**负载金属催化剂MnO2的活性焦制备产物计算**

1. 计算

①数学模型：

目标函数：



式中：







约束条件：

 ①（ng+ns个解，m个方程，m<ng+ns)

 ②

②步骤：

a筛选基本可行解

根据①，从（ng+ns）个解中选取m个进行组合求解（共种组合），去掉无效组合数M（不满足②这一约束条件的），剩下的有效组合数，对应N个基本可行解：X1，X2，…，XN，设定T与P，计算X1，X2，…，XN，的函数值G，并根据G对X1~XN从小到大进行排序：X1’ ~ XN’，按此顺序检查X1’ ~ XN’，选出（ng+ns）个符合以下特征的Xi” :

（找出一个Xi”后把他移除，从头开始找剩下的Xi”）

（1）xii” >0;

（2）最多有（m-1）个xij” >0（i≠j）



b搜索

（1）在获取基本可行解后，给定初始解，设定初始搜索步长，精度，进行搜索操作：

给定T和P，计算，若吉布斯自由能，则令，否则转向计算，检查中是否有，若有则放弃进一步的计算，否则若，则令；

（2）得到新的后（若未得到，同样按照（2）进行计算），利用余下的，将（1）赋值公式中的按照顺序赋值为，不断更新的值；

（3）重复（1）（2）操作，直至不再被更新，转向（4）；

（4）令，继续（1）~（3）的搜索操作，直至，停止搜索，所 得到的即为最优解。

b2 = 2.5656 + y / 1600;

b3 = 2.0799 + y / 100;

b4 = 0.0466 + y / 5500;