном методе на каждой из итераций необходимо определить вектор невязки (вектор первых производных) и Гессиан (матрицу вторых частных производных). Реализация данной схемы осуществлялась двумя способами: на основе уравнения (4); с заменой $x_i = z_i^2$ в функции (4), которая показала хорошие результаты в методе неопределенных множителей Лагранжа.

В обоих случаях примем, что второй параметр метода штрафных функции l равен 2, т.е. будет использоваться квадратичный штраф.

Вариант реализации 1. Вектор невязки будет состоять из следующих компонентов:

$$\frac{\partial F}{\partial x_0} = -\ln(x_0 + x_2 + x_3) + \ln(x_0) + 4 \cdot \mu(2x_0 + x_2 + 2x_3 - 1) + c_0; \quad (5)$$

$$\frac{\partial F}{\partial x_1} = 2\mu(x_1 + x_2 + 2x_3 - 1) + c_1; \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial x_2} = & -\ln(x_0 + x_2 + x_3) + \ln x_2 + \mu(2 \cdot (2x_0 + x_2 + 2x_3 - 1) + \\ & + 2 \cdot (x_1 + x_2 + 2x_3 - 1)) + c_2; \end{aligned} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial x_3} = & -\ln(x_0 + x_2 + x_3) + \ln x_3 + \mu(4 \cdot (2x_0 + x_2 + 2x_3 - 1) + \\ & + 2 \cdot (x_1 + x_2 + 2x_3 - 1)) + c_3. \end{aligned} \quad (8)$$

В общем виде можно записать выражение для твердых веществ:

$$\frac{\partial F}{\partial x_{i(\text{tb})}} = \sum_{p=0}^P \left(2\chi_{i,p} \mu \cdot \left(\sum_{j=0}^J \chi_{j,p} x_j - O_p \right) \right) + c_i, \quad (9)$$

где p – переменная для количества ограничений от 0 до P ; χ – коэффициент, учитывающий количество вещества в продуктах реакций (см. табл. 1); i – переменная для определения индекса строки; j – переменная для определения индекса столбца; O – количество вещества исходных продуктов.

В общем виде формулу для газообразных веществ можно представить как

$$\frac{\partial F}{\partial x_{i(r)}} = \sum_{p=0}^P \left(2\chi_{i,p} \mu \cdot \left(\sum_{j=0}^J \chi_{j,p} x_j - O_p \right) \right) + c_i - \ln \sum_{j=0}^J x_{j(r)} + \ln x_{i(r)}. \quad (10)$$

Запишем полученные составляющие для первой строки Гессиана:

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x_0^2} = 8\mu - \frac{1}{x_0 + x_2 + x_3} + \frac{1}{x_0}; \quad (11)$$

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x_0 \partial x_1} = 0; \quad (12)$$

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x_0 \partial x_2} = 4\mu - \frac{1}{x_0 + x_2 + x_3}; \quad (13)$$

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x_0 \partial x_3} = 8\mu - \frac{1}{x_0 + x_2 + x_3}. \quad (14)$$

Вторая строка Гессиана будет определяться следующими соотношениями:

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x_1 \partial x_0} = 0; \quad (15)$$

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x_1^2} = 2\mu; \quad (16)$$

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x_1 \partial x_2} = 2\mu; \quad (17)$$

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x_1 \partial x_3} = 2\mu. \quad (18)$$

Третья строка Гессиана состоит из формул

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x_2 \partial x_0} = 4\mu - \frac{1}{x_0 + x_2 + x_3}; \quad (19)$$

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x_2 \partial x_1} = 2\mu; \quad (20)$$

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x_2^2} = 4\mu - \frac{1}{x_0 + x_2 + x_3} + \frac{1}{x_2}; \quad (21)$$

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x_2 \partial x_3} = 6\mu - \frac{1}{x_0 + x_2 + x_3}. \quad (22)$$

Четвертая строка Гессиана запишется в виде равенств

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x_3 \partial x_0} = 8\mu - \frac{1}{x_0 + x_2 + x_3}; \quad (23)$$

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x_3 \partial x_1} = 2\mu; \quad (24)$$

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x_3 \partial x_2} = 6\mu - \frac{1}{x_0 + x_2 + x_3}; \quad (25)$$

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x_3^2} = 10\mu - \frac{1}{x_0 + x_2 + x_3} + \frac{1}{x_3}. \quad (26)$$

Наблюдается следующая закономерность для вычисления формул:

