

УДК 66.011

И. КИРЬЯНЕН

К РАСЧЕТНЫМ МЕТОДАМ ПРИ ИСПОЛЬЗОВАНИИ ПРИНЦИПА МАКСИМУМА В ОПТИМИЗАЦИИ СЛОЖНЫХ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ

(Представил О. Эйзен)

При оптимизации сложных химико-технологических систем (СХТС) возникает необходимость в определении профилей технологических параметров в аппаратах. Для этого можно использовать методику принципа максимума. Утвержденная методика предусматривает для этой цели обобщенный критерий оптимизации — приведенные затраты всей СХТС. Однако применение такого критерия оптимума приводит к расчетным трудностям, в частности к невозможности аналитического нахождения производных. В настоящей работе предпринята попытка разрешить проблему численного дифференцирования по приблизительно рассчитанным данным.

Согласно методике технико-экономической оптимизации реакторов, находящихся в СХТС [1, 2], нужно найти зависимость

$$\Psi = \Psi(\tau) \approx \Psi^{\delta}(\tau), \quad (1)$$

$$\|\Psi(\tau) - \Psi^{\delta}(\tau)\| \leq \delta, \quad (2)$$

где Ψ — приведенные затраты всей СХТС на единицу продукта, τ — аргумент модели рассматриваемого аппарата, δ — величина, характеризующая ошибку. Величины $\Psi(\tau)$ обычно находятся расчетом СХТС при разных значениях τ , в результате получают величины $\Psi^{\delta}(\tau)$, которые имеют определенные ошибки.

В формуле (2) норму целесообразно взять в пространстве $L_2[a, b]$

$$\|f\|_{L_2}^2 = \int_a^b |f(x)|^2 dx.$$

В ходе определения профилей параметров нужно совместно решить системы дифференциальных уравнений [1]:

$$\frac{dx_i}{d\tau} = r_i(\bar{x}, \bar{u}) \quad (i=1, 2, \dots, m),$$

$$\frac{d\lambda_k}{d\tau} = \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \tau \partial x_k} - \sum_{i=1}^m \lambda_i(\tau) \frac{\partial r_i(\bar{x}'(\tau), \bar{u}(\tau))}{\partial x_k} \quad (k=1, 2, \dots, m), \quad (3)$$

$$\frac{d\lambda_{m+1}}{d\tau} = \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \tau^2}$$

где \bar{x} — состояние процесса ($\bar{x}' = (\bar{x}, \tau)$), \bar{u} — вектор управления, $\bar{\lambda}$ — вспомогательные функции.

Как видно, для решения системы (3) нужно рассчитать вторые производные $\frac{\partial^2 \Psi}{\partial \tau \partial x_k}$ ($k=1, 2, \dots, m$) и $\frac{\partial^2 \Psi}{\partial \tau^2}$ по приближительным значениям $\Psi^\delta(\tau)$. В действительности же проблему представляет только расчет $\frac{\partial^2 \Psi}{\partial \tau^2}$, так как

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial \tau \partial x_k} = \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \tau^2} \cdot \frac{1}{r_k} \quad (k=1, 2, \dots, m).$$

Это т. н. некорректная линейная задача, поскольку разность

$$\left\| \frac{d^2(\Psi(\tau))}{d\tau^2} - \frac{d^2(\Psi^\delta(\tau))}{d\tau^2} \right\|$$

может быть сколь угодно велика, в то время как разность

$$\|\Psi(\tau) - \Psi^\delta(\tau)\|$$

может быть сколь угодно мала. Следовательно, требуется специальный математический подход — построение соответствующего регуляризатора [3].

Предполагается, что функция $\Psi(\tau)$ определена на $[-1, 1]$ и

$$\Psi(0) = 0, \quad \Psi^\delta(0) = 0. \quad (4)$$

Если эти требования не выполняются, нужно провести линейное преобразование

$$\hat{\tau} = \frac{2}{b-a} \tau - \frac{b+a}{b-a},$$

$$\hat{\Psi}^\delta(\hat{\tau}) = \Psi^\delta(\hat{\tau}) - \Psi^\delta(\hat{\tau}) \Big|_{\hat{\tau}=0},$$

где $\hat{\tau}$ и $\hat{\Psi}$ — новые переменные.

