



ХИМИЧЕСКАЯ КИБЕРНЕТИКА

Кафаров В. В.

Методы кибернетики в химии и химической технологии. Изд. 2-е, 1971.

Минскер И. Н.

Оперативное управление химико-технологическими комплексами, 1972.

Рузинов Л. П.

Статистические методы оптимизации химических процессов, 1972.

Голованов О. В.

Системы оперативного управления химическими производствами, 1973.

Липатов Л. Н.

Типовые процессы химической технологии как объекты управления, 1973.

Балакирев В. С., Софиев А. Э.

Применение средств пневмо- и гидроавтоматики в химических производствах, 1973.

Полоцкий Л. М., Лапшенков Г. И.

Основы автоматики и автоматизации производственных процессов в химической промышленности. Изд. 2-е, 1973.

Закгейм А. Ю.

Введение в моделирование химико-технологических процессов, 1973.

*Кафаров В. В., Перов В. Л.,
Мешалкин В. П.*

Принципы математического моделирования химико-технологических систем, 1974.

А. И. БОЯРИНОВ
В. В. КАФАРОВ

МЕТОДЫ ОПТИМИЗАЦИИ В ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

ИЗДАНИЕ ВТОРОЕ,
ПЕРЕРАБОТАННОЕ И ДОПОЛНЕННОЕ

ДОПУЩЕНО

*Министерством высшего и среднего
специального образования СССР
в качестве учебного пособия
для студентов химико-технологиче-
ских специальностей вузов*

МОСКВА
ИЗДАТЕЛЬСТВО «ХИМИЯ» 1975

УДК 66.012 (076.5)Б 86**Бояринов А. И., Кафаров В. В.**

Методы оптимизации в химической технологии. Изд. 2-е. М., «Химия», 1975. (Серия «Химическая кибернетика»). 576 с.; 15 табл.; 176 рис.; список литературы 87 ссылок.

В книге в доступной форме изложены основы методов оптимизации химических производств (классический анализ, вариационное исчисление, принцип максимума, динамическое, линейное, нелинейное и геометрическое программирование). Сформулированы общие положения, касающиеся выбора критериев оптимальности химико-технологических процессов, и приведены их математические модели. Рассмотрены задачи оптимизации конкретных процессов. Второе издание (первое издание выпущено в 1969 г.) дополнено изложением основ геометрического программирования, а также примерами, иллюстрирующими практическую реализацию методов нелинейного программирования.

Книга предназначена в качестве учебного пособия для студентов вузов химико-технологических специальностей. Она может быть полезна также научным и инженерно-техническим работникам предприятий, исследовательских и проектных организаций химической и смежных с ней отраслей промышленности.

Б $\frac{31402-122}{050(01)-75}$ 122-75

6П7.05

СОДЕРЖАНИЕ

Предисловие	9
Основные условные обозначения	10
Глава I. Общая постановка задач оптимизации химико-технологических процессов	13
1. Экономическая оценка эффективности процессов	14
2. Математические модели процессов и их роль в решении оптимальных задач	24
3. Характеристика методов решения задач оптимизации	29
4. Чувствительность оптимума	37
Литература	40
Глава II. Математические модели как основа оптимизации процессов химической технологии	41
1. Основные понятия	42
2. Общая характеристика моделей	44
Формализованное описание	45
Математическое описание	47
Моделирующий алгоритм	52
3. Математическое описание структуры потоков как основа построения моделей процессов	57
4. Примеры моделей процессов	65
Тепловые процессы	65
Массообменные процессы	69
Химические процессы	74
Литература	91
Глава III. Методы исследования функций классического анализа	92
1. Основные понятия	92
Экстремумы функций одной переменной	92
Экстремумы функций многих переменных	97
2. Примеры задач оптимизации теплообменных аппаратов	103
3. Оптимальные условия проведения химических реакций	108
Реакторы идеального смешения	108
Реакторы идеального вытеснения	117
Ступенчатые реакторы идеального вытеснения	123
Использование зависимости селективности реакций от степени превращения для выбора оптимальных режимов процессов	136
Литература	147

Глава IV. Метод множителей Лагранжа	148
1. Основные понятия	148
2. Оптимальное распределение потоков сырья между параллельно работающими аппаратами	154
Вывод основных соотношений	155
Примеры распределения для различных типов реакций	157
3. Оптимизация многостадийных процессов	193
Вывод основных соотношений	163
Каскад реакторов идеального смешения	166
4. Оптимизация процессов с распределенными параметрами	189
Вывод основных соотношений	186
Реакторы идеального вытеснения	195
Л и т е р а т у р а	201
Глава V. Вариационное исчисление	202
1. Основные понятия	202
2. Математический аппарат вариационного исчисления	210
Уравнение Эйлера	210
Граничные условия	214
Вариационные задачи с ограничениями	220
Вычислительные аспекты вариационного исчисления	225
3. Оптимальные температурные профили в реакторах идеального вытеснения для параллельных реакций первого порядка	234
Оптимальный профиль при отсутствии ограничений на температуру процесса	235
Оптимальный профиль с ограничениями на температуру процесса	241
Чувствительность оптимума	253
Л и т е р а т у р а	253
Глава VI. Динамическое программирование	257
1. Основные понятия	257
Многостадийные процессы	257
Принцип оптимальности	260
Решение комбинаторных задач	261
Математическая формулировка принципа оптимальности для дискретных процессов	266
Вычислительные аспекты динамического программирования	268
2. Оптимальное распределение реакционных объемов в каскаде реакторов идеального смешения	287
3. Принцип оптимальности для процессов с распределенными параметрами	295
Математическая формулировка принципа оптимальности для непрерывных процессов	297
Решение уравнения Беллмана	300
4. Оптимальные температурные профили в реакторах идеального вытеснения для обратимых реакций	303
Л и т е р а т у р а	309
Глава VII. Принцип максимума	310
1. Основные понятия	310
Формулировка принципа максимума на примере задач о быстродействии	312
Принцип максимума для задач с критерием оптимальности, заданным в виде функционала	325
Граничные условия	329
Вычислительные аспекты принципа максимума	334

2. Различные варианты постановки оптимальных задач для управляемых процессов	348
3. Примеры задач оптимизации, решаемых с использованием принципа максимума	361
Оптимальное распределение подпитки исходным веществом в реакторах идеального вытеснения	361
Оптимальные температурные профили в реакторах идеального вытеснения для последовательных реакций	367
Синтез оптимальных регуляторов	376
4. Принцип максимума для дискретных процессов	386
Вывод общих соотношений	386
Вычислительные аспекты дискретного принципа максимума	393
5. Примеры использования дискретного принципа максимума для решения оптимальных задач	395
Оптимизация каскада реакторов идеального смешения для реакций произвольного порядка	395
Оптимизация процессов экстракции с перекрестным током	399
6. Связь принципа максимума с другими методами оптимизации	401
Литература	405

Глава VIII. Линейное программирование 406

1. Основные понятия	407
Постановка задач линейного программирования и их геометрическая интерпретация	407
Преобразование ограничений	412
Симплексный метод решения задач линейного программирования	420
Определение начального базисного решения	437
Вычисление обратной матрицы нового базиса по известной обратной матрице исходного базиса	441
Алгоритм симплексного метода	446
2. Вырожденные задачи	454
3. Принцип двойственности в задачах линейного программирования	455
4. Оптимальная организация производства продукции при ограниченных запасах сырья	465
Литература	474

Глава IX. Нелинейное программирование 475

1. Основные понятия	476
Целевая функция и ее некоторые свойства	476
Общая характеристика методов решения задач нелинейного программирования	484
2. Градиентные методы	486
Метод релаксации	487
Метод градиента	491
Метод наискорейшего спуска	493
Поиск оптимума при известном аналитическом выражении градиента	496
Метод «тяжелого шарика»	500
3. Безградиентные методы детерминированного поиска	500
Метод локализации экстремума функции одной переменной	501
Метод «золотого сечения»	502
Метод поиска с использованием чисел Фибоначчи	505
Метод поочередного изменения переменных	507
Метод сканирования	508
Симплексный метод	512
Поиск при наличии «оврагов» целевой функции	516
4. Методы случайного поиска	518
Слепой поиск	519

Метод случайных направлений	521
Метод случайных направлений с обратным шагом	522
Метод случайных направлений с линейным пересчетом	522
Метод спуска «с наказанием случайностью»	522
Получение случайных чисел	523
5. Поиск оптимума в задачах с ограничениями типа равенств	526
Отыскание начальной точки спуска и коррекция нарушений ограничений в процессе поиска	527
Метод прямого поиска с возвратом	534
Метод проектирования вектора-градиента	534
Метод обобщенного критерия	537
3. Поиск оптимума в задачах с ограничениями типа неравенств	539
Метод прямого поиска с возвратом	539
Метод проектирования вектора-градиента	541
Метод обобщенного критерия	542
Методы случайного поиска	543
7. Сравнение различных методов поиска	543
Л и т е р а т у р а	546

Г л а в а X. Геометрическое программирование 547

1. Основные понятия	547
Свойства геометрического неравенства	548
Двойственная функция	549
Задачи с ограничениями	551
Вычислительные аспекты геометрического программирования	554
2. Примеры задач геометрического программирования	557
Расчет оптимальных размеров емкости	557
Оптимальный цикл периодического процесса фильтрации	560
Л и т е р а т у р а	562

Приложение. Сведения по математике 563

1. Элементы матричной алгебры	563
Определения	563
Действия над матрицами	565
2. Некоторые сведения из теории векторных пространств	567
Л и т е р а т у р а	569

Предметный указатель 570

ПРЕДИСЛОВИЕ

За время, прошедшее после выхода первого издания книги (М., «Химия», 1969), методы оптимизации нашли широкое применение не только в химии и химической технологии, но и в смежных отраслях науки и техники. Эти методы стали основным инструментом при разработке и реализации новых процессов, а также при оптимальном проектировании действующих производств и оптимальном управлении ими. В последние годы получил значительное развитие, особенно в задачах химической технологии, новый метод — метод геометрического программирования. Поэтому авторы сочли необходимым при переиздании настоящей книги ввести главу «Геометрическое программирование». Остальные разделы не подверглись существенным изменениям, за исключением некоторого сокращения раздела «Динамическое программирование».

Авторы

ОСНОВНЫЕ УСЛОВНЫЕ ОБОЗНАЧЕНИЯ

$A, [A]$ — матрица.

A_j — вектор.

a_{ij} — элемент матрицы $[A]$.

B — объем выпускаемой продукции или производительность процесса.

c_p — удельная теплоемкость при постоянном давлении.

D — количество отбираемого дистиллята в процессе ректификации.

E — энергия активации химической реакции.

E_x — коэффициент продольного смещения вещества в потоке.

E_T — коэффициент продольного переноса тепла в потоке.

Θ — эксплуатационные затраты.

F — поверхность теплопередачи.

F_m — поверхность массопередачи.

Φ — объем капитальных вложений в производство.

G — мольный поток паровой фазы.

H — высота аппарата.

H_n — норма прибыли.

H_p — норма рентабельности.

I — функционал.

K — качественный показатель выпускаемой продукции.

K_T — коэффициент теплопередачи.

K_{0yi} — коэффициент массопередачи i -го компонента смеси, рассчитанный по паровой фазе.

k_{mi} — общий коэффициент массопередачи i -го компонента смеси.

k, k_l — константа скорости химической реакции.

$k_{l\infty}$ — предэкспоненциальный множитель в выражении для константы скорости химической реакции.

L — мольный поток жидкой фазы в процессе ректификации.

$L^{(r)}$ — мольное количество рециркулируемого потока в процессе экстракции.

L_B — длина зоны вытеснения в аппарате.

l — длина, пространственная координата.

l_F — длина пути потока вдоль поверхности тепло- или массообмена.

m — число ограничений в задаче.

N — число стадий многостадийного процесса.

n — число независимых переменных задачи.

n_A, n_P — стехиометрические коэффициенты химической реакции.

- n_{ij} — стехиометрический коэффициент i -го вещества в j -й реакции.
- P — давление.
- Π — объем прибыли.
- R — критерий оптимальности.
- R_g — универсальная газовая постоянная.
- r — число управляющих воздействий.
- r_i — скорость элементарной стадии химической реакции.
- Q — количество тепла.
- Q_T — количество тепла, передаваемого в процессе теплообмена.
- Q_r — суммарный тепловой эффект сложной химической реакции.
- q_i — интенсивность источника i -го вещества в потоке.
- q_T — интенсивность источника тепла в потоке.
- S_B — площадь сечения зоны вытеснения в аппарате.
- S_C — затраты на сырье в процессе производства.
- S_T — переменные расходы в процессе производства.
- S_n — постоянные расходы в процессе производства.
- s_C — стоимость сырья.
- $s_{пр}$ — себестоимость продукции.
- $s_{от}$ — стоимость отходов производства.
- $s_{ц}$ — цена продукции.
- T — температура.
- T^* — температура окружающей среды.
- T_e — равновесная температура химической реакции.
- t — независимая переменная.
- $\Delta T_{ад}$ — адиабатическое повышение температуры реакционной смеси при полном превращении исходных реагентов.
- U — допустимая область изменения значений управляющих воздействий.
- u — управляющее воздействие.
- $\mathbf{u}$ — вектор управляющих воздействий.
- V — объем аппарата.
- V_r — объем реактора.
- v — объемная скорость потока, поступающего в аппарат.
- W — количество кубового остатка, отбираемого в процессе ректификации.
- w_{ri}, w_i — мольная скорость образования i -го вещества в химической реакции.
- w_{mi} — скорость массопередачи.
- X — допустимая область изменения значений переменных состояния процесса.
- x — переменная состояния процесса.
- $\mathbf{x}$ — вектор состояния процесса.
- x_A, x_P — мольная концентрация вещества в жидкой фазе.
- y_A — мольная концентрация вещества в паровой фазе.
- $[\beta_{ik}]$ — обратная матрица базиса.
- η — степень незавершенности химической реакции.
- κ — степень превращения реагента в химической реакции.
- λ — множитель Лагранжа.
- σ_P — селективность химической реакции.

- τ — время; среднее время пребывания реагентов в аппарате.
- τ_k — время завершения процесса.
- ψ_P — выход продукта P в химической реакции.

Нижние индексы

- $A, B \dots$ — исходные продукты химической реакции.
- P — основной продукт химической реакции.
- Q, S — побочные продукты химической реакции.
- i, j, k, l, p — номер переменной состояния или управляющего воздействия.
- x — теплоноситель.

Верхние индексы

- (0) — исходное состояние процесса (начальные условия).
- (k) — конечное состояние процесса.
- (i) — промежуточное состояние процесса (номер стадии).
- $1, 2, \dots$ — возможные промежуточные состояния (слева).
- j — разветвление потока (слева).

ОБЩАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧ ОПТИМИЗАЦИИ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Оптимизация — это целенаправленная деятельность, заключающаяся в получении наилучших результатов при соответствующих условиях. Постановка задачи оптимизации предполагает наличие объекта оптимизации, будь то человеческая деятельность в течение определенного периода времени или производственный процесс.

Решение любой задачи оптимизации начинают с выявления цели оптимизации, т. е. формулировки требований, предъявляемых к объекту оптимизации. От того, насколько правильно выражены эти требования, может зависеть возможность решения задачи.

Типичным случаем неправильной постановки условий задачи оптимизации является распространенная ошибка, когда предлагается найти оптимальные значения нескольких величин одновременно, например *«получить максимальный выход продукции при минимальном расходе сырья»*. Поскольку минимальный расход сырья, очевидно, равен нулю, ни о каком максимальном выходе продукции здесь нельзя говорить.

Правильная постановка оптимальной задачи при этом будет в любом из следующих вариантов: *«получить максимальный выход продукции при заданном расходе сырья»* или *«для заданного выхода продукции обеспечить минимальный расход сырья»*. В каждой такой формулировке соблюдается требование нахождения оптимального значения *только одной величины*, что является необходимым условием постановки оптимальной задачи.

Для решения задач оптимизации нужно располагать ресурсами оптимизации, под которыми понимают свободу выбора значений некоторых параметров оптимизируемого объекта. Другими словами, объект оптимизации должен обладать определенными степенями свободы — *управляющими воздействиями*, которые позволяют изменять его состояние в соответствии с теми или иными требованиями.

Наконец, еще одно условие правильной постановки оптимальной задачи заключается в наличии количественной оценки интересующего качества объекта оптимизации. Это условие также необходимо, поскольку лишь при его выполнении можно

сравнивать эффекты от выбора тех или иных управляющих воздействий.

Количественная оценка оптимизируемого качества объекта обычно называется *критерием оптимальности* или целевой функцией, функцией качества, экономическим критерием и т. д. Вид критерия оптимальности определяется конкретным содержанием решаемой задачи оптимизации и может оказывать существенное влияние на выбор метода решения. В конечном итоге достигаемое значение критерия оптимальности дает количественную оценку эффекта оптимизации.

Таким образом, для правильной постановки оптимальной задачи необходимо выполнение следующих условий: 1) требование оптимизации только одной величины; 2) наличие степеней свободы у оптимизируемого объекта — управляющих воздействий; 3) возможность количественной оценки оптимизируемой величины.

1. ЭКОНОМИЧЕСКАЯ ОЦЕНКА ЭФФЕКТИВНОСТИ ПРОЦЕССОВ

Постановка задачи оптимизации предполагает существование конкурирующих свойств процесса: *«количество продукции — качество продукции»*, *«количество продукции — расход сырья»* и т. п. Выбор компромиссного решения для указанных свойств и представляет собой в таких случаях процедуру решения оптимальной задачи. Следует отметить, что наличие конкурирующих свойств в особой мере характерно для постановки оптимальной задачи в терминах экономических оценок. В частных задачах оптимизации, когда требуется получить экстремальное значение какого-либо параметра объекта оптимизации, конкурирующие свойства так наглядно можно и не обнаружить. В этих случаях речь идет обычно об экстремальных свойствах самого объекта оптимизации, которые обусловлены природой проводимого в нем процесса. Примерами таких задач являются выбор оптимального времени пребывания для некоторых типов реакций, оптимального температурного профиля в реакторе вытеснения и т. п.

Возможность существования специфических экстремальных свойств объекта оптимизации всегда следует учитывать при рассмотрении конкретной оптимальной задачи, сформулированной в более общем виде, например, в терминах оценки экономической эффективности процесса. Учет этих свойств иногда позволяет упростить решение общей оптимальной задачи путем выделения в ней частных задач оптимизации, решение которых известно или может быть найдено относительно более простым способом. Такой прием иногда называют *подоптимизацией*, подчеркивая его вспомогательную роль в решении общей задачи.

Наиболее общей постановкой оптимальной задачи служит выражение критерия оптимальности в виде *экономической оценки*. Это связано, прежде всего, с созданием и эксплуатацией реального процесса, для чего необходимы некоторые материальные за-

траты, от которых ожидается определенный экономический эффект, исчисляемый в зависимости от количественных и качественных характеристик выпускаемой продукции.

Общую оценку экономической эффективности конкретного процесса производят, учитывая его следующие показатели:

1. Производительность B , т. е. объем выпускаемой продукции, которая измеряется в единицах продукции, вырабатываемой в единицу времени (кол. ед./ед. вр.).

2. Объем капитальных вложений Φ в данное производство, исчисляемый в денежных единицах (ден. ед.).

3. Эксплуатационные затраты Ξ на осуществление процесса производства, которые измеряются в денежных единицах, затрачиваемых в единицу времени (ден. ед./ед. вр.).

4. Качественные показатели выпускаемого продукта K , от которых главным образом зависит рентабельность производства, так как цена реализованной продукции характеризуется ее качеством.

Таким образом, в общем случае экономический критерий оптимальности процесса можно сформулировать как некоторую функцию от перечисленных выше показателей, т. е.

$$R = R(B, \Phi, \Xi, K) \quad (I, 1)$$

Конкретный вид зависимости (I, 1) может быть различным для разных вариантов постановки оптимальной задачи (например, себестоимость получаемой продукции, сумма прибыли в течение определенного промежутка времени, эффективность использования капитальных вложений и т. д.). Общим для всех случаев выражения критерия оптимальности (I, 1) является то, что его записи в конкретной форме должен предшествовать тщательный всесторонний экономический анализ оптимизируемого процесса.

Одним из важнейших показателей экономической эффективности процесса служит *себестоимость* выпускаемой продукции [1], которая включает стоимость израсходованных на производство целевого продукта сырья, материалов, топлива и энергии, амортизационные отчисления, заработную плату обслуживающего персонала и другие затраты на производство и реализацию продукции. Аналитическое выражение себестоимости можно представить в следующем виде:

$$s_{\text{пр}} = \frac{1}{B} (S_c + S_{\tau} + S_n) \quad (I, 2)$$

где через $s_{\text{пр}}$ обозначена себестоимость выпускаемой продукции, ден. ед./ед. прод., а через S_c , S_{τ} и S_n — соответственно затраты на сырье, переменные и постоянные расходы, ден. ед./ед. вр.

Рассмотрим в отдельности все составляющие себестоимости, определенной согласно выражению (I, 2).

Затраты на сырье S_c . Эту составляющую себестоимости (иногда ее включают в переменные расходы [1]) обычно можно принять пропорциональной объему выпускаемой продукции, т. е. производитель-

ности процесса В. Затраты на сырье могут исчисляться с учетом коэффициента использования сырья в процессе ν . Так, если принять, что стоимость исходного сырья, необходимого для производства единицы продукции, составляет s_c , а стоимость реализуемых при этом отходов сырья равна $s_{от}$, то общие затраты на сырье описываются выражением:

$$S_c = B [s_c - (1 - \nu) s_{от}] = Bs'_c \quad (I, 3)$$

При полном расходе сырья, например при рециркуляции непрореагировавших продуктов реакции в химическом процессе, коэффициент ν становится равным единице и затраты на сырье составляют:

$$S_c = Bs_c \quad (I, 4)$$

При решении задачи оптимизации коэффициент использования сырья можно рассматривать как переменную величину, значение которой зависит от режима процесса. Если образуется ряд побочных продуктов в количествах, пропорциональных производительности В, которые также реализуются по некоторым ценам, то получаемая при этом часть стоимости может быть отнесена к снижению расходов на сырье. Формулу для расчета затрат на сырье в данном случае можно записать в виде

$$S_c = B \left[s_c - (1 - \nu) s_{от} - \sum_{i=1}^n s_{поб, i} \beta_i \right] = Bs'_c \quad (I, 5)$$

причем $s_{поб, i}$ — стоимость от реализации единицы i -го побочного продукта, ден. ед./ед. прод.; β_i — коэффициент, показывающий, сколько единиц i -го побочного продукта образуется на единицу основного продукта процесса; n — число реализуемых побочных продуктов.

Коэффициенты β_i , как и коэффициент ν , при решении задачи оптимизации можно считать переменными величинами.

Переменные расходы S_T . Эта часть стоимости производства продукта включает стоимость электрической энергии, пара, охлаждающей воды, вспомогательных материалов, например катализатора, и принимается пропорциональной производительности процесса, т. е.

$$S_T = Bs_T \quad (I, 6)$$

Коэффициент s_T в выражении (I,6) представляет собой объем переменных расходов на единицу продукции и определяется сложившейся для данного процесса стоимостью перечисленных выше составляющих этих расходов, а также их относительным объемом, требуемым для нормальной эксплуатации производства. Расчет коэффициента s_T может быть выполнен по формуле:

$$s_T = \sum_{i=1}^m s_{э, i} q_i \quad (I, 7)$$

в которой $s_{э, i}$ — стоимость единицы энергетического потока (электроэнергии, пара и т. д.) или единицы вспомогательного (катализатора, растворителя и т. д.), ден. ед./ед. прод.; q_i — количество единиц i -го энергетического потока или вспомогательного материала, необходимых для производства единицы основной продукции (величины q_i могут зависеть от режима процесса), ед./ед. прод.

В переменные расходы иногда можно включать и заработную плату обслуживающего персонала. В особой мере это относится к тем производствам, где оплата производится в соответствии с объемом выпускаемой продукции, а также при премиальной системе оплаты труда. При этом выражение (I, 7) можно представить в виде:

$$s_{\pi} = \sum_{i=1}^m s_{э, i} q_i + s_э \quad (\text{I, 8})$$

причем $s_э$ — основной заработок или доплата к основному окладу обслуживающего персонала за единицу выпускаемой продукции, ден. ед./ед. прод.

Величина $s_э$, в свою очередь, может также зависеть от объема производства, например, при прогрессивно-премиальной оплате труда.

Постоянные расходы S_{π} . Эта часть расходов не зависит от объема выпускаемой продукции V и обусловлена объемом капитальных вложений Φ в основные фонды производства, стоимостью планового и профилактического ремонтов оборудования и уровнем заработной платы обслуживающего персонала, оплачиваемого по системе окладов. Рассмотрим отдельно основные составляющие постоянных расходов.

Амортизационные отчисления S_a . Амортизация — это процесс постепенного изнашивания основных фондов и перенесения их стоимости на производимый продукт в течение соответствующего срока службы указанных фондов. Важнейшим элементом расчета амортизации является *срок службы* основных фондов T , который исчисляется с учетом интенсивности используемого оборудования, его физического и морального износа. Размеры амортизационных отчислений определяются на основе нормы амортизации H_a , выраженной в процентах к первоначальной стоимости капиталовложений в данный процесс. При этом учитываются также затраты на капитальные ремонты оборудования P в течение их срока службы и ликвидационная стоимость основных фондов L . Тогда норма амортизации составит

$$H_a = \frac{\Phi + P - L}{\Phi T} \cdot 100\% \quad (\text{I, 9})$$

и амортизационные отчисления

$$S_a = \frac{\Phi H_a}{100} = \frac{\Phi + P - L}{T} \quad (\text{I, 10})$$

Стоимость профилактического ремонта S_p и заработная плата обслуживающего персонала S_z . Эти составляющие постоянных расходов определяются сложностью профилактических ремонтов, числом работников, обслуживающих производство, и уровнем их окладов. Количество ремонтов, проводимых в течение некоторого периода времени, может зависеть от интенсивности производства, т. е. в конечном итоге от производительности процесса V . При этом затраты на профилактические ремонты могут даже возрастать с увеличением V . Численность обслуживающего персонала зависит от уровня автоматизации производства. Чем в большей степени оно автоматизировано, тем меньше может быть составляющая заработной платы, но тем больше, вообще говоря, стоимость профилактических ремонтов и объем капиталовложений в оборудование для систем автоматизации. Вместе с тем, при анализе вопросов автоматизации необходимо принимать во внимание моральные факторы, связанные с облегчением условий работы, которые трудно поддаются экономической оценке.

Общее выражение для постоянных расходов можно записать в следующем виде:

$$S_n = S_a + S_p + S_z \quad (I, 11)$$

С учетом перечисленных выше факторов выражение для себестоимости (I, 2) может быть представлено в форме:

$$s_{np} = s'_c + s_t + \frac{\Phi + P - Л}{BT} + \frac{S_p + S_z}{B} \quad (I, 12)$$

Важным показателем экономической эффективности деятельности промышленного предприятия является прибыль от реализации продукции по установленным ценам. Очевидно, что сумма прибыли зависит от разности между ценой продукта и его себестоимостью и от объема производства. В соответствии с этим сумму прибыли, получаемой в единицу времени, можно рассчитать по формуле:

$$\Pi = B (s_n - s_{np}) \quad (I, 13)$$

в которой s_n — цена продукции, ден. ед./ед. прод.

Сама по себе сумма прибыли, определяемая выражением (I, 13), еще не может служить объективной оценкой эффективности производства, поскольку она не отражает абсолютных затрат, связанных с выпуском продукции. Например, для двух одинаковых производств с различной производительностью сумма прибыли может быть одинакова, а для производства большей мощности себестоимость при этом окажется более высокой.

Пусть $B_1 = 1000$ ед. прод./ед. вр., $B_2 = 2000$ ед. прод./ед. вр., $s_{np,1} = 100$ ден. ед./ед. прод. и $s_{np,2} = 120$ ден. ед./ед. прод. Тогда для $s_n = 140$ ден. ед./ед. прод. в обоих производствах прибыль, получаемая в единицу времени, одинакова и равна 40 000 ден. ед./ед. вр., в чем легко убедиться, под-

ставляя приведенные выше численные значения в формулу (I, 13). Однако очевидно, что первое производство в данном случае более рентабельно, так как соответствующая ему продукция имеет меньшую себестоимость.

Более полной оценкой экономической эффективности производства является оценка его деятельности при помощи *нормы прибыли* [2] H_{Π} , которая представляет собой выраженное в процентах отношение суммы прибыли, получаемой от реализации продукции по установленным ценам [см. формулу (I, 13)], к полным затратам на ее выпуск, равным произведению производительности B на себестоимость продукции $s_{\Pi p}$. Таким образом

$$H_{\Pi} = \frac{s_{\Pi} - s_{\Pi p}}{s_{\Pi p}} \quad (I, 14)$$

С учетом показателя нормы прибыли для приведенного выше примера сопоставления двух производств, имеющих одинаковые суммы прибыли от реализации продукции, соответственно находим:

$$H_{\Pi 1} = \frac{140 - 100}{100} \cdot 100 = 40\% \quad (a)$$

$$H_{\Pi 2} = \frac{140 - 120}{120} \cdot 100 = 16,7\% \quad (б)$$

Сравнение выражений (а) и (б) показывает, что для принятой цены на продукцию (140 ден. ед./ед. прод.) рентабельность первого производства почти в 2,5 раза выше.

Для определения экономической эффективности капиталовложений в производство иногда используют понятие нормы рентабельности, исчисляемой как отношение суммы прибыли к объему капиталовложений:

$$H_p = \frac{B(s_{\Pi} - s_{\Pi p})}{\Phi} \quad (I, 15)$$

При этом в объем капиталовложений могут быть также включены и оборотные фонды предприятия.

Достоинством экономических оценок эффективности процесса, основанных на показателях рентабельности (I, 14) и (I, 15), является то, что в них входит цена реализации продукции. Это позволяет планировать значения указанных показателей для заданного уровня цен.

Представляет интерес проанализировать задачу выбора оптимальной производительности процесса при использовании различных экономических оценок в качестве критерия оптимальности. При этом будет предполагаться, что известно оптимальное значение производительности $B_{\text{опт}}$, при которой достигается минимальная себестоимость выпускаемой продукции.

