

Метод внутренних точек для решения обратной задачи термодинамики

В.П.Ильин* К.Г.Моргунов А.Н.Чайко*****

* Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН

** Институт геологии и минералогии СО РАН

*** Новосибирский государственный университет

Реализован и экспериментально исследован метод внутренних точек для решения задач нелинейного программирования с ограничениями. Условия оптимальности Каруша-Куна-Такера (ККТ) для модифицированного функционала Лагранжа приводят к нелинейной системе уравнений, которая решается методом Ньютона с выбором масштабирующего множителя относительно приращений переменных. Алгоритм применен к актуальной задаче физико-химического моделирования, которая приводит к минимизации свободной энергии Гиббса. Предложена переформулировка функционала и совокупности ограничений, которая позволила существенно сократить обращение линеаризованной системы ККТ. Приводятся результаты численных расчетов для методического примера и моделирования одно- и двухфазных термодинамических систем, сделано качественное сравнение с результатами, полученными с помощью существующего программного обеспечения для геохимического моделирования.

**International Conference «Inverse and Ill-Posed Problems of Mathematical Physics»,
dedicated to Professor M.M. Lavrent'ev in occasion of his 75-th birthday, August 20-25, 2007, Novosibirsk, Russia**

Interior point method for solution the inverse problem of thermodynamics

V.P. Il'in*, K.G. Morgunov, A.N.Chaiko*****

* Institute of Computational Mathematics and Mathematical Geophysics of SB RAS

** Institute of Geology and Mineralogy of SB RAS

*** Novosibirsk State University

Interior point method for nonlinear constrained optimization is implemented and experimentally researched. First order optimality conditions with respect to Lagrangian result in a system of nonlinear equations. The system is solved in increments by Newton's method with tuning of scaling factor. The algorithm represented is tested and applied to a problem of physical and chemical modeling which reduces to minimization of Gibbs' free energy function. A function's and problem's modification is suggested in order to accelerate an inversion of linearized KKT system. There are computational results for methodic example and modeling of thermodynamic composition with one and two phases. The comparison with existing geochemical software is performed.