1. Если $i = j$ и $(x_i$ и $x_j)$ газообразные вещества:

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x_i \partial x_j} = 2\mu \sum_{p=0}^P \chi_{i,p} \chi_{j,p} - \frac{1}{\sum_{j=0}^J x_{j(r)}} + \frac{1}{x_i}. \quad (27)$$

2. Если $i \neq j$ и $(x_i$ или $x_j)$ твердое вещество:

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x_i \partial x_j} = 2\mu \sum_{p=0}^P \chi_{i,p} \chi_{j,p} - \frac{1}{\sum_{j=0}^J x_{j(r)}}. \quad (28)$$

3. Если $i = j$ и $(x_i$ и $x_j)$ твердые вещества:

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x_i \partial x_j} = 2\mu \sum_{p=0}^P \chi_{i,p} \chi_{j,p}. \quad (29)$$

4. Если $i \neq j$ и $(x_i$ или $x_j)$ твердое вещество:

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x_i \partial x_j} = 2\mu \sum_{p=0}^P \chi_{i,p} \chi_{j,p}. \quad (30)$$

Для проверки формул (9), (10), (27)–(30) в общем виде дополнительно были рассмотрены задачи трех переменных: Fe(c), FeO(c), Fe₂O₃(c) – и задача от пяти переменных: O, O₂, C(c), CO, CO₂. При этом найденные первые и вторые производные записывались в тестовый пример в MS Excel. После чего первые и вторые производные для разных примеров сравнивались пошагово с программной реализацией.

Вариант реализации 2. В исходном уравнении (4) была произведена замена переменных на новую переменную в квадрате:

$$\begin{aligned} F^*(T, \bar{z}) &= F(T, \bar{z}) + l(\bar{z}) = c_0 z_0^2 + c_1 z_1^2 + c_2 z_2^2 + c_3 z_3^2 + \\ &+ z_0^2 \ln z_0^2 + z_2^2 \ln z_2^2 + z_3^2 \ln z_3^2 - (z_0^2 + z_2^2 + z_3^2) \ln(z_0^2 + z_2^2 + z_3^2) + \quad (31) \\ &+ \mu \cdot ((2z_0^2 + z_2^2 + 2z_3^2 - 1)^l + (z_1^2 + z_2^2 + z_3^2 - 1)^l). \end{aligned}$$

Вектор первых производных определяется по следующим формулам:

$$\frac{\partial F}{\partial x_0} = 2x_0 (4\mu \cdot (2x_0^3 + x_2^2 + 2x_3^2 - 1) + c_0 - \ln(x_0^2 + x_2^2 + x_3^2) + 2 \ln x_0); \quad (32)$$

$$\frac{\partial F}{\partial x_1} = 2x_1 (2\mu \cdot (x_1^3 + x_2^2 + x_3^2 - 1) + c_1); \quad (33)$$

$$\frac{\partial F}{\partial x_2} = 2x_2 (2\mu \cdot (2x_0^2 + x_1^2 + 2x_2^2 + 3x_3^2 - 1) + c_2 - \ln(x_0^2 + x_2^2 + x_3^2) + 2 \ln x_2); \quad (34)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial x_3} = & 2x_3 \left(2\mu \cdot (4x_0^2 + x_1^2 + 3x_2^2 + 5x_3^2 - 1) + c_3 - \right. \\ & \left. - \ln(x_0^2 + x_1^2 + x_2^2) + 2 \ln x_3 \right). \end{aligned} \quad (35)$$

Тогда в общем виде первая производная для твердого вещества определяется по формуле

$$\frac{\partial F}{\partial x_{i(\text{TB})}} = 2x_i \left(\sum_{p=0}^P \left(2\chi_{i,p}\mu \cdot \left(\sum_{j=0}^J \chi_{j,p} x_j^2 - O_p \right) \right) + c_i \right); \quad (36)$$

а первая производная для переменной по газообразному веществу имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial x_{i(r)}} = & 2x_i \left(\sum_{p=0}^P \left(2\chi_{i,p}\mu \cdot \left(\sum_{j=0}^J \chi_{j,p} x_j^2 - O_p \right) \right) + c_i - \right. \\ & \left. - \ln \sum_{j=0}^J x_{j(r)}^2 + 2 \ln x_{i(r)} \right). \end{aligned} \quad (37)$$

