О. А. А н т о н о в а (Стерлитамак, СФ БГУ). **Решение задачи оптимизации в условиях неопределенности кинетических данных для равновесного случая.**

Для двухстадийной параллельной обратимой реакции в равновесном случае рассматривается задача нахождения оптимальной температуры, доставляющяя максимум выхода целевого продукта. По технологическим условиям на температуру накладывается ограничение вида $T \in [T_*, T^*]$. При решении задачи могут возникнуть ситуации, при которых оптимальная температура T находится внутри заданного ограничения (качество 1), либо оптимальная температура находится только на его границах (качество 2). Если при этом в условиях неопределенности кинетических данных (констант реакции, энергии активации) качество не меняется, то температура называется *качественно неизменной*. Местоположение оптимальной температуры определяет разные аппаратные условия ведения процесса: изотермические или неизотермические.

Введение категории качества формализуется введением следующих отношений эквивалентности:

$$V_i \sim V_j \Longleftrightarrow \max_{V_i} \lambda(T) = \max_{V_j} \lambda(T), \tag{1}$$

$$V_i \sim V_j \Longleftrightarrow \min_{V_i} \lambda(T) + \max_{V_i} \lambda(T) = \min_{V_j} \lambda(T) + \max_{V_j} \lambda(T). \tag{2}$$

Здесь $U = \{T \in [T_*, T^*] \,|\, T = \arg\max_{[T_*, T^*]} X_s\}$, X_s — продукт реакции, $\lambda(T)$ — характеристическая функция множества $[T_*, T^*]$:

$$\lambda(T) = \begin{cases} 1, & \text{если } T = T_* \text{ или } T = T^*, \\ 0, & \text{если } T \in [T_*, T^*]. \end{cases}$$

Будем учитывать, что параметры равновесного процесса (кинетические константы скорости k_i^0 и энергии активации E_i) определены в интервалах, т. е. находятся в условиях неопределенности: $(k_i^0)^{\text{ср}} - \Delta(k_i^0) \leqslant k_i^0 \leqslant (k_i^0)^{\text{ср}} + \Delta(k_i^0)$, $E_i^{\text{ср}} - \Delta E_i \leqslant E_i \leqslant E_i^{\text{ср}} + \Delta E_i$.

Функция теоретической оптимизации для двухстадийной параллельной обратимой реакции f: $\mathbf{R}^2 \times \mathbf{R}^2_+ \longrightarrow U$, $(E_i, k_i^0) \longrightarrow V \in U = \{V_1, V_2, V_3, V_4\}$, порождает следующие множества возможных решений: $V_1 = \{T_{\min}\}$, $V_2 = \{T_{\max}\}$, $V_3 = \{T_c\}$, $V_4 = \{T_{\min}, T_{\max}\}$.

Тогда значения характеристической функции $\lambda(T)$ имеют вид

$$\max \lambda(T) = \min \lambda(T) = \begin{cases} 1, & i = 1, 2, 3, \\ 0, & i = 4. \end{cases}$$

Утверждение. *Для того чтобы отношения эквивалентности* (1), (2) *образовали два класса эквивалентности фиксированного качества*

$$A_1 = \cup V_4^{\alpha}, \quad \text{\it где} \quad \alpha = (E_i, k_i^0) \in E_i^I \times (k_i^0)^I, \quad \text{\it и} \quad A_2 = V_1 \cup V_2,$$

достаточно, *чтобы одновременно выполнялись условия*

$$|E_1^{\text{ср}} - E_2^{\text{ср}}| \geqslant \Delta E_1 + \Delta E_2, \quad |E_3^{\text{ср}} - E_4^{\text{ср}}| \geqslant \Delta E_3 + \Delta E_4.$$