На рис. I-1 показан возможный характер зависимости себестоимости продукции $s_{\Pi p}$ от производительности B . Кривую $s_{\Pi p}(B)$ можно построить на основании экономического анализа производства, после чего определение оптимальной производительности не

составит труда. Заметим, что при оптимальном значении производительности $B_{\text{опт}}$ должно выполняться условие

$$\frac{\partial s_{\text{пр}}}{\partial B} = 0 \quad (I, 16)$$

поскольку себестоимость продукции $s_{\text{пр}}$, рассматриваемая как функция производительности B , имеет в данном случае экстремальное значение (минимум).

Прибыль в качестве критерия оптимальности. Оптимальное значение производительности при применении суммы прибыли как критерия оптимальности можно найти решением уравнения, полу-

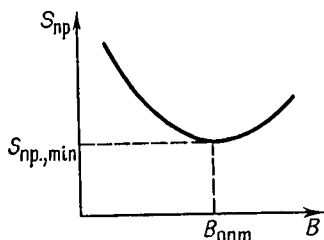


Рис. I-1. Зависимость себестоимости продукции $s_{\text{пр}}$ от производительности процесса B .

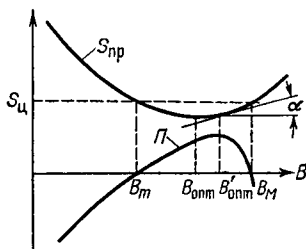


Рис. I-2. Зависимость прибыли Π , получаемой от реализации продукции, от производительности процесса B .

чаемого приравниванием нулю производной от правой части формулы (I, 13), которая определяет сумму прибыли, по величине B . Тогда

$$\frac{\partial \Pi}{\partial B} = s_{\text{ц}} - s_{\text{пр}} - B \frac{\partial s_{\text{пр}}}{\partial B} \quad (I, 17)$$

откуда находим

$$\frac{\partial s_{\text{пр}}}{\partial B} = \frac{s_{\text{ц}} - s_{\text{пр}}}{B} \quad (I, 18)$$

Величина производительности всегда положительна, поэтому знак правой части выражения (I, 18) определяется знаком разности между ценой $s_{\text{ц}}$ и себестоимостью $s_{\text{пр}}$ продукции. Когда цена продукции выше ее себестоимости, производная $\partial s_{\text{пр}}/\partial B$ положительна, и наоборот, если цена продукции ниже ее себестоимости, производная $\partial s_{\text{пр}}/\partial B$ должна быть отрицательной для выполнения условия (I, 18).

Из рис. I-1 видно, что положительному знаку производной $\partial s_{\text{пр}}/\partial B$ отвечают значения производительности, большие $B_{\text{опт}}$. Другими словами, для получения максимальной суммы прибыли необходимо проводить процесс при большем значении производительности $B'_{\text{опт}}$, чем это следует из условия минимизации себестоимости продукции. Подобная ситуация представлена на рис. I-2,

где тангенс угла α определяется выражением

$$\operatorname{tg} \alpha = \frac{s_{\text{ц}} - s_{\text{пр}}(B'_{\text{опт}})}{B_{\text{опт}}} \quad (\text{I, 19})$$

соответствующим условию (I, 18).

График на рис. I-2 показывает, что имеется ограниченная область изменения производительности ($B_{\text{м}}, B_{\text{М}}$), в которой прибыль существует. За пределами данной области прибыль становится отрицательной, при этом убытки производства определяются выражением (I, 13).

Если цена продукции меньше ее себестоимости (производство не дает прибыли), то убытки производства, характеризующиеся уравнением (I, 13), могут изменяться с увеличением производительности B (рис. I-3). При этом условие (I, 18) характеризует положение экстремума A данной зависимости. Разумеется, что в таких случаях нецелесообразно говорить о максимизации прибыли. Однако из рис. I-3 следует, что даже когда производство убыточное, то производительность процесса может варьироваться при одном и том же объеме затрат, например можно принять любую производительность B_1 или B_2 . Последнее может представлять также определенный интерес при организации производства.

Норма прибыли в качестве критерия оптимальности. Для нахождения оптимального значения производительности при использовании в качестве критерия оптимальности нормы прибыли применим тот же прием, что и выше, т. е. продифференцируем правую часть выражения (I, 14) по величине B и приравняем полученную производную нулю:

$$\frac{\partial H_{\text{п}}}{\partial B} = -\frac{1}{s_{\text{пр}}^2} \frac{\partial s_{\text{пр}}}{\partial B} = 0 \quad (\text{I, 20})$$

Нетрудно видеть, что выполнение условия (I, 20) возможно лишь при равенстве нулю производной $\partial s_{\text{пр}}/\partial B$, т. е. при соблюдении условия (I, 16). Это означает, что оптимальное значение производительности $B''_{\text{опт}}$, рассчитанное из условия максимизации нормы прибыли (I, 14), совпадает с оптимальным значением $B_{\text{опт}}$, которое определено из условия минимизации себестоимости продукции.

Норма рентабельности капиталовложений в качестве критерия оптимальности. При заданном объеме капиталовложений Φ

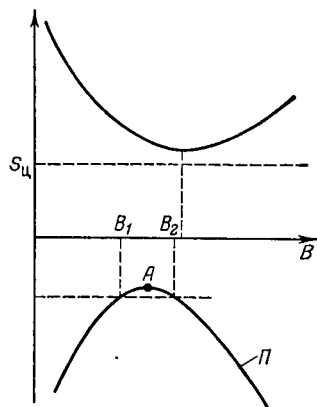


Рис. I-3. Зависимость объема затрат от производительности для нерентабельного процесса.

величина нормы их рентабельности, описываемой формулой (I, 15), с точностью до постоянного множителя совпадает с выражением для суммы прибыли (I, 13). Следовательно, оптимальное значение производительности, найденное из условия максимизации нормы рентабельности капиталовложений, идентично оптимальному значению, которое получено из условия максимизации суммы прибыли, и все приведенные выше рассуждения относительно последней справедливы также и для данного варианта. Отличие будет лишь в том случае, если принять, что объем капиталовложений в производство зависит от производительности, например, вследствие того, что объем оборотных средств пропорционален выпуску продукции. Легко видеть, что при такой постановке задачи оптимизации вместо уравнения (I, 18) можно получить соотношение:

$$\frac{\partial s_{\text{пр}}}{\partial B} = \frac{s_{\text{ц}} - s_{\text{пр}}}{B} \cdot \frac{1}{1 + B \frac{\Phi_0}{\Phi'}} \quad (\text{I, 21})$$

в котором Φ' — объем капиталовложений в основные фонды производства, ден. ед., а Φ_0 — объем оборотных средств на единицу выпуска продукции, ден. ед./ед. прод.

Анализ выражения (I, 21) показывает, что оптимальное значение производительности будет несколько меньшим, чем определенное из условия (I, 18), причем степень этого уменьшения зависит от отношения объема оборотных средств $B\Phi_0$ к объему капиталовложений в основные фонды Φ' .

До сих пор рассматривались экономические оценки эффективности процесса без учета качественных показателей продукции, которые не влияют прямо на образование ее себестоимости, а проявляют себя лишь в процессе ценообразования. Поэтому для учета указанных показателей при решении задачи оптимизации необходимо использовать экономические оценки, включающие цену продукции (прибыль, норма прибыли, норма рентабельности капиталовложений).

Предположим, что цена продукции зависит от качественных показателей K , на которые, в свою очередь, оказывает влияние производительность B . Допустим, также, что с возрастанием производительности качественные показатели будут ухудшаться, вследствие чего цена на продукт уменьшится, т. е.

$$\frac{\partial s_{\text{ц}}}{\partial B} < 0 \quad (\text{I, 22})$$

Тогда, чтобы оценить экономическую эффективность процесса выражением для суммы прибыли (I, 13) и найти соответствующую оптимальную производительность, получим уравнение:

$$\frac{\partial \Pi}{\partial B} = s_{\text{ц}} - s_{\text{пр}} + B \left(\frac{\partial s_{\text{ц}}}{\partial B} - \frac{\partial s_{\text{пр}}}{\partial B} \right) \quad (\text{I, 23})$$

откуда следует:

$$\frac{\partial S_{\text{пр}}}{\partial B} = \frac{s_{\text{ц}} - s_{\text{пр}}}{B} + \frac{\partial s_{\text{ц}}}{\partial B} \quad (I, 24)$$

Принимая во внимание условие (I, 22), приходим к выводу, что для достижения максимального значения суммы прибыли оптимальная производительность будет несколько меньше найденной по выражению (I, 18).

Если в качестве критерия оптимальности процесса принято уравнение для нормы прибыли (I, 14), то получим:

$$\frac{\partial H_{\text{п}}}{\partial B} = \frac{1}{s_{\text{пр}}^2} \left(s_{\text{пр}} \frac{\partial s_{\text{ц}}}{\partial B} - s_{\text{ц}} \frac{\partial s_{\text{пр}}}{\partial B} \right) \quad (I, 25)$$

$$\frac{\partial s_{\text{пр}}}{\partial B} = \frac{s_{\text{пр}}}{s_{\text{ц}}} \frac{\partial s_{\text{ц}}}{\partial B} \quad (I, 26)$$

Тогда из условия (I, 22) следует, что для обеспечения максимального значения нормы прибыли (I, 14) производная $\partial s_{\text{пр}}/\partial B$ должна быть отрицательной. Другими словами, необходимо, чтобы оптимальное значение производительности было меньше, чем рассчитанное из условия минимизации себестоимости продукции.

Аналогично можно исследовать и другие экономические оценки эффективности производства.

В описанных выше примерах речь шла об определении оптимального стационарного режима процесса, который характерен для непрерывных производств. Эти же результаты могут быть перенесены и на периодические процессы, если анализ их экономических показателей охватывает достаточно большой период времени, в течение которого выполняется несколько циклов периодического производства.

Однако наряду с задачами оптимизации стационарных режимов процессов, которые можно охарактеризовать как *задачи статической оптимизации*, существует целый ряд задач оптимального управления при нестационарных режимах эксплуатации, для решения которых требуется изучение динамики процесса. Эти задачи носят название *задач динамической оптимизации*. Примером может служить задача оптимального управления периодическим процессом за один рабочий цикл, когда нужно так выбрать закон управления, чтобы получить продукт необходимого качества в течение минимального периода или при заданном времени цикла обеспечить максимальный выход продукции. Сюда же можно отнести задачи пуска процесса и перевода его с одного режима на другой при минимальных отклонениях качества продукции.

Особенностью задач динамической оптимизации является то, что значение критерия оптимальности определяется не только положением, существующим в рассматриваемый момент времени, но предысторией процесса, начиная с некоторого начального момента. Поэтому оценка эффективности процесса должна учитывать его поведение в течение всего исследуемого нестационарного

периода. Это приводит к необходимости использования в качестве критериев оптимальности интегральных оценок (функционалов) вида

$$I = \int_0^{t^{(k)}} R dt \quad (I, 27)$$

в которых R представляет собой заданную функцию параметров, определяющих состояние процесса в любой момент времени.

Аналогичные оценки применяют также и при оптимизации процессов с распределенными параметрами, примеры которых приведены в последующих главах.

2. МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ПРОЦЕССОВ И ИХ РОЛЬ В РЕШЕНИИ ОПТИМАЛЬНЫХ ЗАДАЧ

Любой процесс, исходя из внешних признаков, может быть условно изображен так, как показано на рис. I-4, где выделены основные группы параметров, определяющих его течение и характеризующих состояние в любой момент времени. Обычно выделяют следующие группы:

1. *Входные параметры* $x_i^{(0)}$ ($i = 1, \dots, m$). Входными называют параметры, значения которых могут быть измерены, но возможность воздействия на них отсутствует. Предполагается также,

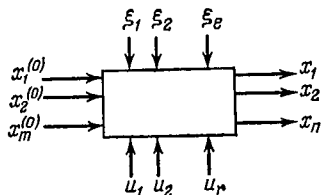


Рис. I-4. Схематическое изображение процесса.

что значения указанных параметров не зависят от режима процесса. Для химического реактора это может быть, например, контролируемый состав исходного сырья, не поддающийся регулировке в процессе эксплуатации.

2. *Управляющие параметры* u_i ($i = 1, \dots, r$). Под управляющими понимают параметры, на которые можно оказывать прямое воздействие в соответствии с теми или иными требованиями, что позволяет управлять процессом. Такими параметрами для химического реактора могут быть, например, регулируемое количество исходной смеси, подаваемой в реактор, регулируемое давление в реакторе и температура теплоносителя и т. д.

3. *Возмущающие параметры* ξ_i ($i = 1, \dots, l$). Возмущающими называют параметры, значения которых случайным образом изменяются с течением времени и которые недоступны для измерения. Это могут быть, например, различные примеси в исходном сырье для химической реакции, постепенное изменение активности катализатора и т. д.

4. *Выходные параметры* x_i ($i = 1, \dots, n$). Под выходными понимают параметры, величины которых определяются режимом процесса и которые характеризуют его состояние, возникающее в результате суммарного воздействия входных, управляющих и возмущающих параметров. Иногда выходные параметры называют также параметрами или переменными состояния, подчеркивая тем самым их назначение описывать состояние процесса. Однако понятие «параметры состояния» является более широким, чем понятие «выходные параметры», поскольку к выходным обычно относят только характеристики получаемой продукции, тогда как параметрами состояния служат также характеристики режима процесса, например температуры в различных точках аппарата, составы и т. д.

По отношению к процессу входные и управляющие параметры можно считать внешними, что подчеркивает независимость их значений от режима процесса. Напротив, выходные параметры или параметры состояния в данном случае определяются как *внутренние*, на которые непосредственно влияет режим процесса. Возмущающие параметры при этом могут относиться и к внешним, и к внутренним. Например, неконтролируемые примеси в исходном сырье можно рассматривать как внешнее возмущающее воздействие, а изменение активности катализатора с течением времени — как внутреннее возмущение.

Однако в любом случае действие возмущающих параметров проявляется в том, что параметры состояния процесса при известной совокупности входных и управляющих параметров характеризуются неоднозначно. Процессы, в которых влияние случайных возмущающих параметров велико, обычно называют *стохастическими* в отличие от *детерминированных*, для которых предполагается, что параметры состояния однозначно определяются заданием входных и управляющих воздействий.

Для изучения стохастических процессов обычно используют математический аппарат теории вероятностей, при помощи которого параметры состояния оцениваются в терминах математического ожидания, а возмущающие параметры характеризуются вероятностными законами распределения.

Изложение методов оптимизации в последующих главах относится лишь к детерминированным процессам, поэтому в дальнейшем, как правило, принимается, что случайные возмущающие параметры в них отсутствуют.

Для описания совокупностей входных, управляющих параметров и параметров состояния ниже часто будет применяться следующая векторная форма записи

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^{(0)} &= (x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \dots, x_m^{(0)}) \\ \mathbf{u} &= (u_1, u_2, \dots, u_r) \\ \mathbf{x} &= (x_1, x_2, \dots, x_n) \end{aligned} \tag{I, 28}$$

с учетом которой зависимость выходных параметров процесса от входных и управляющих можно записать в виде:

$$\mathbf{x} = \varphi(\mathbf{x}^{(0)}, \mathbf{u}) \quad (I, 29)$$

Величина φ также рассматривается как вектор-функция, поэтому

$$x_i = \varphi_i(\mathbf{x}^{(0)}, \mathbf{u}) \quad i = 1, \dots, n \quad (I, 29a)$$

Если вид соотношений (I, 29) известен, то говорят, что известна математическая модель процесса.

Критерий оптимальности детерминированного процесса представляется как функция входных, выходных и управляющих параметров

$$R = R(\mathbf{x}^{(0)}, \mathbf{x}, \mathbf{u}) \quad (I, 30)$$

которая в общем случае может иметь вид функционала (I, 27).

При решении задачи оптимизации, т. е. задачи определения наибольшего или наименьшего значения R , критерий оптимальности рассматривается как функция управляющих параметров $\mathbf{u}$. При этом всякое изменение значений указанных параметров двояко сказывается на критерии оптимальности. Во-первых, прямо, если управляющие параметры непосредственно входят в выражение критерия оптимальности, и, во-вторых, косвенно, через изменение выходных параметров процесса, которые зависят от управляющих на основании соотношения (I, 29).

Подставляя уравнения (I, 29) в выражение критерия оптимальности (I, 30), можно представить его как функцию только входных и управляющих параметров процесса

$$R = R^*(\mathbf{x}^{(0)}, \mathbf{u}) \quad (I, 31)$$

Решение задачи оптимизации в этом случае получается в виде зависимости управляющих параметров процесса $\mathbf{u}$ от входных параметров $\mathbf{x}^{(0)}$ и, возможно, также от времени t и пространственных координат $\mathbf{z}$ оптимизируемого объекта:

$$\mathbf{u}_{\text{опт}} = \mathbf{u}(\mathbf{x}^{(0)}, \mathbf{z}, t) \quad (I, 32)$$

Из сказанного выше следует, что задача оптимизации решается лишь тогда, когда известен вид зависимости выходных параметров процесса $\mathbf{x}$ от входных $\mathbf{x}^{(0)}$ и управляющих $\mathbf{u}$, т. е. вид соотношений (I, 29a). Эту зависимость можно вывести только в результате предварительного изучения свойств оптимизируемого процесса, аналитическое выражение которых и составляет математическое описание процесса.

Практически любой исследуемый процесс может быть отнесен к классу объектов с сосредоточенными или распределенными параметрами. Определяющим признаком объекта с *сосредоточенными параметрами* является изменение параметров, описывающих его состояние только во времени. Параметры состояния для объектов

с распределенными параметрами могут изменяться как во времени, так и в пространстве, т. е. могут являться функциями пространственных координат объекта.

Математическое описание каждого процесса задается системой конечных или дифференциальных уравнений, отражающих взаимное влияние различных параметров, причем присутствие в математическом описании уравнений одного вида (например, конечных) не исключает возможности присутствия и уравнений другого вида (дифференциальных). Обычно параметры состояния x_i входят в эти уравнения в неявном виде. Поэтому для вывода соотношений (I, 29), используемых при решении задачи оптимизации, систему уравнений математического описания необходимо разрешить относительно выходных параметров или параметров состояния.

Получение соотношений (I, 29) в явном аналитическом виде непосредственно из уравнений математического описания, как правило, невозможно. Вследствие этого для нахождения вида указанных зависимостей необходимо иметь определенный алгоритм решения системы уравнений математического описания, применяя который для любой совокупности значений входных и управляющих параметров можно рассчитать параметры состояния.

Таким образом, математическая модель представляет собой систему уравнений математического описания, отражающую сущность явлений, протекающих в объекте моделирования, которая с помощью определенного алгоритма позволяет прогнозировать поведение объекта при изменении входных и управляющих параметров.

Большая часть методов решения оптимальных задач основана на предположении, что математическая модель оптимизируемого объекта известна. Более того, многие методы оптимизации используют конкретные свойства объекта и его математического описания. Например, для многостадийных процессов эффективным методом оптимизации является динамическое программирование; для процессов, описываемых дифференциальными уравнениями, — принцип максимума.

Разумеется, принципиально возможно при решении задачи оптимизации вместо математической модели применять и сам оптимизируемый объект (если он существует), для чего его следует оборудовать соответствующими измерительными средствами, дающими возможность определять реакцию объекта на любое изменение входных и управляющих параметров, т. е. в конечном итоге получать зависимость (I, 29). Именно этот путь используют при построении систем экстремального регулирования, задача которых заключается в автоматическом поддержании оптимального режима процесса [3]. Однако такой подход к оптимизации часто требует существенного вмешательства в нормальное течение процесса, поскольку по результатам измерения параметров только одного режима нельзя установить, оптимален он или нет. Последнее приводит к необходимости искусственного отклонения от исследуемого

режима обычно за счет изменения управляющих параметров. В зависимости от результатов указанного отклонения в дальнейшем принимают те или иные меры для улучшения данного режима.

Отсюда следует, насколько важно иметь математическую модель процесса, которая позволяет, не затрагивая сам процесс, определить, какое решение нужно принять, чтобы улучшить его режим. При этом эксперимент на процессе фактически заменяется экспериментом на его модели.

Очевидно, что для успешного использования математической модели при решении задач оптимизации необходимо, чтобы модель достаточно верно описывала качественно и количественно свойства объекта моделирования, т. е. она должна быть адекватна моделируемому объекту. Для проверки адекватности математической модели реальному процессу нужно сравнить результаты измерения на процессе с результатами предсказания модели в идентичных условиях (при определенных значениях входных и управляющих параметров). Поэтому всегда желательно, перед тем как приступить к решению оптимальной задачи, удостовериться в адекватности имеющейся модели. С одной стороны, такая проверка позволяет оценить точность математической модели и, следовательно, возможность ее применения для целей оптимизации. С другой стороны, она может быть использована для устранения систематических ошибок в результатах моделирования, обусловленных неточным заданием в уравнениях математического описания ряда численных параметров, значения которых нельзя задать достаточно точно, исходя только из теоретических соображений или из предшествующего опыта.

На практике все же приходится считаться с тем, что никакая модель не может полностью заменить моделируемый объект, и мириться с необходимостью применения моделей, которые лишь с тем или иным приближением предсказывают поведение реального объекта. В значительной степени это обусловлено наличием в процессе возмущающих параметров, вносящих определенный шумовой фон в результаты измерений на реальном объекте. В таких случаях, если указанный фон недопустимо велик, нужно проводить дополнительные исследования для выявления возмущающих параметров процесса с последующим учетом их (уже в качестве входных) в составе математического описания.

Достоинство метода математического моделирования заключается также и в том, что различные по характеру процессы могут иметь сходные математические модели. Это свойство аналогий позволяет, во-первых, при решении задач моделирования и оптимизации использовать аналоговую вычислительную технику, а во-вторых, в результате решения одной конкретной задачи получать информацию о свойствах целого класса объектов, характеризующихся аналогичными математическими описаниями. Последнее обстоятельство является одним из важнейших следствий применения метода математического моделирования. Становится возможным ис-

пользовать результаты, полученные при изучении одних объектов, для исследования других, даже относящихся к другой области науки или техники [4].

Решение задач оптимизации и сопутствующих им задач математического моделирования связано, как правило, с выполнением довольно значительного объема расчетов. Этим до некоторой степени объясняется то, что до создания вычислительных машин, способных быстро и точно производить большой объем вычислительной работы, методы оптимального проектирования практически не имели широкого распространения. Появление вычислительных машин позволило качественно изменить отношение исследователя к задачам оптимизации, где от него теперь требуются *предельно точная формулировка задачи и разработка алгоритма ее решения*.

В настоящее время для решения вычислительных задач используют в основном аналоговые и цифровые [5, 6] вычислительные машины. Кроме того, разрабатываются также «гибридные» вычислительные машины [7], сочетающие преимущества обоих типов машин. Для преодоления трудностей, обусловленных программированием вычислительных алгоритмов на конкретных цифровых машинах, созданы различные языки программирования, к числу которых относятся АЛГОЛ [8], ФОРТРАН и т. п. Современные вычислительные машины, как правило, снабжаются соответствующими трансляторами, что делает их доступными любому вычислителю, знакомому с данным алгоритмическим языком.

3. ХАРАКТЕРИСТИКА МЕТОДОВ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ОПТИМИЗАЦИИ

При решении конкретной задачи оптимизации исследователь прежде всего должен выбрать математический метод, который привел бы к конечным результатам с наименьшими затратами на вычисления или же давал возможность получить наибольший объем информации об искомом решении. Выбор того или иного метода в значительной степени определяется постановкой оптимальной задачи, а также используемой математической моделью объекта оптимизации.

В настоящее время для решения оптимальных задач применяют в основном следующие методы: 1) методы исследования функций классического анализа; 2) методы, основанные на использовании неопределенных множителей Лагранжа; 3) вариационное исчисление; 4) динамическое программирование; 5) принцип максимума; 6) линейное программирование; 7) нелинейное программирование. В последнее время разработан и успешно применяется для решения определенного класса задач метод *геометрического программирования* (см. главу X).

Как правило, нельзя рекомендовать какой-либо один метод, который можно использовать для решения всех без исключения задач, возникающих на практике. Одни методы в этом отношении являются более общими, другие — менее общими. Наконец, целую

группу методов (методы исследования функций классического анализа, метод множителей Лагранжа, методы нелинейного программирования) на определенных этапах решения оптимальной задачи можно применять в сочетании с другими методами, например динамическим программированием или принципом максимума.

Отметим также, что некоторые методы специально разработаны или наилучшим образом подходят для решения оптимальных задач с математическими моделями определенного вида. Так, математический аппарат линейного программирования специально создан для решения задач с линейными критериями оптимальности и линейными ограничениями на переменные и позволяет решать большинство задач, сформулированных в такой постановке. Так же и геометрическое программирование предназначено для решения оптимальных задач, в которых критерий оптимальности и ограничения представляются специального вида функциями — *п о з и н о м а м и* (см. стр. 547).

Динамическое программирование хорошо приспособлено для решения задач оптимизации многостадийных процессов, особенно тех, в которых состояние каждой стадии характеризуется относительно небольшим числом переменных состояний. Однако при наличии значительного числа этих переменных, т. е. при высокой размерности каждой стадии, применение метода динамического программирования затруднительно вследствие ограниченных быстроедействия и объема памяти вычислительных машин.

Пожалуй, наилучшим путем при выборе метода оптимизации, наиболее пригодного для решения соответствующей задачи, следует признать исследование возможностей и опыта применения различных методов оптимизации. В последующих главах будут рассмотрены перечисленные выше математические методы решения оптимальных задач и примеры их использования. Здесь же дана лишь краткая характеристика указанных методов и областей их применения, что до некоторой степени может облегчить выбор того или иного метода для решения конкретной оптимальной задачи.

Методы исследования функций классического анализа (см. главу III) представляют собой наиболее известные методы решения несложных оптимальных задач, с которыми инженер знакомится при изучении курса математического анализа. Обычной областью использования данных методов являются задачи с известным аналитическим выражением критерия оптимальности, что позволяет найти не очень сложное, также аналитическое выражение для производных. Полученные приравниванием нулю производных уравнения, определяющие экстремальные решения оптимальной задачи, крайне редко удается решить аналитическим путем, поэтому, как правило, применяют вычислительные машины. При этом надо решить систему конечных уравнений, чаще всего нелинейных, для чего приходится использовать численные методы, аналогичные методам нелинейного программирования (см. главу IX).

Дополнительные трудности при решении оптимальной задачи методами исследования функций классического анализа возникают вследствие того, что система уравнений, получаемая в результате их применения, обеспечивает лишь необходимые условия оптимальности. Поэтому все решения данной системы (а их может быть и несколько) должны быть проверены на достаточность. В результате такой проверки сначала отбрасывают решения, которые не определяют экстремальные значения критерия оптимальности, а затем среди остающихся экстремальных решений выбирают решение, удовлетворяющее условиям оптимальной задачи, т. е. наибольшему или наименьшему значению критерия оптимальности в зависимости от постановки задачи.

Методы исследования при наличии ограничений на область изменения независимых переменных можно использовать только для отыскания экстремальных значений внутри указанной области. В особенности это относится к задачам с большим числом независимых переменных (практически больше двух), в которых анализ значений критерия оптимальности на границе допустимой области изменения переменных становится весьма сложным.

Метод множителей Лагранжа (см. главу IV) применяют для решения задач такого же класса сложности, как и при использовании обычных методов исследования функций, но при наличии ограничений типа равенств на независимые переменные. К требованию возможности получения аналитических выражений для производных от критерия оптимальности при этом добавляется аналогичное требование относительно аналитического вида уравнений ограничений.

В основном при использовании метода множителей Лагранжа приходится решать те же задачи, что и без ограничений. Некоторое усложнение в данном случае возникает лишь от введения дополнительных неопределенных множителей, вследствие чего порядок системы уравнений, решаемой для нахождения экстремумов критерия оптимальности, соответственно повышается на число ограничений. В остальном процедура поиска решений и проверки их на оптимальность отвечает процедуре решения задач без ограничений.

Множители Лагранжа можно применять для решения задач оптимизации объектов с распределенными параметрами и задач динамической оптимизации (см. главу IV, стр. 148). При этом вместо решения системы конечных уравнений для отыскания оптимума необходимо интегрировать систему дифференциальных уравнений.

Следует отметить, что множители Лагранжа используют также в качестве вспомогательного средства и при решении специальными методами задач других классов с ограничениями типа равенств, например, в вариационном исчислении и динамическом программировании. Особенно эффективно применение множителей Лагранжа в методе динамического программирования, где с их

помощью иногда удается снизить размерность решаемой задачи (см. главу VI, стр. 280).

Методы вариационного исчисления (см. главу V) обычно используют для решения задач, в которых критерии оптимальности представляются в виде функционалов (I, 27) и решениями которых служат неизвестные функции. Такие задачи возникают обычно при статической оптимизации процессов с распределенными параметрами или в задачах динамической оптимизации.

Вариационные методы позволяют в этом случае свести решение оптимальной задачи к интегрированию системы дифференциальных уравнений Эйлера, каждое из которых является нелинейным дифференциальным уравнением второго порядка с граничными условиями, заданными на обоих концах интервала интегрирования. Число уравнений указанной системы при этом равно числу неизвестных функций, определяемых при решении оптимальной задачи. Каждую функцию находят в результате интегрирования получаемой системы.

Уравнения Эйлера выводятся как необходимые условия экстремума функционала. Поэтому полученные интегрированием системы дифференциальных уравнений функции должны быть проверены на экстремум функционала (см. главу V, стр. 213).

При наличии ограничений типа равенств, имеющих вид функционалов, применяют множители Лагранжа, что дает возможность перейти от условной задачи к безусловной. Наиболее значительные трудности при использовании вариационных методов возникают в случае решения задач с ограничениями типа неравенств.

Заслуживают внимания прямые методы решения задач оптимизации функционалов (см. главу V, стр. 232), обычно позволяющие свести исходную вариационную задачу к задаче нелинейного программирования, решить которую иногда проще, чем крайнюю задачу для уравнений Эйлера.

Динамическое программирование (см. главу VI) служит эффективным методом решения задач оптимизации дискретных многостадийных процессов, для которых критерий оптимальности задается как аддитивная функция критериев оптимальности отдельных стадий. Без особых затруднений указанный метод можно распространить и на случай, когда критерий оптимальности задан в другой форме, однако при этом обычно увеличивается размерность отдельных стадий.