Первая строка матрицы Гессе определяется по формулам

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 F}{\partial x_0^2} = & 8 \cdot \mu \left(6x_0^2 + x_1^2 + 2x_3^2 - 1 \right) + 2c_0 - \\ & - 2 \ln \left(\ln(x_0^2 + x_1^2 + x_3^2) + \frac{2x_0^2}{x_0^2 + x_1^2 + x_3^2} \right) + 4(\ln x_0 + 1); \end{aligned} \quad (38)$$

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x_0 \partial x_1} = 0; \quad (39)$$

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x_0 \partial x_2} = 8 \cdot 2\mu x_0 x_2 - \frac{4x_0 x_2}{x_0^2 + x_1^2 + x_3^2}; \quad (40)$$

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x_0 \partial x_3} = 8 \cdot 4\mu x_0 x_3 - \frac{4x_0 x_3}{x_0^2 + x_1^2 + x_3^2}. \quad (41)$$

Вторая строка матрицы Гессе имеет вид

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x_1 \partial x_0} = 0; \quad (42)$$

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x_1^2} = 4\mu \cdot (3x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 - 1) + 2c_1; \quad (43)$$

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x_1 \partial x_2} = 8\mu x_1 c_2; \quad (44)$$

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x_1 \partial x_3} = 8\mu x_1 c_3. \quad (45)$$

Третья строка матрицы Гессе выражается с помощью формул

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x_2 \partial x_0} = 8 \cdot 2\mu x_2 x_0 - \frac{4x_2 x_0}{x_0^2 + x_1^2 + x_3^2}; \quad (46)$$

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x_2 \partial x_1} = 8\mu x_1 c_2; \quad (47)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 F}{\partial x_2^2} &= 4 \cdot \mu (2x_0^2 + x_1^2 + 6x_2^2 + 3x_3^2 - 1) + 2c_2 - \\ &- 2 \ln \left(\ln(x_0^2 + x_1^2 + x_3^2) + \frac{2x_2^2}{x_0^2 + x_1^2 + x_3^2} \right) + 4(\ln x_2 + 1); \end{aligned} \quad (48)$$

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x_2 \partial x_3} = 8 \cdot 3\mu x_2 x_3 - \frac{4x_2 x_3}{x_0^2 + x_2^2 + x_3^2}. \quad (49)$$

Последняя, четвертая, строка определяется по формулам

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x_3 \partial x_0} = 8 \cdot 4\mu x_3 x_0 - \frac{4x_3 x_0}{x_0^2 + x_2^2 + x_3^2}; \quad (50)$$

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x_3 \partial x_1} = 8\mu x_1 c_3; \quad (51)$$

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x_3 \partial x_2} = 8 \cdot 3\mu x_3 x_2 - \frac{4x_3 x_2}{x_0^2 + x_2^2 + x_3^2}; \quad (52)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 F}{\partial x_3^2} &= 4 \cdot \mu (4x_0^2 + x_1^2 + 3x_2^2 + 15x_3^2 - 1) + 2c_3 - \\ &- 2 \ln \left(\ln(x_0^2 + x_1^2 + x_3^2) + \frac{2x_3^2}{x_0^2 + x_1^2 + x_3^2} \right) + 4(\ln x_3 + 1). \end{aligned} \quad (53)$$

Выделим четыре основные формулы в общем виде при формировании вторых частых производных матрицы Гессе:

1. Если производная находится на диагонали и вещества газообразные:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 F}{\partial x_i \partial x_j} &= 4\mu \left(\sum_{p=0}^P \chi_i \left(\sum_{j=0}^J (\chi_{j,p} x_j^2) + 2x_i^2 - O_p \right) \right) + 2c_i - \\ &- 2 \left(\ln \left(\sum_{j=0}^J x_j^2 \right) + \frac{2x_i^2}{\sum_{j=0}^J x_j^2} \right) + 4 \ln(x_i + 1). \end{aligned} \quad (54)$$

2. Если оба вещества газообразные и производная не находится на главной диагонали:

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x_i \partial x_j} = 8\mu x_i x_j \sum_{p=0}^P \chi_{i,p} \chi_{j,p} - \frac{4x_i x_j}{\sum_{j=0}^J x_{j(r)}^2}. \quad (55)$$

3. Если производная находится на главной диагонали и вещество твердое:

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x_i \partial x_j} = 4\mu \left(\sum_{p=0}^P \chi_i \left(\sum_{j=0}^J (\chi_{j,p} x_j^2) + 2x_i^2 - O_p \right) \right) + 2c_i. \quad (56)$$

4. Если одно из веществ твердое и производная не находится на главной диагонали:

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x_i \partial x_j} = 8\mu x_i x_j \sum_{p=0}^P \chi_{i,p} \chi_{j,p}. \quad (57)$$

Результаты

Вычислительные эксперименты по определению равновесного состава выполнялись в программном комплексе T-Energy. Рассматривалось два варианта реализации штрафных функций. В табл. 2 приведены результаты сравнения методов штрафных функций при четырех неизвестных при температуре 1000 К.