Так как прибавление произвольной постоянной не влияет на величину производной, то

$$\frac{d^2 \Psi}{d\tau^2} \Big|_{\tau=0} = \frac{d^2 \hat{\Psi}}{d\hat{\tau}^2} \Big|_{\hat{\tau}=0}$$

но замену аргумента нужно учитывать

$$\frac{d^2 \Psi}{d\tau^2} = \frac{d^2 \Psi}{d\hat{\tau}^2} \left(\frac{d\hat{\tau}}{d\tau} \right)^2 = \frac{d^2 \Psi}{d\hat{\tau}^2} \cdot \frac{4}{(b-a)^2}.$$

Функция $\hat{\Psi}^\delta(\hat{\tau})$ разлагается в ряд Фурье. В качестве ортонормированного базиса взяты полиномы Лежандра

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n [(x^2-1)^n]}{dx^n},$$

которые имеют следующие рекуррентные связи:

$$(n+1)P_{n+1}(x) = (2n+1)xP_n(x) - nP_{n-1}(x), \quad (5)$$

$$\begin{aligned} (n+1) \frac{dP_{n+1}(x)}{dx} &= \\ &= (2n+1)P_n(x) + (2n+1)x \frac{dP_n(x)}{dx} - n \frac{dP_{n-1}(x)}{dx}. \end{aligned} \quad (6)$$

Функция $\widehat{\Psi}^\delta(\widehat{\tau})$ заменяется полиномом $q_{n+1}(\widehat{\tau})$ ($n+1$)-й степени с тем, чтобы

$$\|\widehat{\Psi}^\delta - q_{n+1}\| \leq \delta, \quad (7)$$

$$\widehat{\Psi}^\delta(\widehat{\tau}) \sim \sum_{h=0}^{n+1} b_h P_h(\widehat{\tau}), \quad (8)$$

$$b_h = \frac{2k+1}{2} \cdot \int_{-1}^1 \widehat{\Psi}^\delta(\widehat{\tau}) P_h(\widehat{\tau}) d\widehat{\tau}. \quad (9)$$

Тогда

$$\|\widehat{\Psi} - q_{n+1}\| \leq 2\delta.$$

В [4] показано, как построить полином производной $p_1^{2\delta}(\widehat{\tau})$, чтобы

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} p_1^{2\delta}(\widehat{\tau}) = \frac{d\widehat{\Psi}}{d\widehat{\tau}} \quad (10)$$

и

$$\left\| p_1^{2\delta}(\widehat{\tau}) - \frac{d\widehat{\Psi}}{d\widehat{\tau}} \right\| \leq 2\delta, \quad (11)$$

т. е. с той точностью, с которой известен полином $q_{n+1}(\widehat{\tau})$, а именно

$$p_1^{2\delta}(\widehat{\tau}) = \sum_{h=1}^{n+1} \frac{b_h}{1 + \alpha k^2 (1+k)^2} \cdot \frac{dP_h(\widehat{\tau})}{d\widehat{\tau}}, \quad (12)$$

где α — положительное значение из условия

$$\sum_{h=1}^{n+1} \frac{2}{2k+1} h^2 \frac{\alpha^2 k^4 (k+1)^4}{[1 + \alpha k^2 (k+1)^2]^2} = 4\delta^2. \quad (13)$$

Степень полиномов (число $n+1$) выбирается так, чтобы удовлетворялись условия

$$\int_{-1}^1 (\widehat{\Psi}^\delta)^2 d\widehat{\tau} - \sum_{h=0}^{n+1} \frac{2}{2k+1} b_h^2 \leq \delta^2, \quad (14)$$

$$\sum_{h=0}^{n+1} \frac{2}{2k+1} b_h^2 > 4\delta^2. \quad (15)$$

Для определения величины δ нужно знать абсолютную ошибку данных $\widehat{\Psi}^\delta(\widehat{\tau})$, т. е.

$$|\widehat{\Psi}^\delta(\widehat{\tau}) - \widehat{\Psi}(\widehat{\tau})| \leq \Delta.$$

Тогда

$$\|\widehat{\Psi}^\delta - \widehat{\Psi}\| = (\|\widehat{\Psi}^\delta - \widehat{\Psi}\|^2)^{1/2} = \left(\int_{-1}^1 |\widehat{\Psi}^\delta - \widehat{\Psi}|^2 d\widehat{\tau} \right)^{1/2} \leq (2\Delta^2)^{1/2} = \sqrt{2}\Delta,$$

т. е. $\delta = \sqrt{2}\Delta$.