По существу метод динамического программирования представляет собой алгоритм определения оптимальной стратегии управления на всех стадиях процесса. При этом закон управления на каждой стадии находят путем решения частных задач оптимизации последовательно для всех стадий процесса с помощью методов исследования функций классического анализа или методов нелинейного программирования. Результаты решения обычно не могут быть выражены в аналитической форме, а получаются в виде таблиц.

Ограничения на переменные задачи не оказывают влияния на общий алгоритм решения, а учитываются при решении частных задач оптимизации на каждой стадии процесса. При наличии ограничений типа равенств иногда даже удается снизить размерность этих частных задач за счет использования множителей Лагранжа.

Применение метода динамического программирования для оптимизации процессов с распределенными параметрами или в задачах динамической оптимизации приводит к решению дифференциальных уравнений в частных производных. Вместо решения таких уравнений зачастую значительно проще представить непрерывный процесс как дискретный с достаточно большим числом стадий. Подобный прием оправдан особенно в тех случаях, когда имеются ограничения на переменные задачи и прямое решение дифференциальных уравнений осложняется необходимостью учета указанных ограничений.

При решении задач методом динамического программирования, как правило, используют цифровые вычислительные машины, обладающие достаточным объемом памяти для хранения промежуточных результатов решения, которые обычно получают в табличной форме.

Принцип максимума (см. главу VII) применяют для решения задач оптимизации процессов, описываемых системами дифференциальных уравнений. Достоинством математического аппарата принципа максимума является то, что решение может определяться в виде разрывных функций; это свойственно многим задачам оптимизации, например задачам оптимального управления объектами, описываемыми линейными дифференциальными уравнениями.

Нахождение оптимального решения при использовании принципа максимума сводится к задаче интегрирования системы дифференциальных уравнений процесса и сопряженной системы для вспомогательных функций при граничных условиях, заданных на обоих концах интервала интегрирования, т. е. к решению краевой задачи. На область изменения переменных могут быть наложены ограничения. Систему дифференциальных уравнений интегрируют, применяя обычные программы на цифровых вычислительных машинах.

Принцип максимума для процессов, описываемых дифференциальными уравнениями, при некоторых предположениях является и достаточным условием оптимальности. Поэтому дополнительной проверки на оптимум получаемых решений обычно не требуется.

Для дискретных процессов принцип максимума в той же формулировке, что и для непрерывных, вообще говоря, несправедлив. Однако условия оптимальности, получаемые при его применении для многостадийных процессов, позволяют найти достаточно удобные алгоритмы оптимизации.

Линейное программирование (см. главу VIII) представляет собой математический аппарат, разработанный для решения

оптимальных задач с линейными выражениями для критерия оптимальности и линейными ограничениями на область изменения переменных. Такие задачи обычно встречаются при решении вопросов оптимального планирования производства с ограниченным количеством ресурсов, при определении оптимального плана перевозок (транспортные задачи) и т. д.

Для решения большого круга задач линейного программирования имеется практически универсальный алгоритм — *симплексный метод*, позволяющий за конечное число итераций находить оптимальное решение подавляющего большинства задач. Тип используемых ограничений (равенства или неравенства) не сказывается на возможности применения указанного алгоритма. Дополнительной проверки на оптимальность для получаемых решений не требуется. Как правило, практические задачи линейного программирования отличаются весьма значительным числом независимых переменных. Поэтому для их решения обычно используют вычислительные машины, необходимая мощность которых определяется размерностью решаемой задачи.

Методы нелинейного программирования (см. главу IX) применяются для решения оптимальных задач с нелинейными функциями цели. На независимые переменные могут быть наложены ограничения также в виде нелинейных соотношений, имеющих вид равенств или неравенств. По существу методы нелинейного программирования используют, если ни один из перечисленных выше методов не позволяет сколько-нибудь продвинуться в решении оптимальной задачи. Поэтому указанные методы иногда называют также *прямыми методами* решения оптимальных задач.

Для получения численных результатов важное место отводится нелинейному программированию и в решении оптимальных задач такими методами, как динамическое программирование, принцип максимума и т. п. на определенных этапах их применения.

Названием «методы нелинейного программирования» объединяется большая группа численных методов, многие из которых приспособлены для решения оптимальных задач соответствующего класса. Выбор того или иного метода обусловлен сложностью вычисления критерия оптимальности и сложностью ограничивающих условий, необходимой точностью решения, мощностью имеющейся вычислительной машины и т. д. Ряд методов нелинейного программирования практически постоянно используется в сочетании с другими методами оптимизации, как, например, *метод сканирования* (см. главу IX, стр. 508) в динамическом программировании. Кроме того, эти методы служат основой построения систем автоматической оптимизации — **оптимизаторов**, непосредственно применяющихся для управления производственными процессами.

Геометрическое программирование (подробно см. главу X) есть метод решения одного специального класса задач нелинейного программирования, в которых критерий оптимальности и ограничения задаются в виде полиномов — выражений, представляющих собой

сумму произведений степенных функций от независимых переменных. С подобными задачами иногда приходится сталкиваться в проектировании. Кроме того, некоторые задачи нелинейного программирования иногда можно свести к указанному представлению, используя аппроксимационное представление для целевых функций и ограничений.

Специфической особенностью методов решения оптимальных задач (за исключением методов нелинейного программирования) является то, что до некоторого этапа оптимальную задачу решают аналитически, т. е. находят определенные аналитические выражения, например, системы конечных или дифференциальных уравнений, откуда уже отыскивают оптимальное решение. В отличие от указанных методов при использовании методов нелинейного программирования, которые, как уже отмечалось выше, могут быть названы прямыми, применяют информацию, получаемую при вычислении критерия оптимальности, изменение которого служит оценкой эффективности того или иного действия.

Важной характеристикой любой оптимальной задачи является ее размерность n , равная числу переменных, задание значений которых необходимо для однозначного определения состояния оптимизируемого объекта. Как правило, решение задач высокой размерности связано с необходимостью выполнения большого объема вычислений. Ряд методов (например, динамическое программирование и дискретный принцип максимума) специально предназначен для решения задач оптимизации процессов высокой размерности, которые могут быть представлены как многостадийные процессы с относительно невысокой размерностью каждой стадии.

В табл. 1 дана характеристика областей применения различных методов оптимизации, при этом за основу положена сравнительная оценка эффективности использования каждого метода для решения различных типов оптимальных задач. Классификация задач проведена по следующим признакам: 1) вид математического описания процесса; 2) тип ограничений на переменные процесса и 3) число переменных. Предполагается, что решение оптимальной задачи для процессов, описываемых системами конечных уравнений, определяется как конечный набор значений управляющих воздействий (статическая оптимизация процессов с сосредоточенными параметрами), а для процессов, описываемых системами обыкновенных дифференциальных уравнений; управляющие воздействия характеризуются функциями времени (динамическая оптимизация процессов с сосредоточенными параметрами) или пространственных переменных (статическая оптимизация процессов с распределенными параметрами).

Классификация задач по группам с числом независимых переменных, большим и меньшим трех или равным трем как характеристика размерности задач с большим и малым числом переменных, разумеется, весьма условна и в данном случае выбрана скорее из соображений наглядности графического изображения

ТАБЛИЦА I
Области применения методов оптимизации

Вид описания процесса	Конечные уравнения						Дифференциальные уравнения					
	Нет			Равенства			Неравенства			Нет		
	≤ 3	> 3		≤ 3	> 3		≤ 3	> 3		≤ 3	> 3	
Тип ограничений на переменные												
Число переменных n												
Методы классического анализа	1	2		4	4		4	4		3	4	
Множители Лагранжа	—	—		1	2		—	—		—	2	
Вариационное исчисление	—	—		—	—		—	—		2	3; 7	
Динамическое программирование	1; 5	3; 5		1; 5; 7	3; 5; 7		1; 5	3; 5		2	3	
Принцип максимума	2; 5	1; 5		2; 5	2; 5		2; 5	2; 5		1	2	
Линейное программирование	—	—		—	2; 6		2; 6	1; 6		—	—	
Методы нелинейного программирования	2	1		2	1		2	1		4	4	
Геометрическое программирование	2; 8	2; 8		—	—		2; 8	2; 8		—	—	

Наименование метода

Примечания: 1. Эффективное применение метода. 2. Используется. 3. Возможно применение. 4. Используется как вспомогательный метод. 5. Многоэтапные процессы (размерность указывается для отдельной стадии). 6. Задача с линейными критериями оптимальности и линейными ограничениями. 7. Используются множители Лагранжа. 8. Задача с критериями и ограничениями в форме полиномов.

пространства изменения переменных задачи — фазового пространства (при числе переменных большем трех графическое изображение фазового пространства обычными приемами отсутствует). Тем не менее, такая классификация до некоторой степени все же отражает действительные трудности, возникающие при решении задач с размерностью выше трех.

4. ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТЬ ОПТИМУМА

Решение оптимальной задачи, полученное с использованием математической модели процесса, всегда дает лишь идеализированное представление об оптимальном режиме реального процесса, так как никакая модель не может полностью заменить оптимизируемый объект. Кроме того, при применении такого режима неизбежны отклонения от найденного закона оптимального управления. Поэтому, прежде чем перейти к вопросам практической реализации оптимального режима, интересно хотя бы приближенно оценить чувствительность найденного оптимального решения к изменению параметров модели и, в частности, к изменению управляющих воздействий.

Под *чувствительностью оптимума* ниже будет пониматься относительное изменение критерия оптимальности при отклонении управляющих воздействий от оптимальных значений. Вообще говоря, в приведенное определение чувствительности оптимума следует включить не только зависимость критерия от управляющих воздействий, но также и от всех остальных параметров математической модели, для которых в процессе моделирования необходимо задавать численные значения. В этом случае постановка задачи исследования чувствительности оптимума, найденного на математической модели процесса, окажется наиболее полной. Однако принципиально анализ чувствительности оптимума несмотря на то, по какому параметру ее исследуют, проводят аналогичными методами. Поэтому в дальнейшем ограничимся рассмотрением чувствительности только по отношению к управляющим воздействиям.

Предположим, что известно оптимальное управление $u_{i, \text{опт}}$ ($i = 1, \dots, r$), максимизирующее значение критерия оптимальности R , который при этом принимается только как функция управляющих воздействий:

$$R = R(u_1, \dots, u_r) \quad (\text{I, 83})$$

При отклонении управляющих воздействий от оптимальных значений $u_{i, \text{опт}}$ на величины Δu_i изменение критерия оптимальности определится выражением:

$$\Delta R = R(u_{1, \text{опт}} + \Delta u_1, \dots, u_{r, \text{опт}} + \Delta u_r) - R(u_{1, \text{опт}}, \dots, u_{r, \text{опт}}) \quad (\text{I, 84})$$

Для малых значений Δu_i оценка изменения критерия оптимальности может быть получена разложением правой части выражения

(I, 34) в ряде по степеням Δu_i с точностью до членов второго порядка малости:

$$\Delta R = \sum_{i=1}^r \frac{\partial R}{\partial u_i} \Delta u_i + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^r \sum_{k=1}^r \frac{\partial^2 R}{\partial u_i \partial u_k} \Delta u_i \Delta u_k \quad (\text{I, 35})$$

Полагая, что оптимум находится внутри допустимой области изменения значений управляющих воздействий и что функция R по крайней мере дважды дифференцируема в этой области, для оптимального управления будем иметь:

$$\frac{\partial R}{\partial u_i} = 0 \quad i = 1, \dots, r \quad (\text{I, 36})$$

С учетом равенства (I, 36) выражение для оценки изменения критерия оптимальности можно записать в виде:

$$\Delta R = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^r \sum_{k=1}^r \frac{\partial^2 R}{\partial u_i \partial u_k} \Delta u_i \Delta u_k \quad (\text{I, 37})$$

Допустим, что максимальное отклонение управляющих воздействий от оптимального значения не превышает величины ρ . В данном случае может быть принято неравенство

$$\Delta u_i \Delta u_k \leq \rho^2 \quad i, k = 1, \dots, r \quad (\text{I, 38})$$

Комбинируя выражения (I, 37) и (I, 38), получим следующую оценку для изменения критерия оптимальности:

$$|\Delta R| \leq \frac{1}{2} \rho^2 \sum_{i=1}^r \sum_{k=1}^r \left| \frac{\partial^2 R}{\partial u_i \partial u_k} \right| \quad (\text{I, 39})$$

где производные суммируют по модулю для того, чтобы учесть возможное различие их знаков.

Для оценки размеров окрестности ρ_m , в которой допустимо изменение значений управляющих воздействий при изменении критерия оптимальности не более чем на $|\Delta R|$, из выражения (I, 39) получим формулу

$$\rho_m = \sqrt{\frac{2|\Delta R|}{\sum_{i=1}^r \sum_{k=1}^r \left| \frac{\partial^2 R}{\partial u_i \partial u_k} \right|}} \quad (\text{I, 40})$$

которая для одного управляющего воздействия имеет простой вид:

$$\rho_m = \sqrt{\frac{2|\Delta R|}{\left| \frac{\partial^2 R}{\partial u^2} \right|}} \quad (\text{I, 41})$$

Воспользуемся выражением (I, 41) для оценки чувствительности оптимума в случае, когда критерий оптимальности задан в форме:

$$R(u) = 2u - u^2 \quad (a)$$

Оптимальное значение управляющего воздействия определим из уравнения

$$\frac{\partial R}{\partial u} = 2 - 2u = 0 \quad (б)$$

откуда

$$u_{\text{опт}} = 1 \quad (в)$$

Подставляя найденное значение оптимального управления в выражение (а), получим:

$$R(u_{\text{опт}}) = 1 \quad (г)$$

Для оценки чувствительности оптимума необходимо вычислить значение второй производной

$$\frac{\partial^2 R}{\partial u^2} = -2 \quad (д)$$

подстановка которого в формулу (I, 41) дает:

$$\rho_m = \sqrt{|\Delta R|} \quad (е)$$

Из соотношения (е) теперь следует, что при допустимом изменении критерия оптимальности (а) на 0,01 управляющее воздействие может изменяться на 0,1. Другими словами, при изменении критерия оптимальности на 1% допустимое изменение управляющего воздействия в данном случае составляет 10%.

Формула (I, 40) получена в предположении, что верно разложение (I, 35), но проверить справедливость данного разложения или же получить его обычно достаточно трудно. Поэтому приведенная схема исследования чувствительности оптимума служит скорее для иллюстрации методики исследования, чем для практического применения. В качестве примера невозможности использования формулы (I, 41) для оценки чувствительности можно привести случай, когда критерий оптимальности задан в виде:

$$R(u) = 1 - (u - 1)^4 \quad (I, 42)$$

Легко показать, что оптимальное значение критерия (I, 42) и соответствующее ему управление будут такими же, как и в рассмотренном выше примере, т. е.

$$u_{\text{опт}} = 1; \quad R(u_{\text{опт}}) = 1 \quad (I, 43)$$

Однако вторая производная при этом оказывается равной нулю, что по формуле (I, 41) определяет бесконечно большие размеры допустимой окрестности изменения управляющего воздействия, т. е. следует ложный вывод о том, что при любом отклонении от оптимального значения управляющего воздействия критерий оптимальности не изменяется. Поэтому формулы (I, 40) и (I, 41) могут быть применены для грубой оценки чувствительности оптимума лишь в том смысле, что с их помощью можно установить, когда этот параметр велик, т. е. велики значения вторых производных и, следовательно, мала величина ρ_m .

Для оценки чувствительности оптимума гораздо чаще используется прямое сравнение предполагаемого варианта реализации процесса с оптимальным. Именно такой прием применен в последующих главах для оценки оптимального распределения реакционных объемов в каскаде реакторов (см. главу IV, стр. 182) и ступенчатого приближения к оптимальному температурному профилю в реакторе вытеснения (см. главу V, стр. 253). Указанный подход к проверке чувствительности дает хорошие результаты, так как позволяет сразу проверить возможность приближения к оптимальному режиму. Это особенно относится к задачам статической оптимизации процессов с распределенными параметрами, поскольку для подобных задач значительно труднее получить оценки (даже в грубом приближении!), аналогичные формулам (I, 40) и (I, 41).

Ряд методов оптимизации, как, например, динамическое программирование, дает достаточную информацию о чувствительности оптимума уже в процессе их использования для решения оптимальных задач. Другие методы менее приспособлены к анализу чувствительности оптимума. Лишь для задач линейного программирования имеется до некоторой степени разработанный математический аппарат (параметрическое линейное программирование), позволяющий изучать поведение оптимального решения при изменениях коэффициентов математического описания [9].

ЛИТЕРАТУРА

1. *Калмыков Н. Н., Вайсбейн С. А.* Экономика социалистической химической промышленности. М., «Химия», 1967. 356 с.
2. *Малая советская энциклопедия.* Т. 7. М., «Советская энциклопедия», 1959. 1260 с.
3. *Грубов В. И., Ивахненко А. Г., Мандровский-Соколов Б. Ю.* Промышленная кибернетика. Киев, «Наукова думка», 1966. 447 с.
4. *Кафаров В. В.* Методы кибернетики в химии и химической технологии. М., «Химия», 1968. 379 с.
5. *Китов А. И., Криницкий Н. А.* Электронные цифровые машины и программирование. М., Физматгиз, 1961. 572 с.
6. *Ледли Р. С.* Программирование и использование цифровых вычислительных машин. Пер. с англ. М., «Мир», 1966. 644 с.
7. *Клейн М. Л., Морган Г. С., Аронсон М. Г.* Цифровая техника для вычислений и управления. Пер. с англ. М., Издательский центр, 1960. 384 с.
8. *Алгоритмический язык АЛГОЛ-60.* Пер. с англ. М., «Мир», 1965. 79 с.
9. *Гасс С. И.* Линейное программирование. Пер. с англ. М., Физматгиз, 1961, 303 с.

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ КАК ОСНОВА ОПТИМИЗАЦИИ ПРОЦЕССОВ ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

Математические методы оптимизации можно эффективно применять лишь при наличии математического описания оптимизируемого объекта. Если же математическое описание, достаточно точное в качественном и количественном отношении, отсутствует, то единственная возможность оптимизации заключается в исследовании реального объекта, для чего его оборудуют необходимыми измерительными средствами и проводят достаточно большое число экспериментов. Однако такой подход к отысканию оптимальных условий осуществления процесса обладает рядом принципиальных недостатков, к числу которых относится прежде всего сложность изменения аппаратного оформления. Кроме того, не всегда удается оборудовать объект нужными измерительными средствами без значительного изменения нормального режима его работы. Наконец, достигаемые при оптимизации действующего объекта результаты носят обычно частный характер и почти не поддаются обобщению, что затрудняет накопление опыта, получаемого при оптимизации даже аналогичных производств.

Вместе с тем следует всегда помнить, что никакая математическая модель не может дать исчерпывающего описания реального объекта (см. также стр. 27). Поэтому на первом этапе создания модели возможно только более или менее точное отображение важнейших сторон изучаемого явления. Разумеется, что по мере исследования процесса и накопления сведений о его свойствах точность математической модели можно повысить. Однако это повышение, как правило, достигается усложнением модели, что, в свою очередь, влечет за собой возрастание вычислительных трудностей при ее использовании. Это последнее обстоятельство, на которое иногда обращают недостаточное внимание при разработке математической модели конкретного процесса, может весьма существенно сказаться на ее применении для решения практических задач.

При работе с математической моделью процесса исследователь зачастую вынужден ограничиться качественным соответствием ее объекту моделирования, довольствуясь лишь приближенным количественным совпадением результатов моделирования с действительностью. В особой мере это относится к решению задач

проектирования, когда заранее трудно предсказать некоторые количественные зависимости, важные для процесса. Однако если модель хотя бы качественно правильно описывает объект, т. е. включает все основные переменные, верно определяет характер взаимного влияния различных параметров и отражает экстремальные свойства объекта, то даже использование такой приближенной в количественном отношении модели позволяет получить результаты, относящиеся к общим свойствам процессов рассматриваемого класса (например, к реакциям определенного типа). Знание таких общих свойств оказывается весьма полезным как на стадии проектирования промышленного процесса, так и на стадиях его пуска, отладки и управления им в режиме нормальной эксплуатации.

В примерах оптимальных задач, приведенных в последующих главах, в основном анализируются наиболее важные общие свойства получаемых решений. При этом, как правило, внимание уделяется качественному анализу результатов, для чего самой удобной является аналитическая форма решения. Поскольку получение конечных решений в такой форме возможно только для достаточно простых математических моделей, в дальнейшем им и уделено основное внимание. Это, конечно, не означает, что рассматриваемые методы оптимизации неприменимы к более сложным математическим моделям. При изложении каждого метода оптимизации указан и общий подход к решению целого класса задач произвольной сложности, которые принципиально могут быть решены данным методом.

1. ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ

Методы моделирования основаны на понятии подобия различных объектов. При этом подобными называют объекты, параметры которых, определяющие их состояние в любой момент времени в любой точке пространства, отличаются в определенное число раз, т. е. масштабом подобия. Подобие объектов может быть полным или неполным, если у объектов подобны все или только наиболее существенные параметры. Один из двух объектов, между которыми существует подобие, можно назвать объектом моделирования, а другой — его моделью.

Изучение свойств объекта моделирования путем анализа аналогичных свойств его модели представляет собой процесс моделирования. Как правило, метод моделирования применяют там, где нельзя провести весь комплекс исследований на самом объекте, чему препятствуют сложность выполнения измерений или значительные затраты на постановку необходимых экспериментов.

Подобие разных объектов может быть физическим и математическим. Все процессы, протекающие в физически подобных объектах, имеют одинаковую физическую природу. У математически подобных объектов процессы обладают различной физической природой, но описываются одинаковыми уравнениями.

Соответственно этому различают методы физического и математического моделирования.

Физическое моделирование обычно предназначено для исследований в меньших масштабах, что позволяет снизить расходы на выполнение экспериментов и организацию измерений. При этом круг измерений и их сложность не изменяются, как если бы все исследование проводилось на самом объекте моделирования.

Метод физического моделирования имеет ряд принципиальных недостатков, один из которых был отмечен выше и заключается в том, что измерения остаются теми же, что и на объекте моделирования. Наряду с тем, что эти эксперименты могут сами по себе серьезно затрудниться из-за отсутствия необходимых методик измерения, даже при их наличии замеры на модели искажаются неизбежными погрешностями, вносимыми методиками и средствами измерений. Эксперименты выполняют как бы на фоне помех, зачастую могущих значительно исказить окончательные выводы.

Другой недостаток вызван тем, что при использовании метода физического моделирования обычно изменяются размеры моделируемого объекта при построении его модели. Принципиально это может привести к появлению у модели таких свойств, которые не присущи объекту моделирования, и наоборот, некоторые свойства объекта при переходе к его физической модели могут оказаться настолько ослабленными, что их проявление в модели уже нельзя зарегистрировать.

Типичным примером изменения свойств объекта при изменении его геометрических размеров является изменение удельного влияния пристеночных эффектов. Степень влияния этих эффектов на процессы, происходящие в объеме аппарата, пропорциональна отношению поверхности аппарата к его объему, т. е. обратно пропорциональна его размерам. С уменьшением размеров аппарата возможно существенное возрастание влияния пристеночных эффектов и, как следствие, изменение общих свойств аппарата, вследствие чего может быть сделан ложный вывод о поведении объекта моделирования.

Математическое моделирование. Этот метод основан на том, что реальный процесс, протекающий в объекте моделирования и характеризующий его свойства, представляет собой сочетание различных «элементарных» процессов, подчиненных закономерностям, которые описываются определенными математическими соотношениями. В химической технологии в качестве таких «элементарных» процессов могут рассматриваться процессы массо- и теплопередачи, физические и химические превращения, движение потоков веществ и т. д.

Построение математической модели начинают с формализованного описания объекта моделирования, в которое включают «элементарные» процессы, наиболее существенные для задачи моделирования. Изучение таких процессов, их описание на языке математики, т. е. в форме тех или иных уравнений, позволяет при

последующем объединении этих уравнений в систему относительно общих параметров «элементарных» процессов получить математическое описание исследуемого объекта.

Это описание само по себе еще не дает возможности судить о поведении объекта моделирования, за исключением разве что ряда качественных выводов, которые могут быть сделаны исходя из общего вида уравнений, да и то лишь в относительно простых случаях. Поэтому для изучения свойств объекта моделирования по его математическому описанию нужно решить систему уравнений, составляющую это описание, чтобы получить результаты, аналогичные измерениям на физической модели. Другими словами, необходим алгоритм решения системы уравнений математического описания, который и позволяет осуществить собственно процесс математического моделирования.

Математические модели, как правило, являются *моделями неполной аналогии*, т. е. описывают только наиболее важные свойства объекта моделирования. Однако математические описания реальных объектов представляют собой достаточно сложные системы уравнений. Поэтому практически математическое моделирование сколько-нибудь сложных объектов возможно только при использовании вычислительных машин, способных относительно быстро выполнять большой объем вычислений.

Таким образом, математическая модель реализуется в виде машины, моделирующей исследуемый объект с применением заданного алгоритма. При этом вычислительная машина выполняет последовательность операций, предписанную моделирующим алгоритмом (см. ниже), и вырабатывает информацию о состоянии «элементарных» процессов и объекта в целом, которая и используется как результат моделирования.

Анализ объектов химической технологии методами математического моделирования с применением средств вычислительной техники, особенно цифровых машин, имеет большое теоретическое и практическое значение. Он позволяет, не прибегая к сложным и дорогим натуральным экспериментам, изучать многие характеристики проектируемых и существующих процессов, оценивать различные варианты аппаратного оформления, а также использовать математические методы оптимизации для отыскания оптимальных режимов эксплуатации и решения задач оптимального управления. Особое значение метод математического моделирования приобретает в системах автоматизированного проектирования, в которых математические модели проектируемых процессов решающим образом определяют эффективность функционирования системы в целом.

2. ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА МОДЕЛЕЙ

Математическая модель, как отмечалось выше, является системой уравнений математического описания, отражающей сущность протекающих в объекте явлений, для которой задан алго-

ритм моделирования. Согласно этому определению, математическая модель должна рассматриваться в совокупности трех ее аспектов — смыслового, аналитического и вычислительного.

♦ Смысловая сторона модели — *формализованное описание* представляет собой описание физической природы моделируемого объекта.

† Аналитическая сторона — *математическое описание* является выражением формализованного описания на языке математики в виде некоторой системы уравнений и функциональных соотношений между различными параметрами модели.

Наконец, вычислительная сторона — *моделирующий алгоритм* определяется как последовательность операций, которые необходимо выполнить над уравнениями математического описания для того, чтобы найти значения параметров математической модели, т. е. обеспечить возможность самого процесса моделирования.

Формализованное описание

Построение любой математической модели начинают с формализованного описания объекта моделирования. При этом выделяют «элементарные» процессы, протекающие в объекте моделирования, которые подлежат отражению в модели, и формулируют основные допущения, принимаемые при их описании. В свою очередь, перечень учитываемых «элементарных» процессов определяет совокупность параметров, описывающих состояние объекта, которые включают в математическую модель.

При математическом моделировании объектов химической технологии обычно принимаются во внимание следующие «элементарные» процессы: 1) движение потоков фаз; 2) химические превращения; 3) массообмен между фазами; 4) теплопередача; 5) изменение агрегатного состояния веществ (испарение, конденсация, растворение и т. д.).

Полнота математического описания «элементарных» процессов в модели зависит от того, насколько тесно они взаимосвязаны в моделируемом объекте и насколько глубоко проанализирована эта взаимосвязь, которая может быть и весьма сложной. Поэтому практически зачастую делают различные допущения относительно характера указанной связи, что позволяет избежать необходимости введения в модель недостаточно изученных зависимостей и, следовательно, излишнего усложнения математического описания. Так, например, часто предполагается, что процессы массообмена не сопровождаются одновременно изменением агрегатного состояния контактирующих фаз, принимаются идеализированные модели движения фаз и т. д.

В ряде случаев, наоборот, математическое моделирование используется для проверки некоторых гипотез о механизме процессов, протекающих в объекте моделирования. Для этого в состав модели вводят исследуемые соотношения, чтобы по результатам

последующего моделирования судить о справедливости того или иного предположения.

В предыдущей главе приводилась классификация параметров, удобная для характеристики процесса как объекта оптимизации. При этом были выделены входные, выходные, управляющие и возмущающие параметры. С позиций математического моделирования более приемлема иная классификация, отражающая физический смысл каждого параметра. В данном случае целесообразно различать следующие классы параметров: конструктивные, физические, параметры описания «элементарных» процессов. В свою очередь, среди этих классов могут быть выделены определенные группы параметров в соответствии с их отношением к объекту моделирования или его модели. Рассмотрим данную классификацию подробнее.

Конструктивные параметры. К этому классу относятся структурные и геометрические параметры, отражающие конструктивное оформление моделируемого объекта.

Структурные параметры. Под структурными параметрами понимают описательные характеристики моделируемого объекта, не имеющие численного выражения. Такими характеристиками являются описания движения потоков, например, при параллельном или последовательном соединении трубчатых элементов реактора вытеснения, идеальное смешение или идеальное вытеснение реагентов в аппарате, противоток фаз и т. д. Структурные параметры значительно влияют на вид математического описания. Так, для заданного объема реактора вид математического описания, а также результаты моделирования существенно различаются в зависимости от того, можно принять для данного аппарата идеальное смешение компонентов в объеме реактора или необходимо исходить из предположения об идеальном вытеснении.

Геометрические параметры. Под геометрическими параметрами понимают численные характеристики аппаратного оформления моделируемого объекта, например объем химического реактора, свободное сечение аппарата с насадкой, удельная поверхность катализатора, число секций реактора, число тарелок в ректификационной колонне и др.

Физические параметры. К этому классу относятся параметры, описывающие физические характеристики потоков веществ моделируемого объекта. Среди указанных параметров можно выделить следующие группы:

Параметры состояния потоков представляют собой значения потоков веществ и характеристики параметров этих потоков, от которых зависит движущая сила «элементарных» процессов, например состав и температура.

Параметры свойств потоков. Под параметрами свойств потоков понимают количественные характеристики параметров потоков, не входящие непосредственно в выражения для движущих сил «элементарных» процессов (теплоемкость, вязкость, плотность, теп-

лота испарения и т. д.). Параметры этой группы могут зависеть от параметров состояния потока, например от состава и температуры, что, в свою очередь, требует при математическом описании учета соответствующих соотношений.