Рассмотрим два варианта для задания параметра штрафа: параметр постоянный, параметр возрастает.

Во втором случае для того, чтобы обеспечить сходимость последовательности точек к решению исходной задачи, в качестве штрафа выберем монотонно возрастающую последовательность целых чисел $\mu_t = \mu_{t-1} \cdot k$, $k = 2$.

Таблица 2

Результаты вычислительного эксперимента при четырех неизвестных

Параметры метода		Варианты реализации, решение правильно?		Количество итераций	
μ	k	Реализация № 1	Реализация № 2	Реализация № 1	Реализация № 2
10^4	1	Нет	Да	—	71
10^5	1	Нет	Да	—	112
10^6	1	Да	Да	29	198
10^7	1	Да	Нет	29	—
...	1	Да	Нет	29	—
10^{14}	1	Да	Нет	29	—
10^{15}	1	Да	Нет	30	—
10^{-1}	2	Да	Нет	30	—
10^0	2	Да	Нет	29	—
10	2	Да	Нет	29	—
...	2	Да	Нет	29	—
10^6	2	Да	Нет	29	—
10^7	2	Да	Нет	30	—

Как видно из табл. 2, первая реализация программы работает на более широком диапазоне: при $k = 1$ и μ от 10^6 до 10^{15} и при $k = 2$, μ от 1 до 10^7 . Вторая реализация программы работает только при постоянных значениях,

меньшее количество итераций приходится при $\mu = 10^4$. Первая реализация программы выполняется за 29 итераций, в то время как вторая реализация программы только за 71.

В табл. 3 приведены результаты нахождения минимума функции при 15 неизвестных. При большей размерности задачи потребуется больше количество итераций, а значит, параметр штрафа μ возрастет k^n раз.

Таблица 3

Решение системы из 15 переменных при температуре
от 300 до 2000 К с шагом 100

Параметры метода		Варианты реализации, решение правильно?		Количество итераций	
μ	k	Реализация № 1	Реализация № 2	Реализация № 1	Реализация № 2
10^6	1	Да	Да	35	198
...	1	Да	Нет	35	—
10^{14}	1	Да	Нет	35	—
1	2	Да	Нет	35	—
...	2	Да	Нет	35	—
10^5	2	Да	Нет	35	—

Как видно из табл. 3, первая реализация программы показала сходимость решения на большем диапазоне, в то время как вторая реализация программы выполняется только при $\mu = 10^6$ и за большее количество итераций.

Задачи большей размерности с 73 неизвестными и более с помощью метода штрафной функции не удалось решить.

С помощью метода неопределенных множителей Лагранжа задачу из табл. 2 удалось решить за 28 итераций, а задачу из табл. 3 – за 32 итерации.

Обсуждение

По представленным результатам видно, что метод неопределенных множителей Лагранжа оказался эффективнее, чем метод штрафных функций при нахождении равновесного состава бинарной термодинамической системы. При реализации метода штрафных функций возникает трудность выбора параметра штрафа μ : для получения хорошего приближения необходимо выбирать параметр штрафа достаточно большим, но тогда все производные по переменным становятся также большими [12]. При возрастании штрафа μ обусловленность матрицы Гессе $\nabla^2 F(x, \mu)$ ухудшается, когда $\mu \rightarrow \infty$.

Заключение

Рассмотрен метод штрафных функций применительно к задаче нахождения равновесного состава системы С-О. Были получены производные первого и второго порядка функции приведенной энергии Гиббса с использованием метода штрафных функций для четырех переменных. Использовались два вида реализации метода штрафных функций: исходные переменные со штрафной функцией и замена переменных в исходной функции на квадраты других переменных. Первая реализация метода штрафных функций оказалась применимой на большем диапазоне параметров метода. Задачу нахождения

равновесного состава для четырех неизвестных удалось решить методом штрафных функций за 29 и 71 итерацию для первого и второго вариантов соответственно. Эта же задача методом неопределенных множителей Лагранжа включает шесть неизвестных (добавляются два ограничения) и решается за 28 итераций.