Значения характеристических величин при расчете вторых производных

Производная	δ в формуле (2)	$n+1$ в формуле (8)	$a_{нач}$	$a_{кон}$	число итераций	$ I_{2s} - I_s ^{max}$	R_{2s}^{max}	$2s$
			при решении формулы (13)					

Первый пример

1-я	$0,5 \cdot 10^{-6}$	4	0,005	0,000666	7	$0,337 \cdot 10^{-6}$	$0,0158 \cdot 10^{-6}$	30
2-я		3	0,000666	0,000199	5	$1,30 \cdot 10^{-6}$	$0,0867 \cdot 10^{-6}$	

Второй пример

1-я	$0,5 \cdot 10^{-4}$	5	0,005	0,0000205	11	$1,46 \cdot 10^{-4}$	$0,0973 \cdot 10^{-4}$	40
2-я		4	0,0000205	0,0000187	3	$12,8 \cdot 10^{-4}$	$0,853 \cdot 10^{-4}$	

Интеграл в (9) целесообразно рассчитать по формуле Симпсона, где ошибку метода R_s характеризует

$$|R_s| \leq \frac{32}{180 \cdot s^4} \max_{\tau \in [-1, 1]} \left| \frac{d^4(\hat{\Psi}^{\tau\delta}(\tau) \cdot P_h(\hat{\tau}))}{(d\hat{\tau})^4} \right|, \quad (16)$$

где s — число используемых дискретных точек интегрируемой функции. Чтобы не потерять в точности, s должен быть таким, чтобы

$$|R_s| \leq \Delta.$$

Когда поиск максимального значения четвертой производной по неравенству (16) затруднен, для определения значения s можно использовать приближенную формулу

$$|R_{2s}| \approx \frac{1}{15} |I_{2s} - I_s|, \quad (17)$$

где I_{2s} и I_s — значения рассчитываемых интегралов при разделении интервала интегрирования на $2s$ и s промежутков.

Переменную α из уравнения (13) можно определить методом Ньютона. Итерирование проводится до тех пор, пока точность α не будет охарактеризована величиной Δ . Начальное значение итерируемой переменной зависит от конкретного случая, но существование решения уравнения (13) гарантируется, причем область сходимости итераций обычно «большая».

Для нахождения второй производной описанную процедуру нужно повторить, соблюдая при этом выполнение требования (4) и делая в формулах (7) — (15) замены

$$p_1^{2\delta} \rightarrow \Psi^{\delta}, \quad 2\delta \rightarrow \delta, \quad \frac{d\hat{\Psi}}{d\hat{\tau}} \rightarrow \hat{\Psi},$$

$$p_2^{4\delta} \rightarrow p_1^{2\delta}, \quad \frac{d^2\hat{\Psi}}{d\hat{\tau}^2} \rightarrow \frac{d\hat{\Psi}}{d\hat{\tau}}.$$

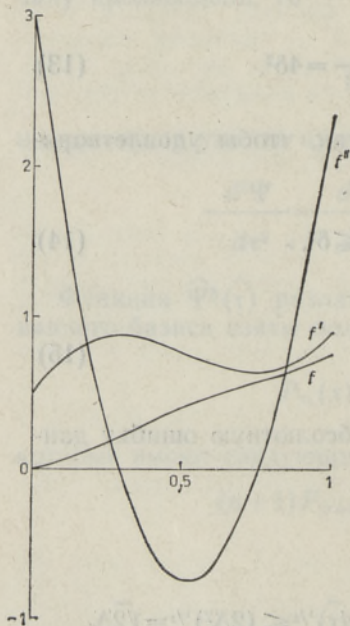


Рис. 1. Графики функции (18).

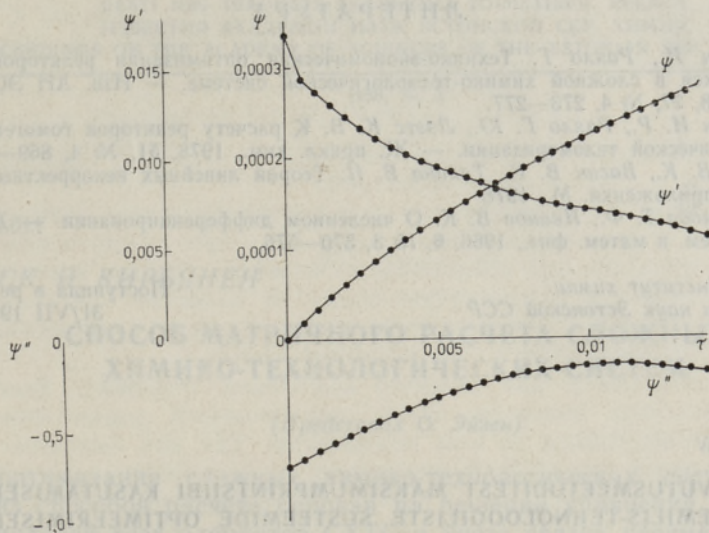


Рис. 2. Графики функции обратных значений приведенных затрат на единицу продукта и ее первой и второй производных.