Параметры «элементарных» процессов. К данному классу относятся гидродинамические и физико-химические параметры, используемые для описания механизма «элементарных» процессов, например движения потоков фаз, тепло- и массопередачи, химических реакций.

Гидродинамические параметры представляют собой характеристики движения потоков веществ в модели, обусловленные видом описания движения потока. Этой группе параметров присущи некоторые черты, свойственные группе структурных параметров. Однако гидродинамические параметры в отличие от структурных, определяемых конструктивным оформлением объекта моделирования и не имеющих численного выражения, характеризуются принимаемым описанием движения потоков и могут зависеть от физических параметров модели. Примерами гидродинамических параметров являются коэффициент продольного смещения вещества в потоке, число ячеек смещения в ячеечной модели и т. д.

Физико-химические параметры. Под физико-химическими параметрами понимают характеристики процессов тепло- и массопередачи и химических реакций, например коэффициенты тепло- и массопередачи, константы скорости химических реакций, тепловые эффекты реакций и т. д.

Точность получаемых результатов моделирования зависит от того, насколько полно отражены различные параметры реального объекта в его математической модели. Однако сама по себе полнота представления указанных параметров в модели еще не позволяет судить о качестве моделирования, которое, в свою очередь, обусловлено точностью установления взаимосвязи параметров, входящих в описание «элементарных» процессов. Задачу отражения этой взаимосвязи и необходимо решить при разработке математического описания.

Математическое описание

Этапы составления математического описания. Наиболее общим приемом разработки математического описания является блочный принцип [1]. Согласно этому принципу, составлению математического описания предшествует анализ отдельных «элементарных» процессов, протекающих в объекте моделирования. При этом эксперименты по изучению каждого такого процесса проводят в условиях, максимально приближающихся к условиям эксплуатации объекта моделирования.

Вначале исследуют *гидродинамическую модель* процесса как основу структуры математического описания. Далее изучают кинетику химических реакций, процессов массо- и теплопередачи с учетом гидродинамических условий найденной модели и состав-

ляют математическое описание каждого из этих процессов. Заключительным этапом в данном случае является объединение описаний всех исследованных «элементарных» процессов (блоков) в единую систему уравнений математического описания объекта моделирования. Достоинством блочного принципа построения математического описания является то, что его можно использовать на стадии проектирования объекта, когда окончательный вариант аппаратного оформления еще неизвестен.

Состав математического описания. Формально математическое описание представляет собой совокупность зависимостей, связывающих все перечисленные выше классы параметров в единую систему уравнений. Среди этих соотношений могут быть выражения, отражающие общие физические законы (например, законы сохранения массы и энергии), уравнения, описывающие «элементарные» процессы (например, взаимодействие фаз, химические превращения), и т. д. Кроме того, в состав математического описания входят также различные эмпирические и полуэмпирические зависимости между разными параметрами процесса, теоретическая форма которых неизвестна или слишком сложна.

В частности, при отсутствии или весьма ограниченном объеме теоретических сведений о моделируемом объекте, когда неизвестен даже ориентировочный вид соотношений, описывающих его свойства, уравнения математического описания могут представлять собой систему эмпирических зависимостей, полученных в результате статистического обследования действующего объекта. Эти модели обычно называются *статистическими* и имеют вид корреляционных или регрессионных соотношений между входными и выходными параметрами объекта. Вывод указанных соотношений возможен лишь при наличии действующего объекта, который допускает выполнение определенного объема экспериментальных исследований. Помимо этого, недостатком моделей такого типа является относительная узость области изменения их параметров, расширение которой связано с серьезным усложнением зависимостей. Разумеется, подобные модели в структуре уравнений не отражают физических свойств объекта моделирования, что затрудняет обобщение результатов, получаемых при их применении.

В отличие от статистических математические модели, которые построены с учетом основных закономерностей процессов, протекающих в моделируемом объекте, качественно более правильно характеризуют его даже при наличии недостаточно точных в количественном отношении параметров модели. Поэтому с их помощью можно изучать общие свойства объектов моделирования, относящихся к определенному классу.

В составе математического описания, разработанного на основе физической природы моделируемого объекта, можно выделить следующие группы уравнений:

1. *Уравнения баланса масс и энергии*, записанные с учетом гидродинамической структуры движения потоков. Данная группа

уравнений характеризует распределение в потоках температуры, составов и связанных с ними свойств, например плотности, вязкости, теплоемкости и т. д.

2. Уравнения «элементарных» процессов для локальных элементов потоков. К этой группе относятся описания процессов массо- и теплообмена, химических реакций и др.

3. Теоретические, полуэмпирические или эмпирические соотношения между различными параметрами процесса, например зависимость коэффициента массопередачи от скоростей потоков фаз, зависимость теплоемкости раствора от состава и т. д.

4. Ограничения на параметры процесса. При моделировании некоторых процессов необходимо принимать во внимание объективно существующие ограничения на диапазон изменения ряда

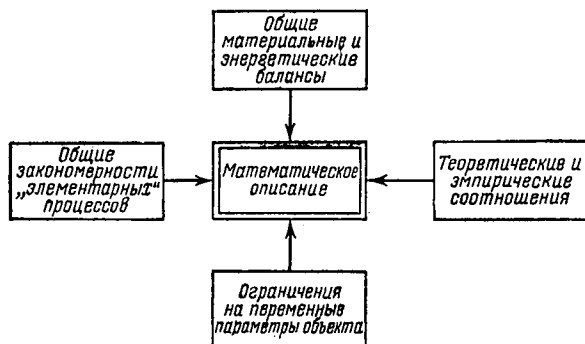


Рис. II-1. Состав математического описания.

параметров. Так, например, при моделировании процесса ректификации многокомпонентных смесей для любой ступени разделения должно выполняться условие, что сумма концентраций всех компонентов равна 1. Это условие обычно используют для определения температуры смеси. Кроме того, при расчете полезно иметь в виду, что концентрация любого компонента может быть только положительной величиной, заключенной между 0 и 1.

Общим для всех математических моделей является то, что число уравнений и различных соотношений, включаемых в математическое описание, должно быть равно числу внутренних, т. е. зависящих от режима моделируемого объекта, параметров, находящихся в результате моделирования.

Выше были рассмотрены лишь самые общие свойства системы уравнений математического описания, состав которого с учетом этого можно представить блок-схемой, изображенной на рис. II-1.

Типы уравнений. Значительное влияние на выбор метода решения системы уравнений математического описания и решение задач оптимизации оказывает конкретный вид уравнений математического описания. Для характеристики свойств разных объектов моделирования обычно применяют: конечные алгебраические

или трансцендентные уравнения, обыкновенные дифференциальные, дифференциальные уравнения в частных производных и интегральные уравнения. Последний тип — интегральные уравнения — сравнительно редко встречается в задачах математического моделирования объектов химической технологии, в связи с чем указанные уравнения ниже не приводятся.

В зависимости от того, входит время в качестве независимой переменной в уравнения математического описания или нет, все модели принято разделять на стационарные и нестационарные. Для *стационарных моделей* математическое описание определяет значения внутренних параметров модели, соответствующих стационарному состоянию объекта при заданной совокупности внешних параметров. Для *нестационарных моделей* математическое описание характеризует временное изменение внутренних параметров при изменении внешних. Тип математической модели существенно влияет на вид уравнений, используемых для построения математического описания.

К конечным уравнениям обычно сводится математическое описание стационарных режимов работы объектов, рассматриваемых как объекты с сосредоточенными параметрами, примером которых является реактор идеального смешения. Кроме того, уравнения этого типа применяют также при математическом описании более сложных объектов для выражения стационарных связей между разными параметрами.

Обыкновенные дифференциальные уравнения обычно используют для математического описания нестационарных режимов (динамики) объектов с сосредоточенными параметрами, а также стационарных режимов объектов с распределенными параметрами, в которых значения параметров зависят только от одной пространственной координаты. В первом случае в качестве независимой переменной в дифференциальных уравнениях применяют время, во втором — пространственную координату. Здесь следует отметить общность и даже тождественность математических описаний, которая иногда свойственна математическим моделям неодинаковых по аппаратному оформлению объектов. Речь идет о нестационарных моделях периодически действующих реакторов идеального смешения и стационарных моделях реакторов идеального вытеснения. Тождественность математического описания при этом позволяет сделать заключение о тождественности оптимальных решений, хотя практическая реализация оптимальных условий в обоих случаях может быть существенно различной.

Важной особенностью математического описания, куда входят обыкновенные дифференциальные уравнения, является то, что для них необходимо задание начальных условий.

Дифференциальные уравнения в частных производных используют для математического описания динамики объектов с распределенными параметрами или стационарных ре-

жимов таких объектов, в которых распределенность имеется более чем по одной пространственной координате. Для указанных уравнений при описании динамики объекта наряду с начальными условиями нужно также задавать граничные условия, в общем случае являющиеся функциями времени. Для стационарных режимов объектов, описываемых уравнениями в частных производных, задают только граничные условия, которые могут зависеть от координат.

Исследование объектов, описываемых дифференциальными уравнениями, методом математического моделирования представляет иногда весьма трудную вычислительную задачу. Поэтому в ряде случаев вместо математического описания объекта дифференциальными уравнениями его характеризуют системой конечных уравнений, для чего непрерывный объект с распределенными параметрами рассматривают как дискретный с сосредоточенными параметрами, но имеющий ячеечную структуру. Формально математически замена непрерывного объекта дискретным эквивалентна замене дифференциальных уравнений разностными соотношениями. При этом для объектов, описываемых обыкновенными дифференциальными уравнениями, математическое описание представляют в виде системы конечно-разностных уравнений. Для процессов, описываемых дифференциальными уравнениями в частных производных, результатом является система дифференциально-разностных уравнений, каждое из которых в свою очередь может быть представлено системой конечно-разностных уравнений. При подобных преобразованиях системы уравнений математического описания, естественно, допускается погрешность, которую необходимо учитывать при оценке результатов моделирования.

Вместе с тем существует ряд объектов, которые по своей природе обладают ячеечной структурой. Типичными примерами служат секционированные реакторы, тарельчатые колонны и т. д. Поэтому *ячеечные модели* являются не только удобной формой аппроксимации для объектов, описываемых дифференциальными уравнениями, но и имеют вполне определенное самостоятельное значение.

Общее математическое описание нестационарных объектов представляют в виде совокупности дифференциальных уравнений (обыкновенных или в частных производных), отражающих изменение внутренних параметров процесса во времени. Каждый внутренний параметр можно охарактеризовать временем релаксации τ_i , в течение которого параметр изменяется на определенную долю от полного диапазона его изменения при постоянных значениях остальных параметров объекта. Пусть при этом все внутренние параметры объекта можно разделить на две группы, для одной из которых $\tau_i \geq \tau^I$, для другой $\tau_i \geq \tau^{II}$, и, кроме того, справедливо соотношение $\tau^I \ll \tau^{II}$, означающее, что время релаксации параметров первой группы значительно меньше вре-

мени релаксации параметров второй группы. Тогда с некоторой степенью точности можно принять, что параметры первой группы, имеющие значительно меньшее время релаксации, безынерционны и положить в уравнениях математического описания равными нулю производные от указанных параметров по времени. При помощи такого приема иногда удается весьма существенно упростить нестационарную математическую модель вследствие замены части дифференциальных уравнений конечными.

Математические модели, в которых нестационарные дифференциальные уравнения, описывающие изменения во времени параметров с малым временем релаксации, заменены стационарными соотношениями, могут быть названы квазинестационарными. Нестационарные модели, используемые на практике, фактически

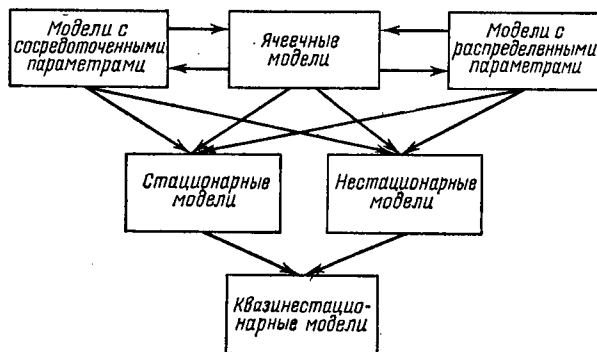


Рис. II-2. Классификация математических моделей по пространственным и временным признакам.

обычно являются *квазинестационарными*, хотя при этом, строго говоря, необходимо дополнительное обоснование квазистационарности ряда внутренних параметров.

С учетом сказанного выше, математические модели можно классифицировать следующим образом (рис. II-2):

по пространственным признакам — модели с сосредоточенными параметрами, ячейные (дискретные) и с распределенными параметрами;

по временным признакам — стационарные, нестационарные и квазинестационарные модели.

Моделирующий алгоритм

Разработка алгоритма. Математическое описание служит исходным материалом для создания алгоритма, моделирующего исследуемый объект. В зависимости от постановки задачи может использоваться тот или иной алгоритм, дающий возможность получить искомые результаты моделирования. Задачей моделирующего алгоритма чаще всего является решение системы уравнений математического описания, что позволяет находить внутренние па-

параметры математической модели при заданной совокупности внешних.

В процессе математического моделирования иногда встречаются задачи, в которых фиксируют определенные значения ряда внутренних параметров модели; при этом нужно рассчитать значения некоторых внешних параметров. Такие задачи возникают, например, при решении вопросов управления, когда для заданного режима объекта вычисляют значения управляющих воздействий. Решая указанные задачи, необходимо обращать особое внимание на правомерность задания внутренних параметров, поскольку их взаимная связь через уравнения математического описания требует определенного соответствия задаваемых значений. Причина этого состоит в том, что если для любой совокупности внешних параметров (разумеется, имеющей физический смысл) всегда можно найти режим объекта, то при решении обратной задачи надо учитывать физическую реализуемость задаваемого режима.

В простейших случаях, когда возможно аналитическое решение системы уравнений математического описания, необходимость специальной разработки моделирующего алгоритма, естественно, отпадает, так как вся информация получается из соответствующих аналитических решений. Когда математическое описание представляет собой сложную систему конечных и дифференциальных уравнений, от возможности построения достаточно эффективного моделирующего алгоритма может существенно зависеть практическая применимость математической модели. В особенности это важно при использовании модели для решения задач, в которые она входит составной частью более общего алгоритма, например алгоритма оптимизации. Как правило, в таких случаях для реализации математической модели приходится применять средства вычислительной техники — аналоговые и цифровые вычислительные машины, без которых фактически нельзя ставить и решать сколько-нибудь сложные задачи математического моделирования и, тем более, задачи оптимизации, где расчеты по уравнениям математического описания обычно повторяются многократно.

Математическая модель объекта, описываемого не очень сложными дифференциальными уравнениями, часто может быть реализована на аналоговой вычислительной машине. Однако *самым универсальным средством решения задач математического моделирования являются цифровые вычислительные машины*. При этом для решения системы уравнений математического описания необходимо иметь численный алгоритм.

Существующие в настоящее время методы численного анализа [2—4] позволяют решать широкий круг задач математического моделирования. Тем не менее, в некоторых случаях встречаются серьезные затруднения в применении общих методов численного анализа. К числу таких случаев прежде всего относятся следующие задачи математического моделирования: 1) решение систем конечных нелинейных уравнений с большим числом переменных;

2) интегрирование систем обыкновенных дифференциальных уравнений с краевыми условиями; 3) интегрирование систем дифференциальных уравнений в частных производных.

Для указанных проблем в численном анализе пока отсутствуют эффективные общие методы решения, поэтому в каждом конкретном случае при построении моделирующего алгоритма следует использовать особенности решаемой задачи. Существенную помощь может оказать знание физической природы получаемых решений, что иногда позволяет найти хорошие начальные приближения для итеративных процессов или даже разработать эффективные вычислительные алгоритмы. Примером является известный метод потарелочного расчета ректификационных колонн, при применении которого система нелинейных уравнений с большим числом неизвестных решается итеративным методом [5].

В ряде случаев моделирующий алгоритм бывает настолько сложным для реализации с помощью имеющихся в наличии вычислительных средств, что требуется изменить формулировку исходной задачи моделирования для упрощения математического описания. Это упрощение часто достигается лишь ценой снижения точности математической модели путем замены некоторых аналитических выражений более простыми и, возможно, менее точными или за счет сокращения полноты математического описания при исключении из модели части параметров моделируемого объекта.

Таким образом, все три аспекта математической модели — смысловой, аналитический и вычислительный — должны рассматриваться в тесной взаимосвязи. Возможность решения задачи моделирования и последующего использования математической модели для решения задач оптимизации часто обусловлена тем, насколько удачно соответствуют эти стороны одна другой. Пренебрежение или не слишком строгое отношение к любому из указанных аспектов математической модели может проявиться на определенном этапе в виде непредвиденных затруднений, сводящих на нет всю предыдущую работу по подготовке моделирования. Так, если вначале включить в математическую модель слишком большое число параметров объекта моделирования, то при составлении математического описания может потребоваться столь же большое число взаимосвязей между ними, не все из которых известны даже в достаточно грубом приближении. Наконец, если даже математическое описание и будет получено, то вследствие его сложности могут возникнуть вычислительные трудности, поскольку возможности современных вычислительных машин хотя и велики, но не безграничны.

Внутренние параметры модели. После того как вычислительный алгоритм составлен, начинается основной этап решения задачи математического моделирования — собственно процесс моделирования, т. е. экспериментирование на модели. В простейшем случае работа с математической моделью заключается в нахождении значений внутренних параметров модели при данной совокупности

внешних и исследование зависимости, существующей между ними.

При наличии стационарной модели расчет внутренних параметров для заданной совокупности значений внешних определяет ее стационарный режим. При изменении внешних параметров внутренние параметры модели также изменяются, что позволяет находить *статические характеристики* модели и, следовательно, объекта моделирования. На рис. II-3 приведен пример статической характеристики для реактора идеального смешения — зависимость выходной концентрации исходного продукта реакции от нагрузки на реактор.

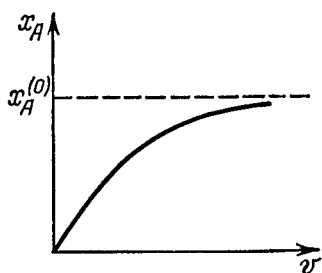


Рис. II-3. Статическая характеристика реактора идеального смешения.

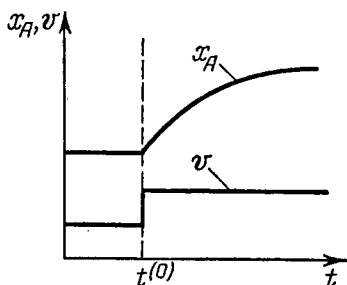


Рис. II-4. Кривая разгона при ступенчатом изменении нагрузки на реактор идеального смешения.

Для нестационарных моделей расчет внутренних параметров, т. е. определение режима в каждый момент времени, или *динамических характеристик*, может производиться как при постоянных значениях внешних параметров (кривые разгона), так и при внешних параметрах, изменяющихся со временем (переходные процессы). Разумеется, нестационарную модель можно использовать для расчета статических характеристик объекта, если внешние параметры будут пробегать ряд значений, причем для всех новых значений внешних параметров определяют установившиеся значения внутренних, т. е. рассчитывают стационарный режим. На рис. II-4 и II-5 приведены примеры динамических характеристик реактора идеального смешения, при этом на рис. II-4 показана кривая разгона при ступенчатом изменении нагрузки на реактор, а на рис. II-5 — переходный процесс при пилообразном изменении величины нагрузки.

Статические и динамические характеристики обычно характеризуют изменение лишь одной внутренней переменной модели. Для того чтобы получить полное представление о поведении объекта, необходимо построить ряд таких характеристик для всех основных внутренних параметров.

Фазовые характеристики. Наиболее общей формой представления состояния объекта является изображение его положения

в фазовом пространстве переменных параметров. Это означает, что состояние объекта, характеризуемое совокупностью значений переменных величин x_i ($i = 1, \dots, n$), изображается в виде точки в n -мерном пространстве координат x_i , называемых также фазовыми координатами объекта. В число фазовых координат обычно включают внутренние переменные объекта. Кроме того, иногда целесообразно относить к фазовым координатам также и некоторые внешние параметры, например управляющие воздействия.

Если рассматривается нестационарный процесс, когда состояние объекта изменяется с течением времени, то в фазовом пространстве это эквивалентно движению точки, характеризующей

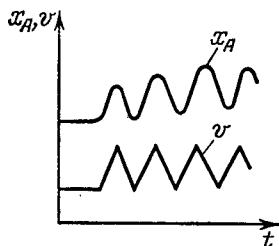


Рис. II-5. Переходной процесс в реакторе идеального смешения при изменяющейся нагрузке.

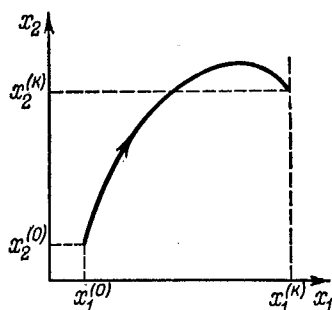


Рис. II-6. Фазовая плоскость переменных x_1 и x_2 .

состояние объекта, по некоторой траектории. Проекция данной траектории на любую координатную ось фазового пространства определяет обычные одномерные переходные процессы, аналогичные изображенным на рис. II-4 и II-5. Для стационарных моделей траектория объекта в фазовом пространстве представляет собой *обобщенную статическую характеристику объекта*.

Наглядное изображение фазового пространства произвольной размерности n отсутствует. Исключение составляют лишь случаи $n = 2$ и $n = 3$, когда фазовое пространство изображается в виде фазовой плоскости или доступно для изображения обычными приемами объемного чертежа (рис. II-6, $n = 2$ и рис. II-7, $n = 3$). Для более высокой размерности понятие фазового пространства служит лишь удобной математической абстракцией, позволяющей повысить наглядность проводимых рассуждений. При этом координатные оси на чертеже можно опустить (рис. II-8). Тогда положение любой точки на траектории задается n -мерным вектором, составляющие которого определяются значениями фазовых координат в рассматриваемый момент времени, т. е.

$$x(t) = \{x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t)\} \quad (\text{II}, 1)$$

Для характеристики управляющих воздействий также удобно использовать векторные обозначения:

$$u(t) = \{u_1(t), u_2(t), \dots, u_r(t)\} \quad (\text{II}, 2)$$

Размерность вектора управляющих воздействий r , вообще говоря, не равна n . Для этого вектора, определенного в r -мерном пространстве управляющих воздействий, условиями задачи моделирования может быть задана ограниченная область изменения, что соответствует некоторым ограничениям на диапазон изменения управляющих воздействий.

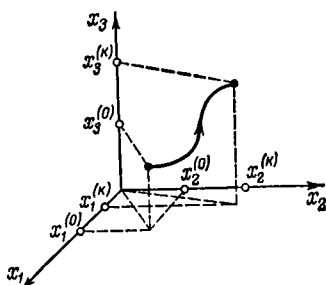


Рис. II-7. Фазовое пространство переменных x_1, x_2 и x_3 .

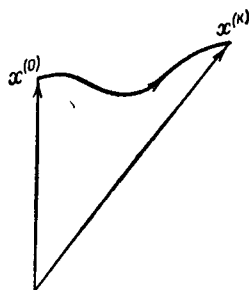


Рис. II-8. Изображение траектории для фазового пространства произвольной размерности.

При использовании понятия фазового пространства критерий оптимальности можно считать функцией переменных x_i и u_i , определенной в $(n + r)$ -мерном пространстве этих переменных, значение которой зависит от положения точки в данном пространстве, или функционалом (см. главу V) с величиной, обусловленной выбором траектории, соединяющей две точки или в более общем случае две области фазового пространства.

3. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ СТРУКТУРЫ ПОТОКОВ КАК ОСНОВА ПОСТРОЕНИЯ МОДЕЛЕЙ ПРОЦЕССОВ

Любой химико-технологический процесс, как правило, сопровождается перемещением некоторых материальных потоков жидкости, газа или твердых частиц. Потоки могут быть однофазными, т. е. целиком состоять только из одной фазы, перемещаемой в некотором объеме аппарата, и многофазными (в частности, двухфазными), когда процесс проходит в условиях взаимодействия нескольких фаз, например газ — жидкость, жидкость — твердое тело, газ — твердое тело и т. д. В связи с этим особое значение в задачах математического моделирования приобретает описание движения потоков.

Уравнения гидродинамики реальных потоков обычно очень сложны (например, уравнения Навье-Стокса для однофазных потоков) или даже вообще не могут быть записаны в общем виде (например, для двухфазных потоков типа газ — жидкость) из-за отсутствия возможности задания граничных условий на нестационарной поверхности раздела фаз. Поэтому на практике при составлении математических описаний обычно используют приближенные представления о внутренней структуре потоков. С одной стороны, это облегчает постановку граничных условий для уравнений, а с другой — позволяет наметить определенные экспериментальные исследования, необходимые для нахождения параметров уравнений движения потоков.

Для химико-технологических объектов описание движения потоков имеет смысл большей частью лишь в отношении перемещения и распределения веществ в данных потоках. Поэтому все анализируемые ниже гидродинамические модели потоков будут записываться преимущественно в виде уравнений, характеризующих изменение концентрации вещества в потоке, обусловленное его движением.

Модель идеального смешения. Условия физической реализуемости этой модели выполняются, если во всем потоке или на рассматриваемом его участке происходит полное (идеальное) смешение частиц потока. В таком случае любое изменение концентрации вещества на входе потока в зону идеального смешения мгновенно распределяется по всему объему зоны. Уравнение, описывающее изменение концентрации в зоне идеального смешения, имеет вид

$$V \frac{dx}{dt} = v(x^{(0)} - x) \quad (\text{II}, 3)$$

и включает объем зоны идеального смешения V , скорость потока, поступающего в зону идеального смешения, v , концентрации вещества на входе и в зоне идеального смешения $x^{(0)}$ и x кмоль/м³ соответственно, а также время t ч.

В химической технологии часто стремятся приблизиться к условиям идеального смешения путем установки в аппаратах специальных мешалок, схематически изображаемых как на рис. II-9.

Нетрудно записать решение уравнения (II, 3) для любого закона изменения входной концентрации $x^{(0)}$. Значение концентрации в зоне идеального смешения и, следовательно, на выходе из нее для каждого момента времени можно рассчитать по уравнению

$$x(t) = e^{-t/\tau} \left[x^{(0)} + \frac{1}{\tau} \int_0^t e^{z/\tau} x^{(0)}(z) dz \right] \quad (\text{II}, 4)$$

в котором через $x^{(0)}$ обозначено значение концентрации в зоне идеального смешения в начальный момент времени, а через $\tau = V/v$ — среднее время пребывания частиц потока в зоне идеального смешения.

На рис. II-10 показан характер изменения концентрации в зоне идеального смешения при ступенчатом изменении входной концентрации от величины $x_I^{(0)}$ до $x_{II}^{(0)}$ в момент времени $t = t^{(0)}$.

Модель идеального вытеснения. Условия физической реализуемости этой модели выполняются в случае поршневого потока (рис. II-11), когда предполагается, что в направлении его движения смещение полностью отсутствует, а в направлении, перпенди-

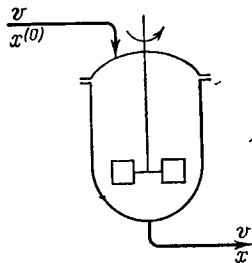


Рис. II-9. Схематическое изображение аппарата идеального смешения.

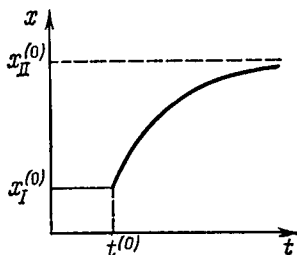


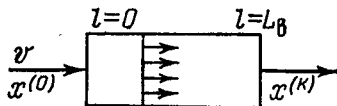
Рис. II-10. Изменение концентрации в зоне идеального смешения при ступенчатом изменении концентрации на входе.

кулярном движению, происходит идеальное смешение. Уравнение, описывающее изменение концентрации в зоне идеального вытеснения

$$S_v \frac{\partial x}{\partial t} = -v \frac{\partial x}{\partial l} \quad (\text{II}, 5)$$

содержит параметр S_v , соответствующий площади сечения м^2 зоны идеального вытеснения.

Рис. II-11. Схематическое изображение аппарата идеального вытеснения.



Модель идеального вытеснения широко используют в химической технологии при описании аппаратов, работающих по принципу вытеснения, например трубчатых реакторов и теплообменников. Ее достоинством является относительная простота решения уравнений математического описания, построенного с применением данной модели, и вместе с тем приемлемая во многих случаях точность воспроизведения реальных гидродинамических условий.

Уравнение (II, 5) определяет функцию двух переменных — времени t и длины l , т. е. $x(l, t)$.

Если длина зоны идеального вытеснения равна L_B , то решением уравнения (II, 5) при начальных условиях

$$x(l, 0) = x^{(0)}(0) \quad 0 \leq l \leq L_B \quad (\text{II, 6})$$

и граничном условии

$$x(0, t) = x^{(0)}(t) \quad t > 0 \quad (\text{II, 7})$$

будет функция:

$$x(l, t) = \begin{cases} x^{(0)}(0) & t < \frac{l}{u} \\ x^{(0)}\left(t - \frac{l}{u}\right) & t > \frac{l}{u} \end{cases} \quad (\text{II, 8})$$

причем величина $u = v/S_B$ соответствует линейной скорости потока.

Любое изменение концентрации на входе зоны идеального вытеснения появляется на ее выходе через время

$$\tau = \frac{L_B}{u} = \frac{L_B S_B}{u S_B} = \frac{V}{v} \quad (\text{II, 9})$$

На рис. II-12 показан характер изменения концентрации на выходе зоны идеального вытеснения при ступенчатом изменении концентрации на входе от значения $x_I^{(0)}$ до $x_{II}^{(0)}$ в момент времени $t^{(0)}$.

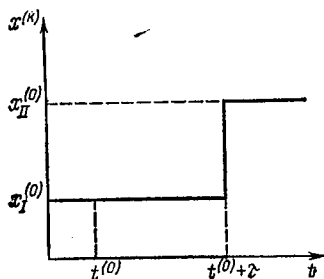


Рис. II-12. Изменение концентрации на выходе зоны идеального вытеснения при ступенчатом изменении концентрации на входе.