Полная задача нахождения равновесного состава системы С-О: 13 неизвестных для метода штрафных функций и 15 неизвестных для метода неопределенных множителей Лагранжа решается быстрее последним методом за 32 итерации.

Список литературы

1. Крикунов Д. О. Методы условной оптимизации диспетчерского управления восстановлением и модернизацией летательных аппаратов // Журнал Сибирского федерального университета. Серия: Техника и технологии. 2018. Т. 11, № 1. С. 24–28. doi: 10.17516/1999-494X-0003
2. Ганышин К. Ю., Винокурский Д. Л., Мезенцева О. С., Самойлов Ф. В. Численный метод решения оптимизационной задачи траекторного управления и поддержания формации группой автономных БПЛА с прогнозирующими моделями // Известия Кабардино-Балкарского научного центра РАН. 2023. № 4 (114). С. 55–60. doi: 10.35330/1991-6639-2023-4-114-55-60
3. Петров Е. Г. Методы решения задач дополнительности и двухуровневого программирования : дис. ... канд. физ.-мат. наук : 05.13.01. Иркутск, 2011. 129 с.
4. Коноплев Н. Е., Компанец Б. С. Снижение потерь электроэнергии на участке сети путем оптимизации уровня напряжения методом штрафных функций // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Электротехника, информационные технологии, системы управления. 2023. № 48. С. 50–71. doi: 10.15593/2224-9397/2023.4.0
5. 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
6. Хнаев О. А., Пчелинцев И. А. Параметрическая оптимизация систем. Методы решения экстремальных задач // Модели, системы, сети в экономике, технике, природе и обществе. 2012. № 2 (3). С. 146–152.
7. Баркалов С. А., Курочка П. Н., Маильян Л. Д. [и др.]. Оптимационные модели – инструмент системного моделирования : монография. М. : Кредо, 2023. 522 с.
8. Нечаев Г. И., Рябичев В. Д., Скрипникова А. В., Киричевский А. Р. Решение задачи оптимальной загрузки автотранспорта для различных видов груза на основе модели условной оптимизации // Транспорт Азиатско-Тихоокеанского региона. 2023. № 3 (36). С. 94–99.
9. Алкезуни М. М., Горбаченко В. И. Совершенствование алгоритмов обучения сетей радиальных базисных функций для решения задач аппроксимации // Модели, системы, сети в экономике, технике, природе и обществе. 2017. № 3 (23). С. 123–138.
10. Сеченов П. А., Рыбенко И. А. Сравнение программных реализаций методов решения СЛАУ в задаче нахождения равновесного состава сложной многокомпонентной гетерогенной системы // Вестник Сибирского государственного университета телекоммуникаций и информатики. 2024. Т. 18, № 3. С. 86–98. doi: 10.55648/1998-6920-2024-18-3-86-98
11. Термодинамические свойства индивидуальных веществ : электронный справочник : в 6 т. URL: <http://twt.mpei.ac.ru/TTHB/2/OIVT/IVTANThermo/Rus/index.htm> (дата обращения: 05.12.2024).

12. Буре В. М., Карелин В. В., Полякова Л. Н. Точные штрафные функции в задаче выбора оптимального оптового заказа в условиях быстрого колебания спроса // Вестник Санкт-Петербургского университета. Прикладная математика. Информатика. Процессы управления. 2021. Т. 17, № 4. С. 397–408. doi: 10.21638/11701/spbu10.2021.408