Будем иметь

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} p_2^{4\delta}(\hat{\tau}) = \frac{d^2 \hat{\Psi}}{d\hat{\tau}^2}$$

и

$$\left\| p_2^{4\delta}(\hat{\tau}) - \frac{d^2 \hat{\Psi}}{d\hat{\tau}^2} \right\| \leq 4\delta.$$

В общем, повторяя эту процедуру, можно найти производные сколь угодно высших порядков. Каждый раз, повышая порядок на единицу, мы вдвое теряем в точности.

Соответствующая программа составлена на языке ФОРТРАН. Для расчета значений полиномов Лежандра использованы рекуррентные связи (5) и (6).

Рассмотрим два примера. Во-первых, сложную функцию — комбинацию гиперболической функции с полиномом

$$f(x) = \text{th } x - (x - 0,5)^4 + 0,625, \quad (18)$$

$$f'(x) = \frac{4e^{-2x}}{(1+e^{-2x})^2} - 4(x-0,5)^3,$$

$$f''(x) = \frac{8e^{-2x}(e^{-4x}-1)}{(1+e^{-2x})^4} - 12(x-0,5)^2$$

и, во-вторых, обратные значения приведенных затрат на единицу продукта конкретной СХТС — производства химических средств защиты растений. Судя по таблице и рис. 1, 2, метод обеспечивает получение нужных результатов за приемлемое машинное время.

В первом примере выбор именно такой функции не случаен. В рассматриваемом интервале (рис. 1) функция «почти» прямая, но вид ее производных довольно сложен. Таким образом, если недооценивать влияние ошибок в реальных случаях, т. е. если не элиминировать случайные отклонения, вызванные ошибками, то это может привести к изменению вида функций, а следовательно, и к неверным результатам.

ЛИТЕРАТУРА

1. Кирьянен И., Раяло Г. Технико-экономическая оптимизация реакторов, находящихся в сложной химико-технологической системе. — Изв. АН ЭССР. Хим., 1978, 27, № 4, 273—277.
2. Кирьянен И. Р., Раяло Г. Ю., Лээтс К. В. К расчету реакторов гомогенной каталитической теломеризации. — Ж. прикл. хим., 1978, 51, № 4, 869—874.
3. Иванов В. К., Васин В. В., Танана В. П. Теория линейных некорректных задач и ее приложения. М., 1978.
4. Долгополова Т. Ф., Иванов В. К. О численном дифференцировании. — Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 1966, 6, № 3, 570—576.

Институт химии
Академии наук Эстонской ССР

Поступила в редакцию
31/VII 1985

I. KIRJANEN

ARVUTUSMEETODITEST MAKSIMUMPRINTSIIBI KASUTAMISEL KEEMILIS-TEHNOLOGILISTE SÜSTEEMIDE OPTIMEERIMISEL

Tehnoloogiliste parameetrite optimaalsete profiilide leidmiseks aparatuurides võib kasutada maksimumprintsiibi meetodikat. Vaadeldes aparaaati keemilis-tehnoloogilise süsteemi elemendina ja kasutades üldistatud optimeerimiskriteeriumi, tekivad arvutusaraskused. Üheks probleemiks on üldistatud optimeerimiskriteeriumi teiste tuletiste arvutamine vaadeldava aparaaadi argumendi järgi. Artiklis vaadeldakse võimalust selle probleemi lahendamiseks. Väljatöötatud meetodika on kasutatav palju üldisemalt.

I. KIRJANEN

ABOUT THE COMPUTATIONAL TECHNIQUES OF USING MAXIMUM PRINCIPLE IN OPTIMIZATION OF A CHEMICAL ENGINEERING SYSTEM

In the calculation of the optimal profile of technological parameters, the maximum principle can be used. Computational difficulties will crop up if we consider the examining apparatus an element of a chemical engineering system, and if the generalized optimum criterion is applied. A problem is the calculation of the second derivative of the generalized optimum criterion with respect to the argument of the examining apparatus. The author proposes a possibility to solve that problem. The method elaborated can be applied on a wider scale as well.