Однопараметрическая диффузионная модель. Условия физической реализуемости однопараметрической диффузионной модели выполняются в случае поршневого потока, когда в направлении его существует продольное смешение, описываемое уравнениями, которые аналогичны уравнениям молекулярной диффузии при условии замены в них коэффициента диффузии на коэффициент продольного смешения E_x м²/с. В направлении, перпендикулярном направлению движения, для однопараметрической диффузионной модели предполагается наличие

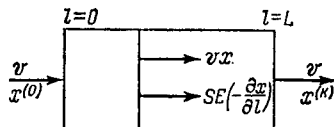
идеального смешения. Уравнение, описывающее изменение концентрации по длине зоны, для которой справедлива однопараметрическая диффузионная модель, имеет вид:

$$S_B \frac{\partial x}{\partial t} = S_B E_x \frac{\partial^2 x}{\partial l^2} - v \frac{\partial x}{\partial l} \quad (\text{II, 10})$$

Схематическое изображение модели представлено на рис. II-13. Сводка решений уравнения (II, 10) для различных граничных условий приведена в литературе [6].

Однопараметрическая диффузионная модель значительно лучше, чем модель идеального вытеснения, соответствует условиям в реальных аппаратах химической технологии, в которых перемещение веществ производится по принципу вытеснения, например, в трубчатых реакторах, противоточных аппаратах и т. д. Недостатками этой модели являются сложность постановки граничных условий и необходимость предварительной оценки коэффициента продольного смешения.

Рис. II-13. Схематическое изображение аппарата вытеснения с продольным перемешиванием.



На рис. II-14 показан характер изменения концентрации на выходе зоны потока, для которой справедлива однопараметрическая диффузионная модель, при ступенчатом изменении концентрации на входе зоны от $x_I^{(0)}$ до $x_{II}^{(0)}$ в момент времени $t^{(0)}$.

Иногда используют еще и *двухпараметрическую диффузионную модель*, где параметры принимаются как функции не только длины аппарата, но и его радиального измерения [6]. При этом даже стационарный режим потока описывается уже дифференциальным уравнением в частных производных, решение которого представляет определенные трудности.

При характеристике движения реальных потоков может оказаться, что ни одна из перечисленных гидродинамических моделей не дает возможности достаточно точно воспроизвести свойства потока. В таких случаях применяют сложные *комбинированные модели*, построенные на основе приведенных выше простейших моделей с добавлением застойных зон, а также с введением байпасирования и рециркуляции отдельных частей потоков. Математическое описание процесса при этом, естественно, усложняется, однако в результате удастся получить необходимую точность воспроизведения свойств объекта моделирования.

Рассмотренные выше уравнения отражают распределение вещества в потоках с различной гидродинамической структурой. Аналогичные уравнения могут быть выведены также, если концентрация заменяется другой характеристикой потока, например температурой T . Тогда уравнения (II, 3), (II, 5) и (II, 10) соответ-

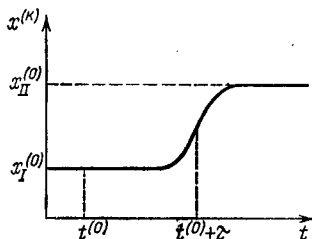


Рис. II-14. Изменение концентрации на выходе зоны вытеснения с продольным перемешиванием при ступенчатом изменении концентрации на входе.

ственно запишутся в виде:

$$Vc_p \frac{dT}{dt} = vc_p (T^{(0)} - T) \quad (\text{II, 11})$$

$$S_b c_p \frac{\partial T}{\partial t} = -vc_p \frac{\partial T}{\partial l} \quad (\text{II, 12})$$

$$S_b c_p \frac{\partial T}{\partial t} = S_b E_T \frac{\partial^2 T}{\partial l^2} - vc_p \frac{\partial T}{\partial l} \quad (\text{II, 13})$$

Источники массы и тепла в потоках. В аппаратах химической технологии вещество переносится с материальным потоком и претерпевает различные изменения в процессе такого переноса. При этом концентрация i -го вещества x_i может изменяться в каждой точке потока не только в результате его движения, но и вследствие химических реакций и процессов массообмена. Для учета указанных явлений приведенные выше уравнения должны быть дополнены соответствующими членами, имеющими смысл интенсивности источников вещества q_i . В данном случае, вообще говоря, необходимо принимать во внимание, что скорость материального потока v также будет изменяться из-за наличия источников вещества, поэтому уравнения (II, 3), (II, 5) и (II, 10) примут вид:

$$\frac{d(Vx_i)}{dt} = v^{(0)}x_i^{(0)} - vx_i + Vq_i \quad (\text{II, 14})$$

$$S_b \frac{\partial x_i}{\partial t} = -\frac{\partial(vx_i)}{\partial l} + S_b q_i \quad (\text{II, 15})$$

$$S_b \frac{\partial x_i}{\partial t} = S_b \frac{\partial}{\partial l} \left(E_x \frac{\partial x_i}{\partial l} \right) - \frac{\partial(vx_i)}{\partial l} + S_b q_i \quad (\text{II, 16})$$

Интенсивность источника вещества q_i в уравнениях (II, 14)—(II, 16) может быть как положительной, так и отрицательной величиной в зависимости от того, образуется или расходуется i -тое вещество в потоке. Запись уравнения (II, 16) предполагает, что коэффициент продольного смешения E_x может также некоторым образом изменяться по длине потока.

Уравнения (II, 14) — (II, 16) нужно дополнить выражениями для закона изменения объемной скорости материального потока в аппарате. Если общее число источников равно n , а парциальный мольный объем i -го компонента равен v_i , то для зоны идеального смешения [см. уравнение (II, 14)] изменение объемной скорости потока может быть определено как

$$v = v^{(0)} + V \sum_{i=1}^n v_i q_i \quad (\text{II, 17})$$

Для уравнений (II, 15) и (II, 16) при стационарном режиме изменение объемной скорости потока по длине зоны характеризуется

дифференциальным уравнением

$$\frac{dv}{dt} = S_B \sum_{i=1}^n v_i q_i \quad (\text{II, 18})$$

с граничным уравнением

$$v|_{t=0} = v^{(0)} \quad (\text{II, 19})$$

С учетом интенсивности источников тепла в потоке можно также аналогичным образом переписать уравнения (II, 11)—(II, 13), определяющие температуру потока:

$$\frac{d(Vc_p T)}{dt} = v^{(0)} c_{p0} T^{(0)} - v c_p T + V q_T \quad (\text{II, 20})$$

$$S_B \frac{\partial (c_p T)}{\partial t} = - \frac{\partial (v c_p T)}{\partial l} + S_B q_T \quad (\text{II, 21})$$

$$S_B \frac{\partial (c_p T)}{\partial t} = S_B \frac{\partial}{\partial l} \left(E_T \frac{\partial T}{\partial l} \right) - \frac{\partial (v c_p T)}{\partial l} + S_B q_T \quad (\text{II, 22})$$

В уравнениях (II, 14)—(II, 18) и (II, 20)—(II, 22) интенсивность источников вещества и тепла может быть в общем случае функцией многих параметров процесса, например концентраций других веществ в рассматриваемом или взаимодействующем с ним потоке, температуры и т. д. Поэтому данные уравнения необходимо интегрировать совместно с уравнениями, описывающими изменение всех без исключения параметров, от значений которых зависит интенсивность указанных источников. Такая замкнутая система уравнений, характеризующая все переменные процесса, которые влияют на интенсивность источников вещества и тепла в потоках, и составляет математическое описание химико-технологического процесса.

Рассмотрим частные выражения для источников вещества и тепла, встречающиеся при практической разработке математических описаний процессов химической технологии.

Химическая реакция в потоке. Интенсивность источника вещества q_i в уравнениях, характеризующих изменение его концентрации в потоке, равна скорости образования этого вещества w_{ri} в химической реакции, т. е.

$$q_i = w_{ri} \quad (\text{II, 23})$$

Скорость реакции w_{ri} в общем случае является функцией концентраций реагирующих веществ и температуры. Аналитический вид данной функции определяется конкретным типом химической реакции.

Интенсивность источника тепла в уравнениях, описывающих изменение температуры в потоке, равна суммарному тепловому эффекту Q_r всех химических реакций, протекающих в потоке:

$$q_T = Q_r \quad (\text{II, 24})$$

В общем случае величину Q_r можно выразить через интенсивность источников вещества или через скорости образования веществ в реакциях.

Массообмен потока с окружающей средой. Интенсивность источника вещества в этом случае равна скорости массопередачи w_{mi} :

$$q_i = w_{mi} \quad (\text{II, 25})$$

Если обозначить через F_m поверхность массообмена, приходящуюся на единицу объема, скорость массопередачи часто может быть выражена соотношением

$$w_{mi} = F_m K_{mi} (x_i^* - x_i) \quad (\text{II, 26})$$

в котором x_i^* представляет собой равновесную концентрацию вещества в окружающей среде, а K_{mi} — коэффициент массопередачи.

Теплообмен потока с окружающей средой. Интенсивность источника тепла q_T при этом равна скорости теплопередачи Q_T :

$$q_T = Q_T \quad (\text{II, 27})$$

Скорость теплопередачи Q_T , в свою очередь, часто выражается уравнением

$$Q_T = F_T K_T (T^* - T) \quad (\text{II, 28})$$

в котором F_T определяется как поверхность теплообмена, отнесенная к объему, а K_T представляет собой коэффициент теплопередачи от среды с температурой T^* .

Понятие коэффициента теплопередачи обычно используют при описании процессов теплообмена между двумя средами через промежуточную среду, тепловой инерцией которой можно пренебречь. В том случае, когда математическое описание составляют для двух непосредственно контактирующих сред, применяют коэффициент теплоотдачи от одной среды к другой. Размерность этого коэффициента совпадает с размерностью коэффициента теплопередачи.

При совместном протекании химической реакции и процессов массо- и теплообмена с окружающей средой интенсивность источников вещества и тепла в потоке определяется суммарной величиной скоростей «элементарных» процессов, рассмотренных выше, т. е.

$$q_i = w_{ri} + w_{mi} \quad (\text{II, 29})$$

$$q_T = Q_r + Q_T \quad (\text{II, 30})$$

Аналогичным образом учитываются также источники тепла и массы, обусловленные изменением агрегатного состояния части вещества потока, например вследствие испарения или конденсации.

При математическом описании процессов, сопровождающихся взаимодействием двух и более фаз, каждую фазу обычно описывают отдельно с учетом особенностей ее движения в контакте с другими фазами и процессов, происходящих в ней.

4. ПРИМЕРЫ МОДЕЛЕЙ ПРОЦЕССОВ

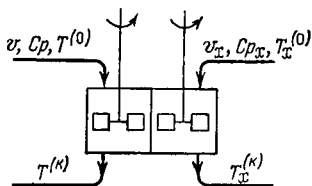
В данном разделе рассмотрены примеры математических моделей разных химико-технологических процессов. Основное внимание уделено математическим моделям, описывающим стационарные свойства процессов. Получаемые соотношения большей частью использованы в последующих главах для иллюстрации методов решения оптимальных задач.

Теплообменные процессы

В качестве примеров математических моделей теплообменных аппаратов ниже проанализированы модели теплообменников простейших типов, в которых осуществляется передача тепла между двумя потоками — теплоносителем и хладагентом. Во всех математических описаниях предполагается, что движение потоков теплоносителя и хладагента характеризуется простейшими гидродинамическими моделями «идеальное смешение» и «идеальное вытеснение». Кроме того, допускается, что коэффициент теплопередачи через стенку, разделяющую теплоноситель и хладагент, является постоянной заданной величиной, которая не зависит от их объемных расходов. Последнее допущение, строго говоря, неточно [8], однако оно принято в дальнейшем для упрощения математических выкладок при решении задач оптимизации.

Теплообменник типа «смешение — смешение» (рис. II-15). Математическое описание теплообменника в данном случае задают системой уравнений типа

Рис. II-15. Схематическое изображение теплообменника типа «смешение — смешение».



(II, 20), относящихся к обоим теплоносителям. Интенсивность источника тепла при этом определяется соотношением (II, 28). Стационарный режим теплообменника можно описать нестационарными уравнениями, в которых производные по времени полагаются равными нулю. В результате будет справедлива следующая система уравнений:

$$v c_p (T^{(0)} - T^{(k)}) - K_T F (T^{(k)} - T_x^{(k)}) = 0 \quad (\text{II, 31})$$

$$v_x c_{p_x} (T_x^{(0)} - T_x^{(k)}) + K_T F (T^{(k)} - T_x^{(k)}) = 0 \quad (\text{II, 32})$$

которая может быть решена относительно любых двух параметров, входящих в эти уравнения. В частности, для выходных температур теплоносителя $T^{(k)}$

и хладагента $T_x^{(k)}$ можно получить выражения:

$$T^{(k)} = T^{(0)} \frac{1 + K_T F \left(\frac{1}{v_x c_{Px}} + \frac{T_x^{(0)}}{T^{(0)}} \cdot \frac{1}{v c_P} \right)}{1 + K_T F \left(\frac{1}{v_x c_{Px}} + \frac{1}{v c_P} \right)} \quad (\text{II, 33})$$

$$T_x^{(k)} = T_x^{(0)} \frac{1 + K_T F \left(\frac{T^{(0)}}{T_x^{(0)}} \cdot \frac{1}{v_x c_{Px}} + \frac{1}{v c_P} \right)}{1 + K_T F \left(\frac{1}{v_x c_{Px}} + \frac{1}{v c_P} \right)} \quad (\text{II, 34})$$

При расчетах теплообменных аппаратов обычно задают тепловую нагрузку на теплообменник Q , т. е. количество тепла, которое требуется передать от теплоносителя хладагенту в единицу времени. Для определенного расхода теплоносителя, известной его теплоемкости и заданной входной температуры это по существу эквивалентно заданию необходимой выходной температуры теплоносителя, поскольку

$$Q = v c_P (T^{(0)} - T^{(k)}) \quad (\text{II, 35})$$

Задача расчета теплообменника ставится как задача определения поверхности теплообмена F . В данном случае вычисляются также выходную температуру хладагента $T_x^{(k)}$, которую можно найти из общего баланса тепла, не зависящего от типа теплообменника

$$v c_P (T^{(0)} - T^{(k)}) + v_x c_{Px} (T_x^{(0)} - T_x^{(k)}) = 0 \quad (\text{II, 36})$$

откуда

$$T_x^{(k)} = T_x^{(0)} + (T^{(0)} - T^{(k)}) \frac{v c_P}{v_x c_{Px}} \quad (\text{II, 37})$$

Подставляя в уравнение (II, 31) или (II, 32) выражение для выходной температуры хладагента (II, 37) и решая полученное уравнение относительно поверхности теплообмена, найдем:

$$F = \frac{v_x c_{Px}}{K_T \left(v \frac{v_x c_{Px}}{v c_P} - 1 \right)} \quad (\text{II, 38})$$

где

$$v = \frac{T^{(k)} - T_x^{(0)}}{T^{(0)} - T^{(k)}} \quad (\text{II, 39})$$

Знаменатель выражения (II, 38) может обращаться в нуль или принимать отрицательные значения. При этом поверхность теплообмена, определяемая указанным уравнением, равна бесконечности либо отрицательна, что в обоих случаях означает невозможность создания теплообменника на заданную тепловую нагрузку при принятых параметрах хладагента. Поэтому условие положительности знаменателя в выражении (II, 38) можно рассматривать как условие физической реализуемости теплообменника при заданных параметрах теплоносителя и хладагента:

$$v \frac{v_x c_{Px}}{v c_P} > 1 \quad (\text{II, 40})$$

Теплообменник типа «смешение — вытеснение» (рис. II-16). Такие теплообменники довольно широко распространены на практике. Типичными их примерами являются теплообменники, в которых охлаждение (или подогрев) теплоносителя осуществляется путем контакта с охлаждающим (или обогревающим) элементом змеевикового или трубчатого типа.

Движение потока хладагента в змеевиковых и трубчатых элементах небольшого диаметра удовлетворительно соответствует гидродинамической модели идеального вытеснения. Поэтому математическое описание гидродинамической структуры потоков теплообменника типа «смешение — вытеснение» представляется системой уравнений, одно из которых служит описанием гидродинамической модели идеального смешения для теплоносителя (II, 20), а другое — гидродинамической модели идеального вытеснения для хладагента (II, 21).

Для стационарного режима работы теплообменника уравнение, описывающее изменение температуры хладагента по длине зоны идеального вытеснения, имеет вид:

$$v_x c_{Px} \frac{dT_x}{dl} = \frac{K_T F}{l_F} (T^{(k)} - T_x) \quad (\text{II, 41})$$

Уравнение (II, 41) необходимо интегрировать при начальном условии:

$$T_x|_{l=0} = T_x^{(0)} \quad (\text{II, 42})$$

Поскольку температура хладагента изменяется по длине змеевика, интенсивность источника тепла для зоны идеального смешения теплоносителя не может быть представлена в форме соотношения (II, 28). В данном случае количество тепла, передаваемого в единицу времени хладагенту, выражается интегральным соотношением

$$q_T = \frac{K_T F}{l_F} \int_0^{l_F} [T_x(l) - T^{(k)}] dl \quad (\text{II, 43})$$

с использованием которого уравнение (II, 20) для стационарного состояния запишется в виде:

$$v c_P (T^{(0)} - T^{(k)}) = \frac{K_T F}{l_F} \int_0^L [T_x(l) - T^{(k)}] dl \quad (\text{II, 44})$$

При этом вместо уравнения (II, 44) целесообразнее применять уравнение общего теплового баланса (II, 36).

Аналогично предыдущему система уравнений (II, 36) и (II, 41) позволяет выразить любые два параметра как функции всех остальных. Интегрируя уравнение (II, 41) с учетом начального условия (II, 42), для выходной температуры хладагента получим:

$$T_x^{(k)} = T^{(k)} - (T^{(k)} - T_x^{(0)}) \exp\left(-\frac{K_T F}{v_x c_{Px}}\right) \quad (\text{II, 45})$$

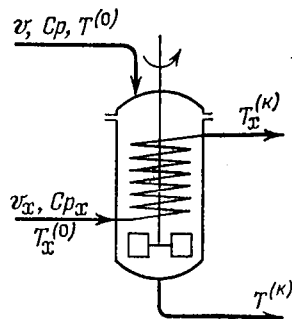


Рис. II-16. Схематическое изображение теплообменника типа «смешение—вытеснение».

Решая систему уравнений (II, 36) и (II, 45) относительно выходных значений температур теплоносителя и хладагента, найдем:

$$T^{(k)} = T^{(0)} \frac{1 + \frac{T_x^{(0)}}{T^{(0)}} \frac{v_x c_{Px}}{v c_P} \left[1 - \exp \left(- \frac{K_T F}{v_x c_{Px}} \right) \right]}{1 + \frac{v_x c_{Px}}{v c_P} \left[1 - \exp \left(- \frac{K_T F}{v_x c_{Px}} \right) \right]} \quad (\text{II, 46})$$

$$T_x^{(k)} = T_x^{(0)} \frac{1 + \left(\frac{T^{(0)}}{T_x^{(0)}} + \frac{v_x c_{Px}}{v c_P} - 1 \right) \left[1 - \exp \left(- \frac{K_T F}{v_x c_{Px}} \right) \right]}{1 + \frac{v_x c_{Px}}{v c_P} \left[1 - \exp \left(- \frac{K_T F}{v_x c_{Px}} \right) \right]} \quad (\text{II, 47})$$

Примем теперь, что в соотношении (II, 46) выходная температура теплоносителя известна. Тогда необходимая поверхность теплообмена составит:

$$F = - \frac{v_x c_{Px}}{K_T} \ln \left(1 - \frac{1}{v} \frac{v c_P}{v_x c_{Px}} \right) \quad (\text{II, 48})$$

где величина v по-прежнему определяется формулой (II, 39).

Условие физической реализуемости теплообменника типа «смещение — вытеснение» также имеет вид соотношения (II, 40), что в данном случае эквива-

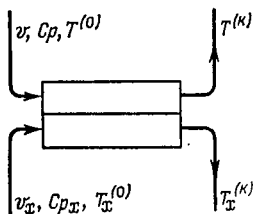


Рис. II-17. Схематическое изображение теплообменника проточного типа.

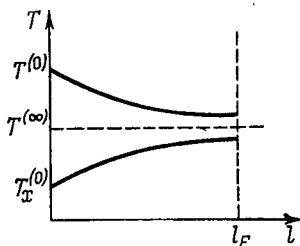


Рис. II-18. Изменение температур по длине теплообменника проточного типа.

лентно требованию положительности выражения, стоящего под знаком логарифма в формуле (II, 48).

Теплообменник проточного типа. Схематическое изображение теплообменника приведено на рис. II-17, где указаны направления движения потоков. Примерами таких аппаратов являются известные теплообменники типа «труба в трубе», движение потоков в которых удовлетворительно соответствует гидродинамической модели идеального вытеснения. Таким образом, математическое описание проточного теплообменника состоит из системы двух уравнений, аналогичных уравнению (II, 21). Стационарный режим работы теплообменника описывается системой уравнений, отражающих изменение температур теплоносителя и хладагента по длине аппарата:

$$v c_P \frac{dT}{dl} = \frac{K_T F}{l_F} (T_x - T) \quad (\text{II, 49})$$

$$v_x c_{Px} \frac{dT_x}{dl} = \frac{K_T F}{l_F} (T - T_x) \quad (\text{II, 50})$$

с граничными условиями:

$$T|_{l=0} = T^{(0)} \quad T_x|_{l=0} = T_x^{(0)} \quad (\text{II, 51})$$

Для интегрирования системы уравнений (II, 49) и (II, 50) можно использовать общие методы решения систем линейных дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами [9]. В результате получают следующие выражения, определяющие значения выходных температур теплоносителя и хладагента:

$$T^{(k)} = T^{(0)} - \frac{v_x c_{Px}}{v_x c_{Px} + v c_P} (T^{(0)} - T_x^{(0)}) \times \\ \times \left\{ 1 - \exp \left[- \frac{K_T F}{v c_P} \left(1 + \frac{v c_P}{v_x c_{Px}} \right) \right] \right\} \quad (\text{II, 52})$$

$$T_x^{(k)} = T_x^{(0)} + \frac{v c_P}{v_x c_{Px} + v c_P} (T^{(0)} - T_x^{(0)}) \times \\ \times \left\{ 1 - \exp \left[- \frac{K_T F}{v c_P} \left(1 + \frac{v c_P}{v_x c_{Px}} \right) \right] \right\} \quad (\text{II, 53})$$

На рис. II-18 показан характер изменения температур по длине теплообменника. Полагая, что температура теплоносителя на выходе теплообменника задана, из выражения (II, 52) можно найти необходимое значение поверхности теплообмена:

$$F = - \frac{v c_P}{K_T} \frac{\ln \left[1 - \frac{1}{v^*} \left(1 + \frac{v c_P}{v_x c_{Px}} \right) \right]}{1 + \frac{v c_P}{v_x c_{Px}}} \quad (\text{II, 54})$$

где

$$v^* = v + 1 = \frac{T^{(0)} - T_x^{(0)}}{T^{(0)} - T^{(k)}} \quad (\text{II, 55})$$

Массообменные процессы

Среди многообразия процессов химической технологии значительное место занимают процессы массообмена. По существу почти любой химико-технологический процесс в той или иной степени сопровождается явлениями массопередачи. Однако имеется большая группа процессов, для которых массопередача является основным фактором, определяющим их назначение. Примерами таких процессов служат ректификация, экстракция, абсорбция, десорбция и т. д., где массообмен происходит между различными фазами, в результате чего достигается обогащение одной фазы одним или несколькими компонентами. В настоящее время процессы массопередачи интенсивно исследуют методами математического моделирования [5, 10, 14], что позволяет использовать методы оптимизации для оптимальной организации этих процессов.

В данном разделе рассмотрен лишь один пример математической модели колонны ректификации бинарной смеси и один из случаев организации процесса экстракции по многоступенчатой

схеме с перекрестным током. Представленные примеры не претендуют на высокую точность математических описаний, а служат только иллюстрацией подхода к построению математических моделей массообменных процессов. Более подробное изложение этих вопросов можно найти в литературе [5, 10, 14].

Тарельчатая ректификационная колонна для разделения бинарной смеси. На рис. II-19 показана схема потоков в аппарате, определяющая структуру математического описания. Ректификационная колонна представляет собой совокупность трех аппаратов: собственно колонны, содержащей N тарелок; куба, в котором происходит испарение части жидкости за счет подвода тепла; конденсатора, где поднимающиеся по колонне пары конденсируются; конденсат поступает во флегмовую емкость, откуда часть его отбирается в виде готового продукта (дистиллята), а другая часть поступает на верхнюю тарелку колонны для орошения. Питание подается в колонну на тарелку с номером f , где оно смешивается с потоком жидкости, стекающим из укрепляющей части колонны.

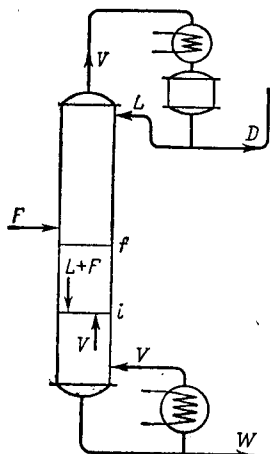


Рис. II-19. Схематическое изображение тарельчатой ректификационной колонны.

При построении математического описания в данном случае часто принимают следующие основные допущения:

1. Жидкость на тарелках колонны, а также в кубе и флегмовой емкости идеально смешивается.
2. Движение потока пара при его контакте с жидкостью на тарелках может быть описано гидродинамической моделью идеального вытеснения.
3. Унос жидкости паром с тарелок колонны отсутствует.
4. Количества пара и жидкости в потоках по высоте колонны не изменяются в пределах каждой секции, что соответствует, вообще говоря, лишь случаю разделения компонентов, имеющих близкие температуры кипения и теплоты испарения.
5. Жидкость на тарелках колонны находится при температуре кипения, а пар — при температуре конденсации. Питание в колонну подается в жидкой фазе при температуре кипения.
6. Куб колонны работает как парциальный испаритель.
7. В конденсаторе колонны происходит полная конденсация и дистиллят отбирается в жидкой фазе.
8. Орошение поступает в колонну при температуре кипения.
9. Пар равномерно распределяется по всему массообменному пространству тарелки.
10. Интенсивность массообмена между жидкостью и паром на тарелке характеризуется объемным коэффициентом массопередачи K_{0y1} , значение которого постоянно для всех точек массообменного пространства тарелки.
11. Известна зависимость равновесного состава пара от состава жидкости для заданного давления в колонне:

$$y_e^{(i)} = y_e(x^{(i)}) \quad (\text{II}, 56)$$

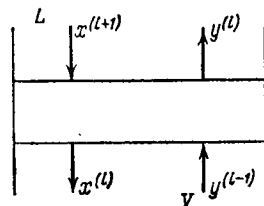
12. Количество питания F , его состав $x^{(F)}$, величина отбора дистиллята D и скорость пара в колонне V , определяемая количеством тепла, подводимым к кубу, принимаются заданными.

Задачей моделирования является нахождение составов жидкости и пара на всех тарелках колонны, а также составов получаемых продуктов, т. е. дистиллята и кубового остатка, для заданных условий разделения, под которыми по-

нимают величину отбора дистиллята, скорость пара в колонне, количество питания и его состав.

Основу математического описания ректификационной колонны составляет математическое описание процесса массопередачи на отдельной тарелке. При сделанных предположениях относительно характера движения жидкости и пара на тарелке ее математическое описание представляется системой уравнений, одно из которых служит характеристикой гидродинамической модели идеального смешения для жидкости (II, 14), а другое — описанием гидродинамической модели идеального вытеснения для пара (II, 15). Интенсивность источника массы для уравнения, отражающего изменение состава пара по высоте массообменного пространства тарелки, в данном случае можно выразить соотношением (II, 26). Поскольку рассматривается разделение бинарной смеси, ее состав полностью характеризуется концентрацией только одного компонента, например легкого.

Рис. II-20. Схема потоков на тарелке ректификационной колонны.



Для стационарного режима система уравнений математического описания тарелки (рис. II-20) имеет вид:

$$L(x^{(l+1)} - x^{(l)}) - \frac{K_{Oyl}}{H} \int_0^H [y_e^{(l)} - y(h)] dh = 0 \quad (\text{II, 57})$$

$$G \frac{dy(h)}{dh} = \frac{K_{Oyl}}{H} [y_e^{(l)} - y(h)] \quad (\text{II, 58})$$

Интеграл в уравнении (II, 57) численно равен изменению количества легкого компонента в потоке пара при его прохождении через массообменное пространство

$$\frac{K_{Oyl}}{H} \int_0^H [y_e^{(l)} - y^{(l)}(h)] dh = G[y^{(l)}(H) - y^{(l)}(0)] \quad (\text{II, 59})$$

что позволяет представить уравнение (II, 57) как уравнение общего баланса тарелки по легкому компоненту:

$$L(x^{(l+1)} - x^{(l)}) - G(y^{(l)} - y^{(l-1)}) = 0 \quad (\text{II, 60})$$

Уравнение (II, 58), описывающее изменение состава пара по высоте массообменного пространства, может быть проинтегрировано при начальном условии

$$y^{(l)}(h)|_{h=0} = y^{(l)}(0) = y^{(l-1)} \quad (\text{II, 61})$$

в результате чего можно найти состав пара, уходящего с тарелки:

$$y^{(l)} = y^{(l-1)} \exp\left(-\frac{K_{Oyl}}{G}\right) + y_e^{(l)} \left[1 - \exp\left(-\frac{K_{Oyl}}{G}\right)\right] \quad (\text{II, 62})$$

Общая система уравнений математического описания колонны включает следующие уравнения:

1) уравнение, описывающее работу куба колонны:

$$(L + F) x^{(1)} - W x^{(0)} - G y_e(x^{(0)}) = 0 \quad (\text{II, 63})$$

2) уравнения для расчета состава пара, уходящего с тарелок:

$$y^{(i)} = y^{(i-1)} \exp\left(-\frac{K_{0yi}}{G}\right) + y_e^{(i)} \left[1 - \exp\left(-\frac{K_{0yi}}{G}\right)\right] \quad (\text{II, 64})$$

3) материальные балансы для тарелок отпарной секции колонны:

$$(L + F)(x^{(i+1)} - x^{(i)}) - G(y^{(i)} - y^{(i-1)}) = 0 \quad i = 1, \dots, f-1 \quad (\text{II, 65})$$

4) материальный баланс для тарелки питания:

$$Lx^{(f+1)} + Fx^{(F)} - (L + F)x^{(f)} - G(y^{(f)} - y^{(f-1)}) = 0 \quad (\text{II, 66})$$

5) материальные балансы для тарелок укрепляющей секции колонны:

$$L(x^{(i+1)} - x^{(i)}) - G(y^{(i)} - y^{(i-1)}) = 0 \quad i = f+1, \dots, N \quad (\text{II, 67})$$

6) соотношение, определяющее состав дистиллята:

$$x^{(N+1)} = x^{(D)} \quad (\text{II, 68})$$

7) общий материальный баланс колонны по легкому компоненту:

$$Fx^{(F)} - Dx^{(D)} - Wx^{(0)} = 0 \quad (\text{II, 69})$$

8) уравнение для расчета состава пара, равновесного жидкости:

$$y_e^{(i)} = y_e(x^{(i)}) \quad (\text{II, 70})$$

9) зависимость объемного коэффициента массопередачи от состава разделяемой смеси и скоростей потоков пара и жидкости:

$$K_{0yi} = K_{0yi}(x^{(i)}, L^{(i)}, G) \quad (\text{II, 71})$$

Приведенная система уравнений (II, 63)—(II, 71) при сделанных выше предположениях полностью описывает стационарный режим работы колонны и может быть использована для решения различных задач математического моделирования.