References

1. Krikunov D.O. Methods of conditional optimization of dispatching control of aircraft restoration and modernization. *Zhurnal Sibirskogo federal'nogo universiteta. Seriya: Tekhnika i tekhnologii = Journal of the Siberian Federal University. Series: Machinery and Technology.* 2018;11(1):24–28. (In Russ). doi: 10.17516/1999-494X-0003
2. Ganshin K.Yu., Vinokursky D.L., Mezentseva O.S., Samoilov F.V. Numerical method for solving the optimization problem of trajectory control and formation support by a group of autonomous UAVs with predictive models. *Izvestiya Kabardino-Balkarskogo nauchnogo tsentra RAN = Proceedings of the Kabardino-Balkarian Scientific Center of the Russian Academy of Sciences.* 2023;(4):55–60. (In Russ). doi: 10.35330/1991-6639-2023-4-114-55-60
3. Petrov E.G. Petrov E.G. *Methods for solving problems of complementarity and two-level programming: PhD dissertation.* Irkutsk, 2011. (In Russ)
4. Konoplev N.E., Companeets B.S. Reduction of electricity losses on the grid section by optimizing the voltage level using the penalty function method. *Vestnik Permskogo natsional'nogo issledovatel'skogo politekhnicheskogo universiteta. Elektrotehnika, informационные технологии, системы управления = Bulletin of the Perm National Research Polytechnic University. Electrical engineering, information technology, control systems.* 2023;(48):50–71. (In Russ). doi: 10.15593/2224-9397/2023.4.0
5. Sechenov P.A., Rybenko I.A. 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 = Bulletin of Dagestan State Technical University. Technical sciences.* 2022;49(4):104–112. (In Russ). doi: 10.21822/2073-6185-2022-49-4-104-112
6. Khnaev O.A., Pchelintsev I.A. Parametric optimization of systems. Methods for solving extreme problems. *Modeli, sistemy, seti v ekonomike, tekhnike, prirode i obshchestve = Models, systems, networks in economics, technology, nature and society.* 2012;(2):146–152. (In Russ)
7. Barkalov S.A., Kurochka P.N., Mailyan L.D. et al. *Optimizatsionnye modeli – instrument sistemnogo modelirovaniya: monografiya = Optimization models – a system modeling tool: a monograph.* Moscow: Kredo, 2023:522. (In Russ)
8. Nechaev G.I., Ryabichev V.D., Skrennikova A.V., Kirichevsky A.R. Solving the problem of optimal loading of vehicles for various types of cargo based on the conditional optimization model. *Transport Aziatско-Tikhookeanskogo regiona = Transport of the Asia-Pacific region.* 2023;(3):94–99. (In Russ)
9. Alkezuni M.M., Gorbachenko V.I. Improvement of algorithms for learning networks of radial basis functions for solving approximation problems. *Modeli, sistemy, seti v ekonomike, tekhnike, prirode i obshchestve = Models, systems, networks in economics, technology, nature and society.* 2017;(3):123–138. (In Russ)
10. Sechenov P.A., Rybenko I.A. Comparison of software implementations of SLA methods in the problem of finding the equilibrium composition of a complex multicomponent heterogeneous system. *Vestnik Sibirskogo gosudarstvennogo universiteta telekommunikatsij i informatiki = Bulletin of the Siberian State University of Telecommunications and Informatics.* 2024;18(3):86–98. (In Russ). doi: 10.55648/1998-6920-2024-18-3-86-98
11. *Termodinamicheskie svojstva individual'nykh veshchestv: elektronnyj spravochnik: v 6 t. = Thermodynamic properties of individual substances: electronic reference book:*

- in 6 volumes.* (In Russ). Available at: <http://twt.mpei.ac.ru/TTHB/2/OIVT/IVTAN-Thermo/Rus/index.htm> (accessed 05.12.2024).
12. Bure V.M., Karelina V.V., Polyakova L.N. Exact penalty functions in the problem of choosing the optimal wholesale order in conditions of rapid fluctuations in demand. *Vestnik Sankt-Peterburgskogo universiteta. Prikladnaya matematika. Informatika. Prosesсы upravleniya = Bulletin of St. Petersburg University. Applied mathematics. Informatics. Management processes.* 2021;17(4):397–408. (In Russ). doi: 10.21638/11701/spbu10.2021.408

Информация об авторах / Information about the authors

Павел Александрович Сеченов

кандидат технических наук, доцент,
доцент кафедры прикладных
информационных технологий
и программирования,
Сибирский государственный
индустриальный университет
(Россия, г. Новокузнецк, ул. Кирова, 42)
E-mail: pavesa89@mail.ru

Pavel A. Sechenov

Candidate of technical sciences, associate
professor, associate professor of the
sub-department of applied information
technologies and programming,
Siberian State Industrial University
(42 Kirov street, Novokuznetsk, Russia)

Инна Анатольевна Рыбенко

доктор технических наук, доцент,
заведующий кафедрой прикладных
информационных технологий
и программирования,
Сибирский государственный
индустриальный университет
(Россия, г. Новокузнецк, ул. Кирова, 42)
E-mail: rybenkoi@mail.ru

Inna A. Rybenko

Doctor of technical sciences, associate
professor, head of the sub-department
of applied information technologies
and programming,
Siberian State Industrial University
(42 Kirov street, Novokuznetsk, Russia)

**Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов /
The authors declare no conflicts of interests.**

Поступила в редакцию/Received 16.12.2024

Поступила после рецензирования/Revised 19.02.2025

Принята к публикации/Accepted 18.07.2025