Моделирующий алгоритм в данном случае должен в принципе обеспечивать возможность решения представленной системы уравнений математического описания при любых значениях задаваемых параметров. Наиболее просто эта система может быть решена с использованием метода расчета «от тарелки к тарелке», который заключается в последовательном выполнении следующих этапов расчета:

1. Задается состав кубового остатка $x^{(0)}$.

2. По уравнению (II, 70) определяется состав пара $y^{(0)}$, уходящего из куба колонны.

3. По уравнению (II, 63) находится состав жидкости на первой тарелке колонны.

4. По известному составу пара, поступающего на тарелку, и известному составу жидкости на ней при помощи уравнения (II, 64) с учетом соотношений (II, 70) и (II, 71) рассчитывается состав пара, уходящего с тарелки, а по уравнениям (II, 65)—(II, 67) определяется состав жидкости на вышележащей тарелке. Эта расчетная процедура повторяется для всех тарелок колонны, в результате чего находится состав дистиллята [см. уравнение (II, 68)].

5. Проверяется выполнение уравнения общего материального баланса колонны (II, 69) для принятого состава кубового остатка и полученного расчетным путем состава дистиллята. Если баланс не выполняется с заданной степенью точности, расчет повторяется с измененным соответствующим образом составом кубового остатка, начиная со второго этапа, до тех пор пока общий материаль-

ный баланс колонны не будет сведен с заданной точностью, после чего расчет заканчивается.

Таким образом, изложенный алгоритм решения системы уравнений математического описания ректификационной колонны представляет собой итеративную процедуру, в процессе применения которой определяют значение состава кубового остатка, удовлетворяющее общему материальному балансу, причем каждая итерация сопровождается расчетом по всем тарелкам колонны. Разумеется, что эффективность указанного метода решения существенно зависит от того, насколько эффективен способ уточнения состава кубового остатка.

На рис. II-21 приведен пример распределения составов по тарелкам колонны, рассчитанного с использованием рассмотренной модели.

Процесс экстракции с перекрестным током (рис. II-22). Аппаратурное оформление процесса включает N ступеней, через которые последовательно протекает раствор извлекаемого вещества. Извлечение производится подачей на каждую ступень промывной воды, количество которой для разных ступеней может быть различным. Скорость подачи раствора на экстракцию равна F ; концентрация извлекаемого вещества в растворе на i -ой ступени составляет $x^{(i)}$; количество промывной воды, подаваемой на i -ую ступень, равно $v^{(i)}$. Часть конечного продукта в количестве $L^{(r)}$ подается обратно в виде рециркулята на вход первой ступени.

При построении математического описания принимают следующие допущения:

1. Раствор на каждой ступени идеально смешивается.

2. Промывная вода и раствор не смешиваются, так что вода, подаваемая на i -ую ступень, целиком уходит с этой ступени.

3. Промывная вода, уходящая со ступени, насыщена извлекаемым веществом до равновесной концентрации, которая определяется уравнением:

$$x_e^{(i)} = x_e(x^{(i)}) \quad (\text{II}, 72)$$

в котором через $x_e^{(i)}$ обозначена концентрация извлекаемого вещества в промывной воде, а через $x^{(i)}$ — концентрация извлекаемого вещества в растворе.

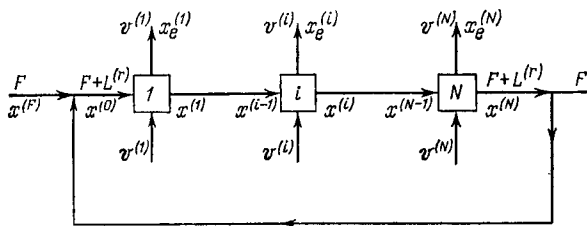


Рис. II-22. Схематическое изображение процесса экстракции с перекрестным током.

С учетом сформулированных выше допущений математическое описание i -ой ступени определяется балансовым соотношением для извлекаемого вещества:

$$(F + L^{(r)})(x^{(i-1)} - x^{(i)}) - v^{(i)}x_e^{(i)} = 0 \quad (\text{II}, 73)$$

Смешение подаваемого и рециркулируемого потоков описывается уравнением:

$$x^{(0)} = \frac{Fx^{(F)} + L^{(r)}x^{(N)}}{L + L^{(r)}} \quad (\text{II}, 74)$$

Соотношения (II, 72)—(II, 74) представляют собой математическое описание рассматриваемого процесса, позволяющее для заданных количеств промывной воды на каждой ступени найти общее количество извлекаемого из раствора вещества, которое определяется выражением:

$$g = \sum_{i=1}^n v^{(i)} x_e^{(i)} \quad (\text{II, 75})$$

Алгоритм решения системы уравнений математического описания в данном случае до некоторой степени аналогичен алгоритму расчета для процесса ректификации и складывается из следующих этапов:

1. Задается состав рециркулируемого потока $x^{(N)}$.
2. По уравнению (II, 74) определяется состав потока, поступающего на первую ступень.
3. По уравнениям (II, 73) последовательно вычисляются составы на всех ступенях извлечения.
4. Состав раствора, выходящего с последней ступени, сравнивается с составом рециркулируемого потока, принятым для этого цикла расчета. Если найденный состав для последней ступени не совпадает с принятым составом рециркулируемого потока, расчет повторяется с соответствующим образом скорректированным составом рецикла, начиная со второго этапа. Если получено удовлетворительное совпадение принятого и вычисленного составов рецикла, расчет заканчивается.

Химические процессы

При математическом моделировании процессов, сопровождающихся химическими превращениями, важнейшее значение имеет учет их механизмов. В особой мере это относится к моделированию химических реакторов, где реакции, как правило, определяют аппаратное оформление всего процесса. При разработке математических моделей таких процессов используют рассмотренные выше или более сложные гидродинамические модели потоков [11], в которые в качестве характеристик источников массы входят скорости образования продуктов в химических реакциях.

Скорость химической реакции. С одной стороны, согласно определению, изменение количества реагента A в элементарном объеме δV_r пропорционально величине этого объема δV_r , скорости образования продукта w_A и промежутку времени dt , в течение которого наблюдается изменение количества A на величину dm_A , т. е.

$$dm_A = \delta V_r w_A dt \quad (\text{II, 76})$$

С другой стороны, указанное количественное изменение вещества A в элементарном объеме δV_r может быть представлено как

$$dm_A = d(\delta V_r x_A) \quad (\text{II, 77})$$

Приравнивая правые части выражений (II, 76) и (II, 77), найдем

$$d(\delta V_r x_A) = \delta V_r w_A dt \quad (\text{II, 78})$$

или

$$\frac{d(\delta V_r x_A)}{dt} = \delta V_r w_A \quad (\text{II, 79})$$

Если элементарный объем измеряется в мольном выражении и число молей реагирующих веществ не изменяется при химических превращениях, то $\delta V_r = \text{const}$ и уравнение (II, 79) принимает вид:

$$\frac{dx_A}{dt} = w_A \quad (\text{II, 80})$$

Уравнение (II, 80) представляет собой не что иное, как известное кинетическое уравнение, определяющее скорость химической реакции в изолированном объеме реакционной смеси при условии постоянства общего числа молей в ходе химического превращения.

Если число молей изменяется в процессе реакции, это необходимо учитывать при преобразовании выражения (II, 79), которое в данном случае можно записать в виде:

$$\delta V_r \frac{dx_A}{dt} + x_A \frac{d(\delta V_r)}{dt} = \delta V_r w_A \quad (\text{II, 81})$$

При протекании в рассматриваемом объеме только одной химической реакции, скорость которой характеризуется величиной w_A , скорость изменения объема реагирующей смеси с точностью до постоянного множителя, определяемого стехиометрией реакции, равна скорости образования реагента A в этом объеме. Например, для реакции



скорость изменения объема реагирующей смеси можно представить уравнением

$$\frac{d(\delta V_r)}{dt} = v \delta V_r w_A \quad (\text{II, 83})$$

в котором w_A — скорость образования реагента A ; δV_r — объем реагирующей смеси; v — коэффициент изменения мольного объема, определяемый соотношением:

$$v = n_A - n_P \quad (\text{II, 84})$$

Комбинируя соотношения (II, 83) и (II, 81), получим:

$$\frac{dx_A}{dt} = w_A (1 - vx_A) = \tilde{w}_A \quad (\text{II, 85})$$

что эквивалентно некоторому изменению выражения для скорости образования реагента A в кинетическом уравнении (II, 80).

Аналогичное уравнение может быть выведено и при одновременном протекании нескольких (m) химических реакций, каждая

из которых сопровождается изменением мольных количеств реагирующих веществ. Уравнение, определяющее изменение объема реагирующей смеси, в данном случае можно представить в виде

$$\frac{d(\delta V_r)}{dt} = \delta V_r \sum_{k=1}^m v_k w_k \quad (\text{II}, 86)$$

что позволяет записать кинетическое уравнение для i -го компонента в следующей форме:

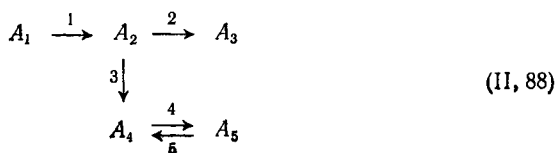
$$\frac{dx_i}{dt} = w_i - x_i \sum_{k=1}^m v_k w_k = \tilde{w}_i \quad (\text{II}, 87)$$

Выбор ключевых компонентов сложной химической реакции.

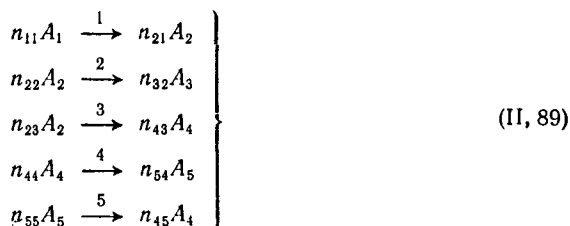
При разработке математической модели процесса, в котором происходит сложная химическая реакция с большим числом реагирующих веществ, в составе его математического описания нужно иметь уравнения, описывающие характер изменения всех компонентов реакции. Оказывается, что при этом не обязательно для всех компонентов смеси записывать уравнения с учетом соответствующей гидродинамической модели процесса. Достаточно записать их только для некоторых компонентов, называемых *ключевыми* [12]. При этом количественное содержание остальных компонентов определяется простыми стехиометрическими соотношениями через ключевые.

Понятие «скорость образования реагента в химической реакции», применяемое для характеристики простейших реакций типа $A \rightarrow P$, становится менее удобным при анализе более сложных многостадийных реакций, в которых наряду с исходными веществами и конечными продуктами получаются также промежуточные продукты. Для описания таких многостадийных реакций целесообразнее воспользоваться понятием «скорость стадии сложной реакции», определяемая как скорость образования реагента в элементарной стадии, отнесенная к его стехиометрическому коэффициенту в химическом превращении на указанной стадии. Стехиометрическому коэффициенту присваивается знак (+) или (—) в зависимости от того, образуется или расходуется этот реагент на данной элементарной стадии реакции.

Например, для сложной химической реакции, схема превращений в которой имеет вид



можно рассмотреть следующие элементарные стадии



где индексы i и j у стехиометрических коэффициентов n_{ij} обозначают номер реагента i и номер стадии реакции j . Поскольку для элементарных стадий скорости образования реагентов, стоящих в левых частях соотношений (II, 89), отрицательны, соответствующие стехиометрические коэффициенты n_{11} , n_{22} , n_{33} , n_{44} и n_{55} для расчета скоростей стадий принимаются со знаком $(-)$. В этом случае скорости стадий определяются выражениями

$$\left. \begin{array}{l} r_1 = -\frac{w_{11}}{n_{11}} = \frac{w_{21}}{n_{21}} \\ r_2 = -\frac{w_{22}}{n_{22}} = \frac{w_{32}}{n_{32}} \\ r_3 = -\frac{w_{23}}{n_{23}} = \frac{w_{43}}{n_{43}} \\ r_4 = -\frac{w_{44}}{n_{44}} = \frac{w_{54}}{n_{54}} \\ r_5 = -\frac{w_{55}}{n_{55}} = \frac{w_{45}}{n_{45}} \end{array} \right\} \quad (\text{II, 90})$$

где w_{ij} — скорость образования i -го реагента на j -ой стадии реакции.

Введение в рассмотрение понятия скорости стадии как основной характеристики сложной химической реакции оправдано тем, что для элементарной стадии часто может быть использовано следующее аналитическое выражение скорости

$$r_j = k_j(T) \varphi_j(x_1, \dots, x_m) \quad (\text{II, 91})$$

в котором вид функции концентраций реагирующих веществ $\varphi_j(x_1, \dots, x_m)$ обусловлен типом конкретной реакции.

Величина $k_j(T)$ — константа скорости реакции, зависящая от температуры и обычно принимаемая в виде уравнения Аррениуса

$$k_j(T) = k_{j\infty} \exp\left(-\frac{E_j}{R_g T}\right) \quad (\text{II, 92})$$

в котором $k_{j\infty}$ — так называемый частотный фактор реакции, определяемый вероятностью элементарного акта превращения, а E_j — энергия активации реакции, равная той минимальной энергии, которой должны обладать молекулы для того, чтобы превращение стало возможным.

Если скорости всех стадий сложной реакции известны, то нетрудно найти значения скоростей образования всех реагентов, участвующих в реакции.

Для приведенной выше реакции (II, 88) скорости образования реагентов A_i ($i = 1, \dots, 5$) составят:

$$\left. \begin{aligned} \omega_1 &= -n_{11}r_1 \\ \omega_2 &= n_{21}r_1 - n_{22}r_2 - n_{23}r_3 \\ \omega_3 &= n_{32}r_2 \\ \omega_4 &= n_{43}r_3 - n_{44}r_4 + n_{45}r_5 \\ \omega_5 &= n_{54}r_4 - n_{55}r_5 \end{aligned} \right\}. \quad (\text{II, 93})$$

Таким образом, при известных скоростях стадий сложную химическую реакцию можно однозначно определить заданием матрицы стехиометрических коэффициентов, составленной с учетом правила знаков. Для реакции (II, 88) эта матрица имеет вид:

$$[n_{ij}] = \begin{bmatrix} -n_{11} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ n_{21} & -n_{22} & -n_{23} & 0 & 0 \\ 0 & n_{32} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & n_{43} & -n_{44} & n_{45} \\ 0 & 0 & 0 & n_{54} & -n_{55} \end{bmatrix} \quad (\text{II, 93a})$$

Очевидно, что если между строками матрицы стехиометрических коэффициентов существует линейная зависимость, то некоторые из них могут быть представлены как линейные комбинации линейно независимых строк (см. Приложение 1). Это равносильно тому, что скорости образования ряда компонентов можно выразить через скорости образования остальных реагентов с помощью линейных соотношений. Другими словами, при математическом описании сложных реакций удастся уменьшить число уравнений, необходимых для полного описания процесса за счет использования простейших стехиометрических соотношений для неключевых компонентов реакции.

Покажем это на примере сложной реакции, проводимой в изолированном объеме, что соответствует случаю реактора периодического действия. Допустим, что в реакции участвуют m компонентов A_i ($i = 1, \dots, m$), для которых известны аналитические выражения скоростей образования ω_i ($i = 1, \dots, m$). Кинетические уравнения в данном случае имеют вид:

$$\frac{dx_i}{dt} = \omega_i \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{II, 94})$$

Предположим, что среди скоростей образования ω_i только $m-1$ линейно независимы, а величина ω_m может быть представлена линейной комбинацией всех остальных:

$$\omega_m = \sum_{k=1}^{m-1} \alpha_k \omega_k \quad (\text{II, 95})$$

При этом кинетическое уравнение для m -го реагента запишется как

$$\frac{dx_m}{dt} = w_m = \sum_{k=1}^{m-1} \alpha_k w_k \quad (\text{II, 96})$$

или с учетом выражений (II, 94):

$$\frac{dx_m}{dt} = \sum_{k=1}^{m-1} \alpha_k \frac{dx_k}{dt} \quad (\text{II, 97})$$

Уравнение (II, 97) можно проинтегрировать при начальных условиях

$$x_i|_{t=0} = x_i^{(0)} \quad (\text{II, 98})$$

в результате чего получим:

$$x_m(t) = x_m^{(0)} + \sum_{k=1}^{m-1} \alpha_k [x_k(t) - x_k^{(0)}] \quad (\text{II, 99})$$

Из уравнения (II, 99) следует, что концентрация реагента A_m в любой момент времени определяется концентрациями всех остальных компонентов. Таким образом, отпадает необходимость задания в математическом описании уравнения, характеризующего изменение концентрации реагента A_m . Это уравнение заменяют соотношением (II, 99), которое и используют при необходимости для нахождения концентрации компонента A_m через известные концентрации остальных реагентов, определяемые в результате интегрирования соответствующих уравнений математического описания.

Компоненты, задание которых однозначно характеризует состояние процесса, сопровождаемого химической реакцией, в любой момент времени, как уже отмечалось, обычно называют ключевыми. Уравнения математической модели с учетом гидродинамических условий записывают только для этих компонентов, в то время как остальные (неключевые) компоненты определяют из соотношений, аналогичных выражению (II, 99).

Процедура выбора ключевых компонентов сложной химической реакции связана с понятием ранга матрицы стехиометрических коэффициентов (см. Приложение 1), который характеризует максимальное число линейно независимых строк или столбцов матрицы. В общем случае число строк матрицы стехиометрических коэффициентов может быть не равно числу ее столбцов, т. е. число реагентов может быть не равно числу стадий сложной реакции.

Рассмотрим матрицу стехиометрических коэффициентов (II, 93а) реакции (II, 88). Ее определитель нетрудно вычислить в общем виде по формуле:

$$\det [n_{ij}] = n_{11} n_{38} n_{23} (n_{48} n_{64} - n_{44} n_{56}) \quad (\text{II, 100})$$

Если ранг матрицы меньше ее порядка, то данный определитель должен обращаться в нуль. Единственная возможность для этого имеется, когда в нуль обращается выражение, стоящее в круглых скобках, т. е.

$$n_{45}n_{54} - n_{44}n_{55} = 0 \quad (\text{II, 101})$$

Нетрудно видеть, что этот случай отвечает выполнению условий, соответствующих обратимым реакциям:

$$n_{44} = n_{54} \quad n_{45} = n_{55} \quad (\text{II, 102})$$

При этом последняя строка матрицы стехиометрических коэффициентов может быть представлена в виде линейной комбинации всех остальных строк, что и определяет выражение искомой скорости через скорости образования остальных компонентов:

$$\omega_5 = - \left(\frac{n_{21}n_{43}}{n_{11}n_{23}} \omega_1 + \frac{n_{43}}{n_{23}} \omega_2 + \frac{n_{22}n_{43}}{n_{23}n_{32}} \omega_3 + \omega_4 \right) \quad (\text{II, 103})$$

Таким образом, при моделировании процесса с реакцией (II, 88) достаточно описать характер изменения концентраций четырех компонентов. Последний реагент A_5 (при желании вместо него можно исключить из рассмотрения реагент A_4) в данном случае описывается выражением типа (II, 99).

Используя понятие скорости стадии, суммарный тепловой эффект сложной химической реакции находят по уравнению:

$$Q_r = \sum_{j=1}^s n_{ij} q_j r_j \quad (\text{II, 104})$$

в котором q_j — тепловой эффект j -ой стадии, отнесенный на 1 моль продукта реакции этой стадии A_{ij} ; n_{ij} — стехиометрический коэффициент образующегося на j -ой стадии продукта реакции A_{ij} ; s — число стадий сложной реакции.

Реактор идеального смешения. Математическое описание данного реактора можно получить из общих уравнений гидродинамики потока для случая идеального смешения (II, 14) и (II, 20), если подставить в них соответствующие выражения для интенсивности источников массы и тепла. Интенсивность источников массы в этом случае равна скоростям образования реагентов. Полагая, что в процессе химического превращения число молей реагирующих веществ не изменяется, находят следующие уравнения для ключевых компонентов реакции:

$$V_r \frac{dx_i}{dt} = v(x_i^{(0)} - x_i) + V_r \omega_i \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{II, 105})$$

При наличии теплового эффекта реакции система уравнений (II, 105) должна быть дополнена соотношением, определяющим характер изменения температуры в зоне реакции, которое можно получить из уравнения (II, 20). В общем случае возможен теплообмен реагирующей смеси с внешним теплоносителем. Чтобы учесть его, нужно использовать выражение для источника тепла в

форме уравнения (II, 30), т. е. с включением в него теплового эффекта реакции и теплопередачи:

$$V_r c_p \frac{dT}{dt} = v c_p (T^{(0)} - T) + V_r Q_r + K_T F (T_x - T) \quad (\text{II, 106})$$

При записи выражения (II, 106) предполагается, что теплоемкость c_p реагирующей смеси не изменяется в процессе химической реакции.

Совместное решение системы уравнений (II, 105) и (II, 106), дополненной при необходимости стехиометрическими соотношениями для неключевых реагентов, определяет при сделанных выше предположениях поведение реактора идеального смешения в случае нестационарных режимов. Для того чтобы получить систему уравнений, характеризующую стационарные режимы реактора, достаточно в уравнениях (II, 105) и (II, 106) положить производные по времени равными нулю.

В результате система конечных уравнений запишется в виде

$$v (x_i^{(0)} - x_i) + V_r w_i = 0 \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{II, 107})$$

$$v c_p (T^{(0)} - T) + V_r Q_r + K_T F (T_x - T) = 0 \quad (\text{II, 108})$$

откуда для стационарного режима можно найти значения концентраций реагентов и температуры в реакторе при заданных значениях входных концентраций реагентов $x_i^{(0)}$, температуры смеси $T^{(0)}$, подаваемой в реактор, и температуры теплоносителя T_x .

Система уравнений (II, 107) и (II, 108) может быть переписана в более удобном виде, если ввести обозначение для среднего времени пребывания реагентов в аппарате:

$$\tau = \frac{V_r}{v} \quad (\text{II, 109})$$

с учетом которого уравнения (II, 107) и (II, 108) примут вид:

$$x_i^{(0)} - x_i + \tau w_i = 0 \quad (\text{II, 110})$$

$$T^{(0)} - T + \tau \frac{Q_r}{c_p} + \frac{K_T F}{v c_p} (T_x - T) = 0 \quad (\text{II, 111})$$

Ниже рассмотрен ряд примеров построения математического описания реактора идеального смешения для различных типов химических реакций, проводимых в изотермических условиях.

Пример II-1. Для реакции типа



скорость которой выражается уравнением

$$r = k x_A \quad (\text{II, 113})$$

найти состав смеси на выходе реактора идеального смешения,

Решение. Для описания изотермического режима аппарата в данном случае достаточно иметь только одно уравнение, характеризующее концентрацию одного из реагентов, например вещества A . Концентрацию второго реагента при этом вычисляем из соотношения:

$$x_P = x_P^{(0)} + (x_A^{(0)} - x_A) \quad (\text{II, 114})$$

С учетом выражения для скорости стадии (II, 113) находим скорость образования реагента A :

$$w_A = -kx_A \quad (\text{II, 115})$$

Воспользовавшись одним из уравнений системы (II, 110), получаем

$$x_A^{(0)} - x_A - \tau k x_A = 0 \quad (\text{II, 116})$$

откуда легко рассчитываем концентрацию реагента A для заданного значения

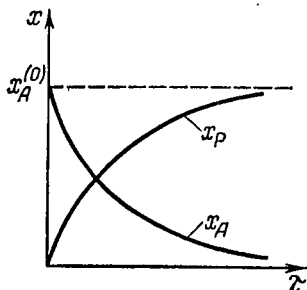


Рис. II-23. Изменение концентраций в реакторе идеального смешения в зависимости от времени пребывания τ для реакции $A \rightarrow P$.

среднего времени пребывания τ при заданной константе скорости реакции k , значение которой определяется температурой реагирующей смеси:

$$x_A = \frac{x_A^{(0)}}{1 + \tau k} \quad (\text{II, 117})$$

На рис. II-23 показан характер изменения концентраций x_A и x_P в зависимости от времени пребывания τ .

Пример II-2. Для реакции



скорости стадий которой составляют:

$$r_1 = k_1 x_A \quad r_2 = k_2 x_P \quad (\text{II, 119})$$

найти состав смеси на выходе реактора идеального смешения.

Решение. Как и в предыдущем примере, состояние процесса однозначно определяется концентрацией одного из реагентов. Если в качестве ключевого выбран компонент A , то концентрация реагента P по-прежнему характеризуется соотношением (II, 114) и уравнение для скорости второй стадии реакции (II, 119) может быть представлено в виде:

$$r_2 = k_2 (x_P^{(0)} + x_A^{(0)} - x_A) \quad (\text{II, 120})$$

Для скорости образования реагента A имеем выражение

$$w_A = k_2 (x_P^{(0)} + x_A^{(0)} - x_A) - k_1 x_A \quad (\text{II, 121})$$

с помощью которого можно получить следующее уравнение для стационарного режима реактора:

$$x_A^{(0)} = x_A - \tau [k_2 (x_P^{(0)} + x_A^{(0)} - x_A) - k_1 x_A] \quad (\text{II, 122})$$

Решая уравнение (II, 122) относительно концентрации x_A , находим:

$$x_A = \frac{x_A^{(0)} + \tau k_2 (x_A^{(0)} + x_P^{(0)})}{1 + \tau (k_1 + k_2)} \quad (\text{II, 123})$$

В частном случае, когда продукт реакции P в исходной смеси отсутствует ($x_P^{(0)} = 0$), из уравнения (II, 123) следует:

$$x_A = x_A^{(0)} \frac{1 + \tau k_2}{1 + \tau (k_1 + k_2)} \quad (\text{II, 124})$$

Подстановка выражения (II, 124) в соотношение (II, 114) дает:

$$x_P = x_A^{(0)} \frac{\tau k_1}{1 + \tau (k_1 + k_2)} \quad (\text{II, 125})$$

На рис. II-24 показано изменение концентраций x_A и x_P в зависимости от τ . При $\tau \rightarrow \infty$ в отличие от предыдущего примера концентрация реагента A стремится не к нулю, а к определенному значению:

$$x_A^{(\infty)} = x_A^{(0)} \frac{k_2}{k_1 + k_2} \quad (\text{II, 126})$$

Пример II-3. Для реакции типа



скорости стадий которой характеризуются выражениями

$$r_1 = k_1 x_A \quad r_2 = k_2 x_A \quad (\text{II, 128})$$

найти состав смеси на выходе реактора идеального смешения.

Решение. Для однозначного определения состояния процесса здесь уже необходимо задание значений двух концентраций, т. е. для этой реакции число ключевых компонентов равно двум. Положим, что в качестве ключевых выберем компоненты A и P . Тогда скорости их образования соответственно запишутся в виде:

$$w_A = -(k_1 + k_2) x_A \quad (\text{II, 129})$$

$$w_P = k_1 x_A \quad (\text{II, 130})$$

При этом стационарный режим характеризуется системой уравнений

$$x_A^{(0)} - x_A - \tau (k_1 + k_2) x_A = 0 \quad (\text{II, 131})$$

$$x_P^{(0)} - x_P + \tau k_1 x_A = 0 \quad (\text{II, 132})$$

решая которую, можно найти

$$x_A = \frac{x_A^{(0)}}{1 + \tau (k_1 + k_2)} \quad (\text{II, 133})$$

$$x_P = x_P^{(0)} + x_A^{(0)} \frac{\tau k_1}{1 + \tau (k_1 + k_2)} \quad (\text{II, 134})$$

В частном случае, когда продукт реакции P отсутствует в исходной смеси, вместо выражения (II, 134) получим уравнение

$$x_P = x_A^{(0)} \frac{\tau k_1}{1 + \tau(k_1 + k_2)} \quad (\text{II, 135})$$

которое в точности совпадает с приведенным выше выражением (II, 125) для концентрации продукта P на выходе аппарата при протекании обратной реакции.

На рис. II-25 показан характер изменения концентраций продуктов реакции в зависимости от τ .

Пример II-4. Для реакции типа



скорости стадий которой характеризуются уравнениями

$$r_1 = k_1 x_A \quad r_2 = k_2 x_P \quad (\text{II, 137})$$

найти состав смеси на выходе реактора идеального смешения.

Решение. Как и в предыдущем примере, для однозначного определения состава реагирующей смеси необходимо задание концентраций двух ключевых

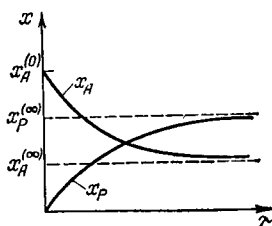


Рис. II-24. Изменение концентраций в реакторе идеального смешения в зависимости от времени пребывания τ для реакций $A \xrightarrow{1} P$.

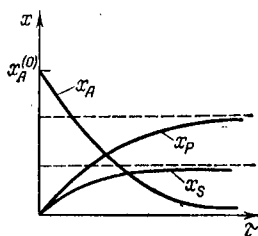


Рис. II-25. Изменение концентраций в реакторе идеального смешения в зависимости от времени пребывания

ния τ для реакций $A \xrightarrow{1} P \xrightarrow{2} S$.

компонентов, в качестве которых могут быть выбраны любые два реагента, например A и P . Аналитические выражения для скоростей образования этих реагентов с учетом соотношений (II, 137) имеют вид:

$$w_A = -k_1 x_A \quad (\text{II, 138})$$

$$w_P = k_1 x_A - k_2 x_P \quad (\text{II, 139})$$

Стационарный режим реактора описывается системой уравнений

$$x_A^{(0)} - x_A - \tau k_1 x_A = 0 \quad (\text{II, 140})$$

$$x_P^{(0)} - x_P + \tau(k_1 x_A - k_2 x_P) = 0 \quad (\text{II, 141})$$

в результате решения которой находим:

$$x_A = \frac{x_A^{(0)}}{1 + \tau k_1} \quad (\text{II, 142})$$

$$x_P = \frac{x_P^{(0)} + \tau k_1 (x_A^{(0)} + x_P^{(0)})}{(1 + \tau k_1)(1 + \tau k_2)} \quad (\text{II, 143})$$

В частном случае $x_P^{(0)} = 0$ из уравнения (II, 143) получим:

$$x_P = x_A^{(0)} \frac{\tau k_1}{(1 + \tau k_1)(1 + \tau k_2)} \quad (\text{II, 144})$$

На рис. II-26 показано изменение концентраций в зависимости от времени пребывания для различных значений $x_P^{(0)}$. Из рисунка видно, что при достаточно малом значении $x_P^{(0)}$ функция $x_P(\tau)$ имеет максимум, что является характерным признаком рассматриваемой реакции. Величину $\tau_{\text{опт}}$, соответствующую максимальному значению концентрации x_P , можно найти аналитически (см. стр. 113).

Пример II-5. Для реакции типа



скорости стадий которой определяются выражениями

$$r_1 = k_1 x_A \quad r_2 = k_2 x_P \quad r_3 = k_3 x_P \quad (\text{II, 146})$$

найти состав смеси на выходе реактора идеального смешения.

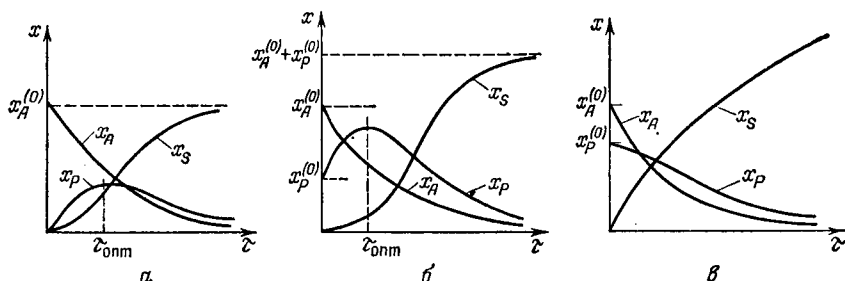


Рис. II-26. Изменение концентраций в реакторе идеального смешения в зависимости от времени пребывания τ для реакции $A \rightarrow P \rightarrow S$ при различных значениях концентрации продукта P в исходном сырье.

Решение. Здесь также в качестве ключевых компонентов необходимо принять любые два реагента, например A и P . Скорости образования их могут быть представлены как

$$w_A = k_3 x_P - k_1 x_A \quad (\text{II, 147})$$

$$w_P = k_1 x_A - (k_2 + k_3) x_P \quad (\text{II, 148})$$

Стационарный режим реактора описывается системой уравнений

$$x_A^{(0)} - x_A + \tau (k_3 x_P - k_1 x_A) = 0 \quad (\text{II, 149})$$

$$x_P^{(0)} - x_P + \tau [k_1 x_A - (k_2 + k_3) x_P] = 0 \quad (\text{II, 150})$$

в результате решения которой находим:

$$x_A = \frac{[1 + \tau (k_2 + k_3)] x_A^{(0)} + \tau k_3 x_P^{(0)}}{1 + \tau (k_1 + k_2 + k_3) + \tau^2 k_1 k_2} \quad (\text{II, 151})$$

$$x_P = \frac{\tau k_1 x_A^{(0)} + (1 + \tau k_1) x_P^{(0)}}{1 + \tau (k_1 + k_2 + k_3) + \tau^2 k_1 k_2} \quad (\text{II, 152})$$

Для $x_P^{(0)} = 0$ уравнение (II, 152) имеет вид:

$$x_P = x_A^{(0)} \frac{\tau k_1}{1 + \tau(k_1 + k_2 + k_3) + \tau^2 k_1 k_2} \quad (\text{II, 153})$$

Зависимость концентраций от времени пребывания τ показана на рис. II-27, из которого следует, что при малых значениях $x_P^{(0)}$ вид соответствующих кривых аналогичен рассмотренным в предыдущем примере (ср. рис. II-26, а и II-27, а).

Пример II-6. Для реакции типа



скорости стадий которой определяются выражениями

$$r_1 = k_1 x_A \quad r_2 = k_2 x_P \quad r_3 = k_3 x_A \quad (\text{II, 155})$$

найти состав смеси на выходе реактора идеального смешения.

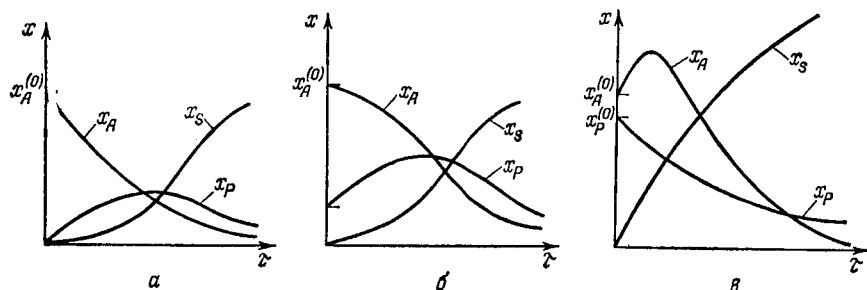


Рис. II-27. Изменение концентраций в реакторе идеального смешения в зависимости от времени пребывания τ для реакции $A \xrightarrow{1} P \xrightarrow{2} S$ при различных значениях концентрации продукта P в исходном сырье.

Решение. В этом случае в качестве ключевых необходимо выбрать уже любые три реагента, например A , P и Q . Скорости их образования с учетом соотношений (II, 155) можно представить как

$$w_A = -(k_1 + k_3) x_A \quad (\text{II, 156})$$

$$w_P = k_1 x_A - k_2 x_P \quad (\text{II, 157})$$

$$w_Q = k_3 x_A \quad (\text{II, 158})$$

Система уравнений математического описания стационарного режима реактора имеет вид:

$$x_A^{(0)} - x_A - \tau(k_1 + k_3) x_A = 0 \quad (\text{II, 159})$$

$$x_P^{(0)} - x_P + \tau(k_1 x_A - k_2 x_P) = 0 \quad (\text{II, 160})$$

$$x_Q^{(0)} - x_Q + \tau k_3 x_A = 0 \quad (\text{II, 161})$$

Решением данной системы будут выражения:

$$x_A = \frac{x_A^{(0)}}{1 + \tau(k_1 + k_3)} \quad (\text{II, 162})$$

$$x_P = \frac{\tau k_1 x_A^{(0)} + [1 + \tau(k_1 + k_3)] x_P^{(0)}}{[1 + \tau(k_1 + k_3)](1 + \tau k_2)} \quad (\text{II, 163})$$

$$x_Q = x_Q^{(0)} + x_A^{(0)} \frac{\tau k_3}{1 + \tau(k_1 + k_3)} \quad (\text{II, 164})$$

Для $x_P^{(0)} = 0$ формула (II, 163) упрощается:

$$x_P = x_A^{(0)} \frac{\tau k_1}{[1 + \tau(k_1 + k_3)](1 + \tau k_2)} \quad (\text{II, 165})$$

Сравнение уравнений (II, 162) и (II, 165) с выражениями (II, 142) и (II, 144) для последовательных реакций показывает справедливость аналогичных зависимостей с той разницей, что при оптимальном времени пребывания достигается несколько меньшее значение концентрации продукта P на выходе аппарата из-за побочной реакции, которая сопровождается образованием продукта Q .

Приведенные выше уравнения, характеризующие стационарный режим работы реактора идеального смешения, могут быть использованы и для описания каскада таких реакторов:

$$x_{i-1}^{(k-1)} - x_i^{(k)} + \tau_k w_i^{(k)} = 0 \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{II, 166})$$

$$T^{(k-1)} - T^{(k)} + \tau_k \frac{Q_r^{(k)}}{c_P} - \frac{k_T^{(k)} F^{(k)}}{v c_P} (T^{(k)} - T_x^{(k)}) = 0 \quad (\text{II, 167})$$

Точно так же, т. е. добавляя еще один индекс к обозначениям переменных в выражениях (II, 105) и (II, 106), можно вывести уравнения, характеризующие нестационарные режимы каскада реакторов.

Реактор идеального вытеснения. Математическое описание этого реактора можно получить из общих уравнений гидродинамики потока для случая идеального вытеснения (II, 15) и (II, 21), если подставить в них соответствующие выражения для интенсивностей источников массы и тепла. Интенсивность указанных источников, как и для рассмотренного реактора идеального смешения, определяется скоростью химической реакции и теплопередачей.

Полагая, что при химическом превращении число молей реагирующих веществ не изменяется, найдем следующие уравнения для ключевых компонентов при стационарном режиме работы реактора:

$$v \frac{dx_i}{dl} = S_R w_i \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{II, 168})$$

При наличии теплового эффекта реакции и теплообмена с внешним теплоносителем система уравнений (II, 168) должна быть дополнена выражением, характеризующим изменение температуры по длине аппарата:

$$v c_P \frac{dT}{dl} = S_R Q_r - \frac{K_T F}{l_s} (T - T_x) \quad (\text{II, 169})$$

Заметим, что система уравнений для каскада реакторов идеального смешения (II, 166) и (II, 167) по существу является конечноразностным представлением системы дифференциальных уравнений (II, 168) и (II, 169).

Введением новой независимой переменной, согласно выражению

$$t = \frac{Sl}{v} \quad (\text{II, 170})$$

система уравнений (II, 168) и (II, 169) может быть записана в виде:

$$\frac{dx_i}{dt} = w_i \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{II, 171})$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{Q_r}{c_p} - \frac{K_T F}{V_i c_p} (T - T_x) \quad (\text{II, 172})$$

Переменная t имеет размерность времени и обозначает время пребывания элементарного объема реагирующей смеси в зоне реакции. Поэтому систему уравнений (II, 171) и (II, 172) можно рассматривать также как математическое описание реактора идеального смешения периодического действия, в котором процесс проводят до определенного момента времени при отсутствии поддачи исходных реагентов в аппарат и без отвода из него продуктов реакции.

Решение системы уравнений (II, 171) и (II, 172) может быть найдено аналитически только для некоторых простейших типов реакций, проводимых в изотермических условиях. Как правило, для решения задачи моделирования в общем случае неизотермических условий и нелинейной зависимости скоростей образования продуктов реакции от концентраций реагентов приходится применять аналоговые и цифровые вычислительные машины.

Ниже рассмотрен ряд примеров изотермических реакторов, когда уравнения математического описания допускают аналитическое решение.

Пример II-7. Для реакции, приведенной в примере II-1, определить состав смеси на выходе изотермического реактора идеального вытеснения.

Решение. Единственное уравнение математического описания, которое необходимо использовать при этом, имеет вид:

$$\frac{dx_A}{d\tau} = -kx_A \quad (\text{II, 173})$$

и должно интегрироваться с граничным условием:

$$x_A|_{\tau=0} = x_A^{(0)} \quad (\text{II, 174})$$

Выполняя интегрирование, получим известное выражение для кинетической кривой реакции первого порядка (рис. II-28):

$$x_A(\tau) = x_A^{(0)} \exp(-k\tau) \quad (\text{II, 175})$$

Пример II-8. Для реакции, рассмотренной в примере II-3, найти состав смеси на выходе изотермического реактора идеального вытеснения.

Решение. Математическое описание реактора в данном случае представляется системой уравнений:

$$\frac{dx_A}{d\tau} = -(k_1 + k_2) x_A \quad \frac{dx_P}{d\tau} = k_1 x_A \quad (\text{II, 176})$$

интегрирование которой при граничных условиях

$$x_A|_{\tau=0} = x_A^{(0)} \quad x_P|_{\tau=0} = 0 \quad (\text{II, 177})$$

позволяет найти:

$$x_A(\tau) = x_A^{(0)} \exp [-(k_1 + k_2) \tau] \quad (\text{II, 178})$$

$$x_P(\tau) = x_A^{(0)} \frac{k_1}{k_1 + k_2} \{1 - \exp [-(k_1 + k_2) \tau]\} \quad (\text{II, 179})$$

На рис. II-29 показано изменение концентраций по длине реактора для этого случая.

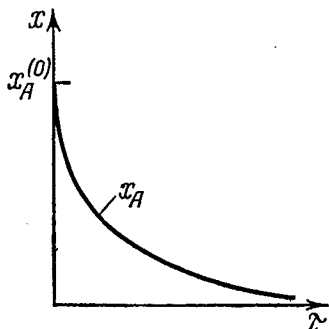


Рис. II-28. Изменение концентрации исходного продукта A по длине реактора идеального вытеснения для реакции $A \rightarrow P$.

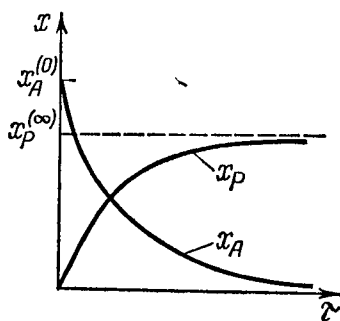


Рис. II-29. Изменение концентраций по длине реактора идеального вытеснения для реакции $A \xrightarrow{P} S$.

Пример II-9. Для последовательной реакции, приведенной в примере II-4, определить состав смеси на выходе изотермического реактора идеального вытеснения.

Решение. Система уравнений математического описания имеет вид:

$$\frac{dx_A}{d\tau} = -k_1 x_A \quad (\text{II, 180})$$

$$\frac{dx_P}{d\tau} = k_1 x_A - k_2 x_P \quad (\text{II, 181})$$

Интегрирование данной системы при граничных условиях

$$x_A|_{\tau=0} = x_A^{(0)} \quad x_P|_{\tau=0} = 0 \quad (\text{II, 182})$$

приводит к выражениям:

$$x_A(\tau) = x_A^{(0)} \exp (-k_1 \tau) \quad (\text{II, 183})$$

$$x_P(\tau) = x_A^{(0)} \frac{k_1}{k_2 - k_1} [\exp (-k_1 \tau) - \exp (-k_2 \tau)] \quad (\text{II, 184})$$

Уравнение (II, 184) характеризует изменение концентрации продукта P по длине реактора при любых значениях констант скоростей k_1 и k_2 , за исключением случая, когда $k_1 = k_2 = k$ и выражение (II, 184) обращается в неопределенность типа $0/0$. Воспользовавшись правилом Лопиталя [13] для раскрытия неопределенности при $k_2 \rightarrow k_1 = k$, найдем:

$$x_P(\tau) = x_A^{(0)} \tau k \exp(-k\tau) \quad (\text{II, 185})$$

Полученные зависимости концентраций от длины аппарата показаны на рис. II-30, откуда следует, что при определенной длине реактора идеального вытеснения на выходе его достигается максимальная концентрация продукта реакции P .

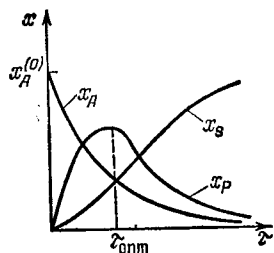


Рис. II-30. Изменение концентраций по длине реактора идеального вытеснения для реакции $A \rightarrow P \rightarrow S$.

Проблемы создания математических моделей для процессов химической технологии несомненно являются наиболее важными при постановке задач оптимизации указанных процессов. Современный уровень теории оптимальных процессов и возможности математики, вооруженной средствами вычислительной техники, позволяют решать большинство возникающих в практике оптимальных задач. Поэтому широкое распространение методов оптимизации по существу невысказано без детальной проработки вопросов математического моделирования существующих и на этой основе вновь проектируемых процессов.

Рассмотренные выше примеры математических моделей химико-технологических процессов при сильно упрощенных условиях их проведения, естественно, иллюстрируют лишь незначительную часть всего многообразия процессов химической технологии и не имеют целью охватить все стороны проблемы математического моделирования. Вместе с тем следует еще раз подчеркнуть, что успешное решение задачи построения в достаточной мере адекватных математических моделей определяет и успешное применение методов оптимизации, от которых при этом можно ожидать реального экономического эффекта.

В последнее время значительное внимание уделяется практическим вопросам математического моделирования химико-технологических процессов и систематизации используемых математических моделей [6]. Дальнейшие работы в этом направлении несомненно приведут к более широкому применению методов оптимизации в задачах управления и проектирования, а также при создании современных систем автоматизированного проектирования.

ЛИТЕРАТУРА

1. Кафаров В. В., Перов В. Л., Плюто В. П. Хим. пром., 1964, № 3, с. 218—221.
2. Демидович Б. П., Марон И. А. Основы вычислительной математики. М., Физматгиз, 1963. 659 с.
3. Хемминг Р. В. Численные методы. Пер. с англ. М., «Наука», 1968. 400 с.
4. Ланс Д. Н. Численные методы для быстродействующих вычислительных машин. Пер. с англ. М., Издательство, 1962. 204 с.
5. Платонов В. М., Берго Б. Г. Разделение многокомпонентных смесей. М., «Химия», 1965. 368 с.
6. Альбом математических описаний и алгоритмов управления типовыми процессами химической технологии. Вып. 1—2. М., НИИТЭхим, 1965—1967.
7. Вэйлас С. Химическая кинетика и расчеты промышленных реакторов. Пер. с англ. Изд. 2-е. М., «Химия», 1967. 414 с.
8. Кутателадзе С. С., Боришанский В. М. Справочник по теплопередаче. М., Госэнергоиздат, 1959. 415 с.
9. Степанов В. В. Курс дифференциальных уравнений. М., Гостехтеоретиздат, 1960. 468 с.
10. Кафаров В. В. Основы массопередачи. М., «Высшая школа», 1962. 654 с.
11. Крамерс Х., Вестертеп К. Химические реакторы. Расчет и управление ими. Пер. с англ. М., «Химия», 1967. 264 с.
12. Пшежецкий С. Я., Рубинштейн Р. Н. ЖФХ, 1947, т. 21, с. 659.
13. Смирнов В. И. Курс высшей математики. Т. 1. М., Физматгиз, 1958, 478 с.
14. Холланд Ч. Д. Многокомпонентная ректификация. Пер. с англ. М., «Химия», 1969. 347 с.

МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ФУНКЦИЙ КЛАССИЧЕСКОГО АНАЛИЗА

Выше уже неоднократно отмечалось, что математическая формулировка оптимальной задачи часто эквивалентна задаче отыскания экстремума функции одной или многих переменных. Поэтому для решения таких оптимальных задач могут быть использованы различные методы исследования функций классического анализа и главным образом методы поиска экстремума.

Настоящая глава посвящена рассмотрению практических примеров применения методов классического анализа для решения задач выбора аппаратурного оформления и определения оптимальных условий для некоторых химико-технологических процессов. Как правило, разбираются задачи, в которых возможно получение более или менее законченного аналитического решения, представляющего в ряде случаев самостоятельный практический интерес для инженеров-технологов.

Из аналитических методов внимание в основном уделено методам отыскания *безусловных экстремумов*. Задачи с ограничениями на независимые переменные и сводящиеся к ним, для решения которых используют множители Лагранжа, приведены в следующей главе.

1. ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ

Методы исследования функций классического анализа в основном применяют в тех случаях, когда известен аналитический вид зависимости оптимизируемой функции R от независимых переменных x_i . Это позволяет найти также в аналитическом виде производные оптимизируемой функции, используя которые и формулируют необходимые и достаточные условия существования экстремума.

Экстремумы функций одной переменной

Необходимые условия существования экстремума у непрерывной функции $R(x)$ при отсутствии ограничений на диапазон изменения переменной x могут быть получены из анализа первой производной dR/dx . При этом *функция $R(x)$ может иметь экстремальные значения при таких значениях независимой переменной x или, что то же самое, в тех точках оси x , где производная*

dR/dx равна нулю либо вообще не существует. Графически равенство нулю производной означает, что касательная к кривой $R(x)$ в этой точке параллельна оси абсцисс (рис. III-1, а). На рис. III-1, б и III-1, в показаны случаи, когда производные в точках экстремума функции $R(x)$ не существуют. Так, на рис. III-1, б изображена непрерывная функция $R(x)$, которая в точках x_1 и x_2 имеет изломы, что соответствует наличию конечного разрыва

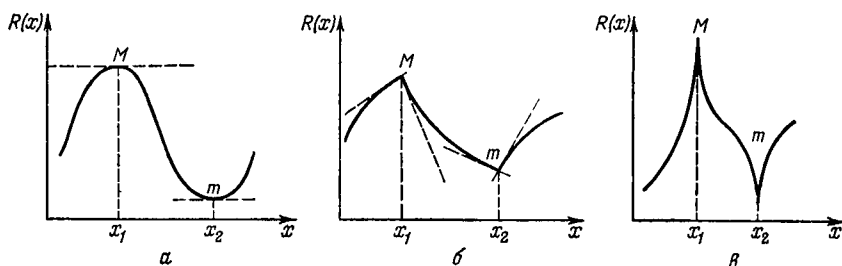


Рис. III-1. Различные типы экстремумов функции $R(x)$.

у производной dR/dx в этих точках. При этом, очевидно, вычисляемое значение производной зависит от того, с какой стороны от экстремальной точки будет производиться вычисление. В таких случаях принято говорить о существовании различных значений производных слева и справа от точки экстремума. На рис. III-1, в

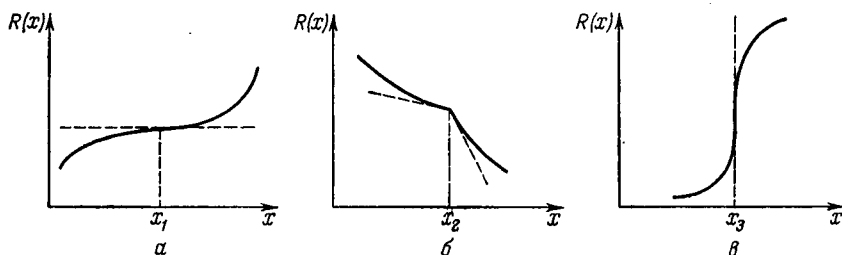


Рис. III-2. Особенности функции $R(x)$, удовлетворяющие необходимым условиям экстремума.

показан также вариант, когда значение производной в точках экстремума обращается в бесконечность. Здесь происходит бесконечный разрыв производной, при котором ее значение изменяется от $+\infty$ до $-\infty$ в точке x_1 и от $-\infty$ до $+\infty$ в точке x_2 .

Перечисленные условия, т. е. равенство нулю или отсутствие производной, являются, как уже отмечалось выше, только необходимыми условиями экстремума. Их выполнение еще не означает, что в данной точке функция имеет экстремум (рис. III-2). Для того чтобы определить, действительно ли в указанной точке существует экстремум или же при этом справедлив один из

случаев, представленных на рис. III-2, необходимо провести дополнительное исследование, для чего может быть использован один из способов, приведенных ниже.

Сравнение значений функции. Этот способ сводится к тому, что с значением функции в точке x_k , «подозреваемой» на экстремум, сравнивают два ее значения, рассчитанные в точках, достаточно близких к исследуемой и расположенных слева и справа от нее, т. е. при значениях переменной $x_k - \varepsilon$ и $x_k + \varepsilon$, где ε — малая положительная величина (рис. III-3). Если при этом окажется, что оба рассчитанных значения $R(x_k - \varepsilon)$ и $R(x_k + \varepsilon)$ меньше или больше $R(x_k)$, то в точке x_k существует максимум или минимум соответственно (рис. III-3, а и III-3, б). Если же $R(x_k)$ имеет про-

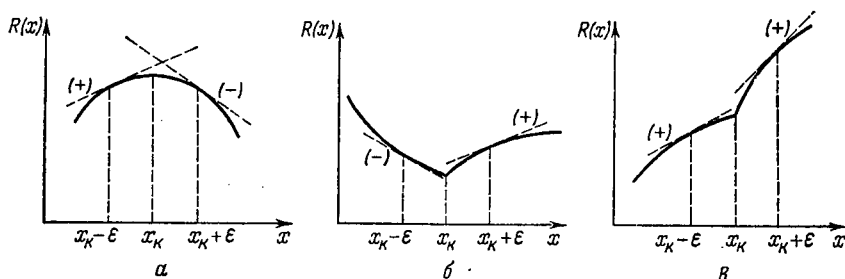


Рис. III-3. Проверка точки, в которой выполняются необходимые условия экстремума.

межуточное значение между $R(x_k - \varepsilon)$ и $R(x_k + \varepsilon)$, то в точке x_k функция $R(x)$ не обладает ни максимумом, ни минимумом (рис. III-3, в).

Сравнение знаков производных. При этом способе исследования точки x_k , «подозреваемой» на экстремум, в точках $x_k - \varepsilon$ и $x_k + \varepsilon$ определяется знак производной dR/dx . Если знаки производной в этих точках различны, то в точке x_k имеется экстремум функции $R(x)$. Тип экстремума может быть найден по изменению знака производной при переходе от точки $x_k - \varepsilon$ к точке $x_k + \varepsilon$. Если знак производной при таком переходе изменяется с (+) на (—), то в точке x_k — максимум (рис. III-3, а), если наоборот — с (—) на (+), то минимум (рис. III-3, б). Если же знаки производной в точках $x_k - \varepsilon$ и $x_k + \varepsilon$ совпадают, то в точке x_k нет ни максимума, ни минимума, т. е. она не является экстремальной (рис. III-3, в).

Исследование знаков высших производных. Этот способ можно применять в тех случаях, когда в точке, «подозреваемой» на экстремум, существуют производные высших порядков, т. е. функция $R(x)$ не только сама непрерывна, но имеет также непрерывные производные dR/dx и d^2R/dx^2 , а в некоторых случаях и более высокого порядка. Способ сводится к следующему. В точке x_k , «по-

дозреваемой» на экстремум, для которой справедливо

$$\left. \frac{dR(x)}{dx} \right|_{x=x_k} = 0 \quad (\text{III, 1})$$

вычисляется значение производной d^2R/dx^2 . Если при этом $d^2R/dx^2|_{x=x_k} < 0$, то в точке x_k — максимум, если $d^2R/dx^2|_{x=x_k} > 0$, то минимум. Эти два случая изображены на рис. III-4, а и III-4, б соответственно. На тех же рисунках показаны графики для производных dR/dx и d^2R/dx^2 . Очевидно, что отрицательность производной $d^2R/dx^2|_{x=x_k}$ означает, что в точке x_k знак первой производной dR/dx изменяется с (+) на (—), так как в этом случае при

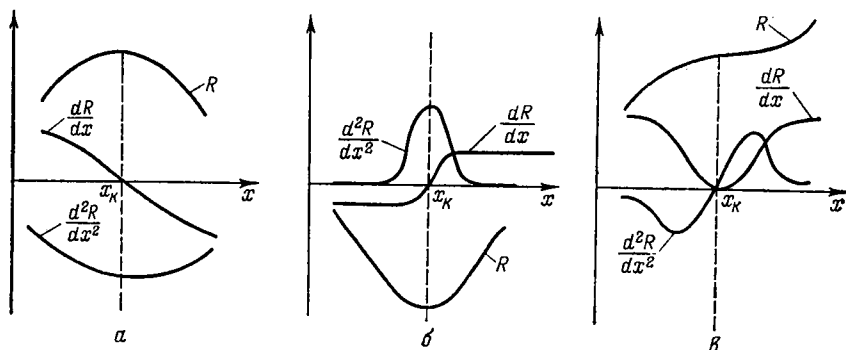


Рис. III-4. Проверка точки на экстремум с использованием высших производных.

увеличении x производная dR/dx убывает, проходя в точке x_k через нулевое значение, и наоборот.

Если же вторая производная в точке x_k также равна нулю, то для дальнейшего исследования необходимо вычисление следующей производной d^3R/dx^3 . Причем, когда $d^3R/dx^3|_{x=x_k} \neq 0$, точка x_k не является точкой экстремума (рис. III-4, в). Если же в этой точке $d^3R/dx^3|_{x=x_k} = 0$, то вычисляют следующую производную d^4R/dx^4 и т. д. При этом нужно руководствоваться таким правилом.

Когда порядок первой, не обращающейся в нуль производной в точке x_k для которой $dR/dx|_{x=x_k} = 0$ нечетный, то в этой точке функция $R(x)$ не имеет ни максимума, ни минимума, т. е. точка x_k не является точкой экстремума функции $R(x)$. Если же порядок первой, не обращающейся в нуль производной в точке x_k четный, то в данной точке есть экстремум функции $R(x)$, который будет максимумом или минимумом в зависимости от того, отрицательна или положительна эта производная.

Способ исследования знаков высших производных может потребовать выполнения довольно громоздких вычислений для

определения в аналитическом виде производных высших порядков. Поэтому иногда значительно проще воспользоваться одним из приведенных выше первых двух способов.

При решении практических задач оптимизации обычно требуется отыскать не какой-нибудь экстремум (максимум или минимум) функции $R(x)$, а наибольшее или наименьшее значение этой функции. Точки наибольшего или наименьшего значения функции $R(x)$ обычно называют глобальными экстремумами в отличие от остальных экстремумов, которые в подобных случаях называются локальными.

Для решения оптимальной задачи необходимо, во-первых, найти все точки функции $R(x)$, в которых может быть экстремум, во-вторых, исследовать все эти точки на экстремум и, наконец, в-третьих, среди локальных экстремумов нужного типа (максимум

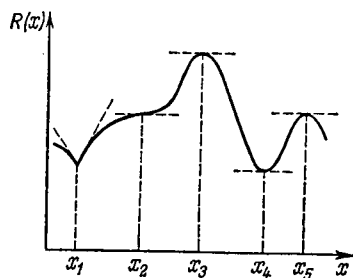


Рис. III-5. Глобальные и локальные экстремумы.

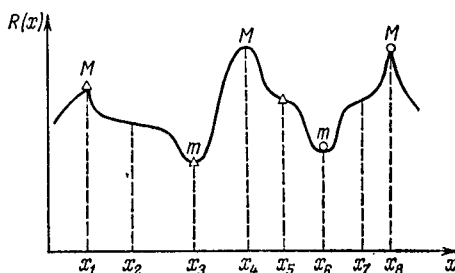


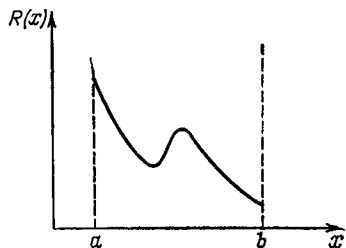
Рис. III-6. Поиск глобального экстремума.

или минимум) найти глобальный. Подобный случай представлен на рис. III-5, где функция $R(x)$ имеет пять точек, «подозреваемых» на экстремум, из которых лишь четыре являются точками экстремумов. Если число «подозрительных» точек у оптимизируемой функции велико, то может потребоваться весьма большой объем вычислений для проверки условий экстремальности. При этом оказывается полезным следующее правило, позволяющее уменьшить число проверяемых точек. Для непрерывных функций одной переменной максимумы и минимумы чередуются между собой; между двумя соседними максимумами расположен один минимум, а между двумя соседними минимумами — один максимум. При использовании этого правила достаточно «подозрительные» точки проверять через одну (рис. III-6), что позволяет установить вид всех экстремальных точек функции $R(x)$.

Порядок рассуждений для функции $R(x)$, представленной на рис. III-6, следующий. Так как в точке x_1 — максимум, а в точке x_3 — минимум, то в точке x_2 экстремума нет. В точке x_5 нет ни максимума, ни минимума, поэтому дальнейшую проверку продолжаем с точки x_6 , в которой оказывается минимум. Следовательно, в пропущенной точке x_4 может быть только максимум, по-

сколько два минимума не могут следовать подряд. В точке x_8 снова оказывается максимум, и, значит, в точке x_7 нет ни максимума, ни минимума. Таким образом, общее число проверенных точек в данном случае составило пять точек из восьми, подлежащих проверке. Правда, при таком способе проверки еще нельзя найти глобальный экстремум, так как величины пропущенных экстремумов остаются неопределенными, если не были вычислены предварительно. Однако уже одно то, что при использовании этого правила дополнительные вычисления требуются только для экстремумов определенного типа, оправдывает его применение.

Рис. III-7. Глобальные экстремумы на границах интервала изменения независимой переменной.



В практических задачах оптимизации диапазон изменения независимой переменной часто бывает ограничен заданным интервалом $[a, b]$. Приведенную же выше методику поиска экстремальных точек, основанную на анализе первой производной оптимизируемой функции, можно использовать лишь для внутренних точек интервала $[a, b]$. Поэтому в число «подозрительных» точек должны быть включены также и крайние точки интервала $[a, b]$, т. е. точки a и b , в которых может иногда достигаться глобальный экстремум функции $R(x)$ (рис. III-7).

Экстремумы функций многих переменных

Решение задачи оптимизации существенно усложняется, когда критерий оптимальности является функцией нескольких независимых переменных даже при известном аналитическом выражении этой функции. Наибольшие трудности возникают при отсутствии непрерывности у всех или некоторых производных оптимизируемой функции. В последнем случае для решения оптимальной задачи целесообразно использовать методы нелинейного программирования (см. главу IX).

Ниже рассмотрены необходимые и достаточные условия лишь для непрерывных функций, имеющих к тому же непрерывные производные первого и второго порядков.

Для непрерывной функции многих переменных

$$R = R(x_1, x_2, \dots, x_n) \quad (\text{III}, 2)$$

имеющей непрерывные производные первого и второго порядков по всем переменным x_i ($i = 1, \dots, n$), необходимым условием

экстремума в точке $x_i^{(k)}$ ($i = 1, \dots, n$) служит равенство нулю в этой точке первых производных по всем переменным. Другими словами, точки, в которых возможен экстремум функции (III, 2), могут быть определены решением системы уравнений:

$$\frac{\partial R(x_1, x_2, \dots, x_n)}{\partial x_i} = 0 \quad i = 1, \dots, n \quad (\text{III}, 3)$$

Для того чтобы проверить, действительно ли точка $x_i^{(k)}$ ($i = 1, \dots, n$), координаты которой удовлетворяют системе уравнений (III, 3), является точкой экстремума функции (III, 2), уже недостаточно проверки экстремальности по всем переменным в отдельности.

В качестве примера рассмотрим задачу отыскания экстремума функции двух переменных:

$$R = 4 - [0,5x_1^2 - 3x_1x_2 + 0,5x_2^2 + \sqrt{2}(x_1 + x_2)] \quad (\text{III}, 4)$$

Система уравнений (III, 3) при этом имеет вид:

$$-x_1 + 3x_2 - \sqrt{2} = 0 \quad 3x_1 - x_2 - \sqrt{2} = 0 \quad (\text{a})$$

Решением ее являются значения:

$$x_1 = 0,5\sqrt{2} \quad x_2 = 0,5\sqrt{2} \quad (\text{б})$$

Точка с координатами (б) является точкой, в которой может быть экстремум. Вычисление вторых производных по каждой из переменных в этом случае дает:

$$\frac{\partial^2 R}{\partial x_2^2} = -1 \quad \frac{\partial^2 R}{\partial x_1^2} = -1 \quad (\text{в})$$

Из соотношений (в) следует, что по каждой из переменных x_1 и x_2 в точке (б) функция (III, 4) принимает максимальное значение. Однако можно показать, что точка с координатами (б) в действительности не является точкой экстремума. Наиболее наглядно это доказывается поворотом осей координат на угол 45° . В данном случае для новых координат будут справедливы следующие формулы преобразования [1]:

$$\left. \begin{aligned} x_1 &= x'_1 \cos \varphi - x'_2 \sin \varphi \\ x_2 &= x'_1 \sin \varphi - x'_2 \cos \varphi \end{aligned} \right\} \quad (\text{г})$$

Подставляя выражения (г) в соотношение (III, 4) с учетом того, что

$$\sin 45^\circ = \cos 45^\circ = \frac{\sqrt{2}}{2}$$

найдем

$$R = 3 + (x'_1 - 1)^2 - 2(x'_2)^2 \quad (\text{III}, 5)$$

Очевидно, что при вращении системы координат экстремальные свойства функции $R(x_1, x_2)$ не нарушаются. Поэтому, вычисляя производные от функции (III, 5) по обеим переменным и приравнявая их нулю, получим систему уравнений

$$2(x'_1 - 1) = 0 \quad -4x'_2 = 0 \quad (\text{д})$$

решение которой определяет положение точки, «подозреваемой» на экстремум в новой системе координат:

$$x'_1 = 1 \quad x'_2 = 0 \quad (e)$$

Вычисление вторых производных по каждой из координат в новой системе теперь дает:

$$\frac{\partial^2 R}{\partial (x'_1)^2} = 2 \quad \frac{\partial^2 R}{\partial (x'_2)^2} = -4 \quad (ж)$$

Из уравнений (ж) следует, что изучаемая точка не является экстремальной, так как по переменной x'_1 функция (III, 5) имеет минимум, а по переменной x'_2 — максимум. Нетрудно представить вид поверхности, описываемой выражениями (III, 4) или (III, 5). Она представляет собой «седло» (рис. III-8), имеющее точку, в которой первые производные функции по обоим переменным обращаются в нуль.

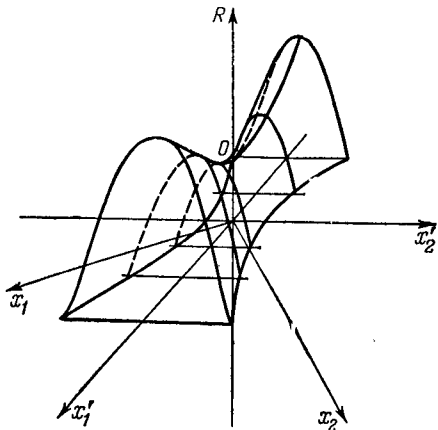


Рис. III-8. „Седловая“ точка функции двух переменных.

Разумеется, что использованная процедура поворота осей координат в общем случае непригодна для практического исследования точек, подозреваемых на экстремум. В особенности это относится к задачам, в которых число независимых переменных велико. Поэтому необходимо применять более строгие и общие методы.

Предположим, что исследуется на экстремум точка с координатами:

$$x^{(k)} = (x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)}) \quad (III, 6)$$

удовлетворяющими системе уравнений (III, 3).

Разложим функцию

$$R(x) = R(x_1, x_2, \dots, x_n) \quad (III, 7)$$

в окрестности точки (III, 6) в ряд Тейлора по степеням приращений переменных

$$\delta x_i = x_i - x_i^{(k)} \quad (III, 8)$$

Тогда получим:

$$\begin{aligned} R(x) = R(x^{(k)}) + \sum_{i=1}^n \frac{\partial R(x^{(k)})}{\partial x_i} \delta x_i + \frac{1}{2} \left[\sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} \delta x_i \right]^2 R(x^{(k)}) + \\ + \frac{1}{6} \left[\sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} \delta x_i \right]^3 R(x^{(k)}) + \dots \end{aligned} \quad (III, 9)$$

В записи выражения (III, 9) использована сокращенная форма представления членов разложения с производными выше первого порядка. Например, для функции двух переменных член

$$\left[\sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} \delta x_i \right]^2 R(x^{(k)})$$

раскрывается как

$$\begin{aligned} \left[\sum_{i=1}^2 \frac{\partial}{\partial x_i} \delta x_i \right]^2 R(x^{(k)}) &= \left[\frac{\partial}{\partial x_1} \delta x_1 + \frac{\partial}{\partial x_2} \delta x_2 \right]^2 R(x^{(k)}) = \\ &= \left[\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} \delta x_1^2 + 2 \frac{\partial^2}{\partial x_1 \partial x_2} \delta x_1 \delta x_2 + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \delta x_2^2 \right] R(x^{(k)}) = \\ &= \frac{\partial^2 R(x^{(k)})}{\partial x_1^2} \delta x_1^2 + 2 \frac{\partial^2 R(x^{(k)})}{\partial x_1 \partial x_2} \delta x_1 \delta x_2 + \frac{\partial^2 R(x^{(k)})}{\partial x_2^2} \delta x_2^2 \end{aligned} \quad (\text{III, 10})$$

Аналогично раскрываются и члены более высокого порядка при большем числе независимых переменных.

Опуская в разложении (III, 9) члены, имеющие порядок малости по δx_i выше второго, и принимая во внимание, что члены первого порядка малости по δx_i обращаются в нуль, поскольку координаты точки $x^{(k)}$ удовлетворяют системе (III, 3), получим следующее приближенное равенство:

$$\delta R = R(x) - R(x^{(k)}) \approx \frac{1}{2} \left[\sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} \delta x_i \right]^2 R(x^{(k)}) \quad (\text{III, 11})$$

Из выражения (III, 11) следует, что знак приращения функции δR в достаточно малой окрестности точки $x^{(k)}$ определяется производными второго порядка от $R(x)$ по всем переменным, включая и смешанные производные. Для того чтобы точка $x^{(k)}$ являлась точкой экстремума функции $R(x)$, достаточно при любых малых приращениях независимых переменных δx_i правой части выражения (III, 11) оставаться положительной для точки минимума и отрицательной для максимума.

Поскольку вторые производные в выражении (III, 11) вычисляются в точке $x^{(k)}$, они могут рассматриваться как постоянные числа. В этом случае для анализа знака правой части выражения (III, 11) не обязательно требовать малости величин δx_i . Таким образом, вопрос о знаке приращения функции ΔR может решаться анализом знака квадратичной формы

$$U = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij} z_i z_j \quad (\text{III, 12})$$

коэффициенты которой связаны с производными в правой части выражения (III, 11) соотношениями

$$a_{ij} = \frac{\partial^2 R(x^{(k)})}{\partial x_i \partial x_j} = \frac{\partial^2 R(x^{(k)})}{\partial x_j \partial x_i} = a_{ji} \quad i, j = 1, \dots, n \quad (\text{III, 13})$$

Квадратичная форма называется положительно определенной, если для любых значений z_p она сохраняет положительное значение, за исключением точки $z_p = 0$ ($p = 1, \dots, n$), в которой она обращается в нуль. Для того чтобы найти, является ли данная квадратичная форма положительно определенной, можно воспользоваться теоремой [2], которая формулируется следующим образом. Для положительной определенности квадратичной формы (III, 12) необходимо и достаточно, чтобы были выполнены условия Сильвестра:

$$\left. \begin{aligned} \Delta_1 &= a_{11} > 0; & \Delta_2 &= \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} > 0; \dots \\ \Delta_n &= \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{vmatrix} > 0 \end{aligned} \right\} \quad (\text{III, 14})$$

Условия (III, 14) означают, что квадратичная форма (III, 12) будет положительно определенной в том случае, если все главные миноры (см. Приложение 1) соответствующей ей матрицы

$$[A] = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{vmatrix} \quad (\text{III, 15})$$

составленной из коэффициентов, будут строго положительны.

Таким образом, если решен вопрос о положительной определенности квадратичной формы (III, 12), где коэффициенты рассчитываются по формулам (III, 13), то тем самым решается задача и о типе точки $x^{(h)}$, координаты которой удовлетворяют системе уравнений (III, 3), исследуемой на экстремум.

Так, когда квадратичная форма, соответствующая правой части выражения (III, 11), оказывается положительно определенной, исследуемая точка является точкой минимума.

Если условия положительной определенности не выполняются, но все главные миноры матрицы (III, 15), имеющие нечетный порядок, отрицательны, т. е. для миноров нечетного порядка в неравенствах (III, 14) знак неравенств изменяется на обратный, то квадратичная форма (III, 12) будет отрицательно определенной и, следовательно, функция $R(x)$ в точке $x^{(h)}$ имеет максимум.

Если же условия положительной и отрицательной определенностей квадратичной формы (III, 12) не выполняются, но все главные миноры отличны от нуля, то в исследуемой точке $x^{(h)}$ функция $R(x)$ не имеет ни максимума, ни минимума. При обращении в нуль главных миноров матрицы (III, 15) вопрос о наличии экстремума в исследуемой точке решается сложнее, с использованием производных более высокого порядка.

Рассмотрим некоторые частные случаи достаточных условий экстремума, которые могут быть получены из условий Сильвестра (III, 14).

Случай двух переменных. Достаточным условием минимума является положительность главных миноров первого и второго порядков, что, принимая во внимание соотношения (III, 13), дает два условия относительно значений вторых производных функции $R(x)$:

$$\frac{\partial^2 R(x^{(k)})}{\partial x_1^2} > 0 \quad (\text{III, 16})$$

$$\frac{\partial^2 R(x^{(k)})}{\partial x_1^2} \cdot \frac{\partial^2 R(x^{(k)})}{\partial x_2^2} - \left(\frac{\partial^2 R(x^{(k)})}{\partial x_1 \partial x_2} \right)^2 > 0 \quad (\text{III, 17})$$

Достаточным условием максимума в точке $x^{(k)}$ является выполнение условия (III, 17), т. е. положительность четного минора, и одновременное выполнение условия отрицательности первого (нечетного) минора:

$$\frac{\partial^2 R(x^{(k)})}{\partial x_1^2} < 0 \quad (\text{III, 18})$$

Проверим выполнение полученных условий для функции (III, 4), для чего необходимо в дополнение к производным (в) вычислить значение смешанной производной, которое при этом будет равно:

$$\frac{\partial^2 R(x^{(k)})}{\partial x_1 \partial x_2} = 3 \quad (\text{и})$$

Подставляя в соотношение (III, 17), которое должно выполняться для экстремальной точки любого типа, значения производных из выражений (в) и (и), получим, что это условие не выполняется. Следовательно, функция $R(x_1, x_2)$, определяемая выражением (III, 4), в точке с координатами (б) не имеет экстремума, что и было получено ранее с использованием вращения осей координат.

Случай трех переменных. О наличии или отсутствии экстремума в точке, для которой первые производные по всем переменным обращаются в нуль, можно в этом случае судить по знакам трех главных миноров:

$$\Delta_1 = a_{11} \quad (\text{III, 19})$$

$$\Delta_2 = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} = a_{11}a_{22} - a_{12}^2 \quad (\text{III, 20})$$

$$\Delta_3 = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} = (a_{11}a_{22} - a_{12}^2)a_{33} - a_{13}^2a_{22} - a_{23}^2a_{11} + 2a_{12}a_{13}a_{23} \quad (\text{III, 21})$$

При получении развернутых выражений главных миноров (III, 20) и (III, 21) использовалось свойство симметрии матрицы (III, 15), которое следует из определения ее элементов (III, 13), так как для непрерывных функций, имеющих непрерывные производные до второго порядка, справедливо равенство:

$$\frac{\partial R^2(x)}{\partial x_i \partial x_j} = \frac{\partial R^2(x)}{\partial x_j \partial x_i} \quad (\text{III, 22})$$

Достаточным условием минимума для функции трех переменных является положительность всех трех миноров (III, 19)—(III, 21), т. е.

$$\Delta_1 > 0 \quad \Delta_2 > 0 \quad \Delta_3 > 0 \quad (\text{III, 23})$$

Достаточным условием максимума служит положительность четных миноров (III, 20) и отрицательность нечетных миноров (III, 19) и (III, 21), т. е.

$$\Delta_1 < 0 \quad \Delta_2 > 0 \quad \Delta_3 < 0 \quad (\text{III}, 24)$$

Аналогичным образом могут быть получены достаточные условия и при большем числе переменных.

2. ПРИМЕРЫ ЗАДАЧ ОПТИМИЗАЦИИ ТЕПЛООБМЕННЫХ АППАРАТОВ

Основным вопросом, который приходится рассматривать при проектировании теплообменных аппаратов, является выбор поверхности теплообмена F и соответствующей ей нагрузки по хладагенту v_x для заданной тепловой нагрузки на теплообменник Q . В связи с этим для экономической оценки эффективности теплообменника заданной конструкции может быть использован критерий оптимальности, объединяющий параметры F и v_x , который может быть записан в виде соотношения:

$$R = s_x v_x + s_F F \quad (\text{III}, 25)$$

в котором s_x — стоимость единицы объема хладагента; s_F — стоимость единицы поверхности теплообмена, исчисляемая с учетом амортизации теплообменника.

Критерий (III, 25) представляет собой суммарные затраты на эксплуатацию теплообменника в единицу времени. Естественно, что связь этих затрат с величиной поверхности теплообмена имеет значительно более сложный характер, однако в первом приближении ее все же можно применить в форме выражения (III, 25) для иллюстрации общей методики оптимизации теплообменных аппаратов.

Чтобы получить возможность использовать критерий оптимальности (III, 25) для выбора оптимальной поверхности теплообмена $F_{\text{опт}}$ и оптимального расхода хладагента $v_{x, \text{опт}}$, необходимо найти связь между F и v_x , которую дают уравнения математического описания теплообменника. Разумеется, что на выбор оптимальных значений F и v_x при этом оказывает влияние тип применяемого теплообменного аппарата. Поэтому при решении задачи оптимального проектирования нужно также рассмотреть возможные варианты реализации теплообмена, т. е. по существу оценить экономическую эффективность от использования того или иного варианта теплообменника.

Выше было показано (см. главу II), что для различных теплообменников может быть получена зависимость поверхности теплообмена F от расхода хладагента v_x для заданной тепловой нагрузки на теплообменник, характеризующейся параметрами теплоносителя — температурой, теплоемкостью и расходом, т. е.

$$F = F(v_x) \quad (\text{III}, 26)$$

Воспользовавшись данной зависимостью в общем виде, из выражения (III, 25) можно определить необходимые условия

оптимальности. Для этого продифференцируем критерий (III, 25) по v_x и приравняем полученное выражение нулю. В результате находим уравнение

$$s_x + s_F \frac{dF}{dv_x} = 0 \quad (\text{III, 27})$$

которому должны удовлетворять оптимальные значения F и v_x .

Поскольку в данном случае используется зависимость (III, 26), фактически определению подлежит лишь значение $v_{x, \text{опт}}$, применяемое затем для расчета оптимальной поверхности теплообмена по формуле (III, 26).

Рассмотрим некоторые частные задачи оптимизации теплообменников, математические описания которых приведены выше (см. стр. 65).

Теплообменник типа «смешение — смешение» (рис. II-15). Для теплообменника этого типа была получена зависимость поверхности теплообмена от нагрузки по хладагенту в форме выражения (II, 38). В результате дифференцирования этого выражения по расходу хладагента находим:

$$\frac{dF}{dv_x} = -\frac{c_{Px}}{K_T} \frac{1}{\left(v \frac{v_x c_{Px}}{v c_P} - 1\right)^2} \quad (\text{III, 28})$$

Подстановка выражения (III, 28) в уравнение (III, 27) дает:

$$\left(v \frac{v_x c_{Px}}{v c_P} - 1\right)^2 - \frac{s_F c_{Px}}{s_x K_T} = 0 \quad (\text{III, 29})$$

Уравнение (III, 29) представляет собой условие обращения в нуль производной от критерия оптимальности (III, 25). Решение этого уравнения позволяет получить два значения нагрузки по хладагенту:

$$v_{x1} = \frac{v c_P}{v c_{Px}} \left[1 - \left(\frac{s_F c_{Px}}{s_x K_T} \right)^{0,5} \right] \quad (\text{III, 30})$$

$$v_{x2} = \frac{v c_P}{v c_{Px}} \left[1 + \left(\frac{s_F c_{Px}}{s_x K_T} \right)^{0,5} \right] \quad (\text{III, 31})$$

Кроме того, согласно правилам исследования функции одной переменной (см. стр. 92), оптимальное значение следует искать также в тех точках, где производная от критерия оптимальности не существует. В нашем случае имеется такая точка, в которой производная dF/dv_x не существует и которая соответствует обращению в нуль знаменателя выражения (III, 28):

$$v_{x3} = \frac{v c_P}{v c_{Px}} \quad (\text{III, 32})$$

Таким образом имеется совокупность трех значений v_x (III, 30) — (III, 32), каждое из которых должно быть проверено на экстремум функции R (III, 25). Анализ условий достаточности в данном случае целесообразно провести, исходя из физического смысла решаемой задачи. С этой целью рассмотрим выражение для поверхности теплообмена:

$$F = \frac{v_x c_{Px}}{K_T \left(v \frac{v_x c_{Px}}{v c_P} - 1 \right)} \quad (\text{II, 38})$$

Очевидно, что физический смысл может иметь только положительное значение величины поверхности F . Это соответствует выполнению условия [ср. уравнение (II, 40)]:

$$v_x > \frac{vc_p}{vc_{px}} \quad (III, 33)$$

Условию (III, 33) удовлетворяет лишь значение v_{x1} , определяемое формулой (III, 30). Остается проверить, будет ли при данном значении v_{x1} достигаться минимальное значение критерия оптимальности (III, 25).

Анализ выражения (III, 29) показывает, что при выполнении условия (III, 33) производная dR/dv_x является монотонной возрастающей функцией величины v_x . Следовательно, в точке обращения в нуль эта функция изменяет свой знак с $(-)$ на $(+)$, что позволяет утверждать о наличии минимума

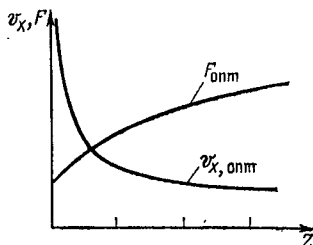


Рис. III-9. Оптимальные значения поверхности теплообмена F и нагрузки по хладагенту v_x для теплообменника типа «смещение — смещение».

функции R при значении v_{x1} , определяемом формулой (III, 30). Тем самым показано, что величина v_{x1} , рассчитываемая по формуле (III, 30), служит решением оптимальной задачи, т. е.

$$v_{x, \text{опт}} = \frac{vc_p}{vc_{px}} \left[1 - \left(\frac{s_F c_{px}}{s_x K_T} \right)^{0.5} \right] \quad (III, 34)$$

Подставляя теперь значение v_x из (III, 34) в соотношение (II, 38), получим соответствующее значение оптимальной поверхности теплообмена:

$$F_{\text{опт}} = \frac{vc_p}{vK_T} \left[1 + \left(\frac{s_x K_T}{s_F c_{px}} \right)^{0.5} \right] \quad (III, 35)$$

Как следует из выражений (III, 34) и (III, 35), оптимальные значения v_x и F зависят от безразмерного комплекса

$$z = \frac{s_x K_T}{s_F c_{px}} \quad (III, 36)$$

в который входят стоимостные коэффициенты критерия оптимальности s_x и s_F . На рис. III-9 показан вид зависимостей (III, 34) и (III, 35), рассматриваемых как функция величины z , для теплообменника типа «смещение — смещение».

Теплообменник типа «смещение — вытеснение» (см. рис. II-16). Зависимость поверхности теплообмена от нагрузки по хладагенту для теплообменника этого типа определяется выражением (II, 48):

$$F = - \frac{v_x c_{px}}{K_T} \ln \left(1 - \frac{1}{v} \cdot \frac{vc_p}{v_x c_{px}} \right) \quad (II, 48)$$

В результате дифференцирования данного выражения по расходу хладагента v_x получим:

$$\frac{dF}{dv_x} = - \frac{c_{px}}{K_T} \left[\ln \left(1 - \frac{1}{v} \cdot \frac{vc_p}{v_x c_{px}} \right) + \frac{1}{\frac{v_x c_{px}}{v} - 1} \right] \quad (III, 37)$$

Подстановка выражения (III, 37) в уравнение (III, 27) дает:

$$\ln \left(1 - \frac{1}{v} \frac{v c_p}{v_x c_{p_x}} \right) + \frac{1}{v \frac{v_x c_{p_x}}{v c_p} - 1} - \frac{s_x K_T}{s_F c_{p_x}} = 0 \quad (\text{III, 38})$$

Полученное уравнение не может быть решено аналитическим путем, однако в данном случае весьма удобно воспользоваться графическим методом. Для этого представим уравнение (III, 38) в виде

$$z = \ln \left(1 - \frac{1}{y} \right) + \frac{1}{y - 1} \quad (\text{III, 39})$$

где z , как и прежде, представляет собой безразмерный комплекс, определяемый выражением (III, 36), а через y обозначено:

$$y = v \frac{v_x c_{p_x}}{v c_p} \quad (\text{III, 40})$$

Поскольку величина z известна в исходной постановке оптимальной задачи, уравнение (III, 39) можно рассматривать как уравнение относительно неизвестной величины y . Оптимальные значения нагрузки по хладогенту $v_{x, \text{опт}}$ и поверхности теплообмена $F_{\text{опт}}$ через решение уравнения находятся по формулам:

$$v_{x, \text{опт}} = \frac{v c_p}{v c_{p_x}} y_z \quad (\text{III, 41})$$

$$F_{\text{опт}} = - y_z \frac{v c_p}{v K_T} \ln \left(1 - \frac{1}{y_z} \right) \quad (\text{III, 42})$$

где y_z — решение уравнения (III, 39), соответствующее заданному значению z .

На рис. III-10 представлено графическое изображение правой части уравнения (III, 39), рассматриваемой как функция величины y . Решение уравнения (III, 39) определяется как абсцисса точки пересечения зависимости

$$f(y) = \ln \left(1 - \frac{1}{y} \right) + \frac{1}{y - 1} \quad (\text{III, 43})$$

с прямой, параллельной оси абсцисс и имеющей ординату, равную z .

Поскольку вид зависимости (III, 43) найден однозначно и не включает какие-либо параметры, эта зависимость может быть стандартизирована, после чего расчет оптимального [в смысле минимума выражения (III, 25)] теплообменника сводится к простой графической операции определения y_z с последующим расчетом значений $v_{x, \text{опт}}$ и $F_{\text{опт}}$ по формулам (III, 41) и (III, 42).

Теплообменник прямооточного типа (рис. II-17). В данном случае зависимость поверхности теплообмена F от расхода хладогента v_x описывается выражением (II, 54):

$$F = - \frac{v c_p}{K_T \left(1 + \frac{v c_p}{v_x c_{p_x}} \right)} \ln \left[1 - \frac{1}{v} \left(1 + \frac{v c_p}{v_x c_{p_x}} \right) \right] \quad (\text{II, 54})$$

Дифференцирование этого выражения по величине v_x и подстановка полученного значения производной в уравнение (III, 27) позволяют найти условие,

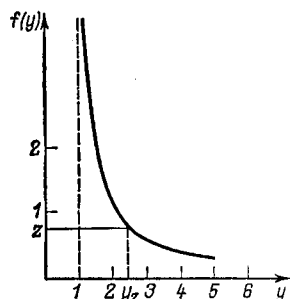


Рис. III-10. К определению оптимальных параметров теплообменника типа „смещение — вытеснение“.

которому должно удовлетворять оптимальное значение нагрузки по хладагенту:

$$\frac{1}{\left(1 + \frac{v_x c_{Px}}{v c_P}\right)^2} \left\{ \ln \left[1 - \frac{1}{v^*} \left(1 + \frac{v c_P}{v_x c_{Px}} \right) \right] - \frac{1 + \frac{v c_P}{v_x c_{Px}}}{1 + \frac{v c_P}{v_x c_{Px}} - v^*} \right\} - \frac{s_x K_T}{s_F c_{Px}} = 0 \quad (\text{III, 44})$$

В результате замены переменной

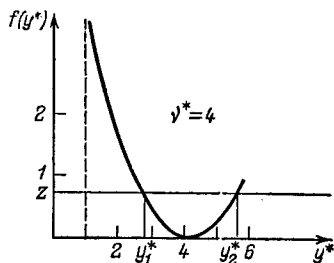
$$y^* = \frac{v^*}{1 + \frac{v c_P}{v_x c_{Px}}} \quad (\text{III, 45})$$

уравнение (III, 44) может быть приведено к виду

$$z = \left[\ln \left(1 - \frac{1}{y^*} \right) + \frac{1}{y^* - 1} \right] \left(\frac{y^*}{v^*} - 1 \right)^2 \quad (\text{III, 46})$$

где величина v^* играет роль параметра. Решение уравнения (III, 46) также легко

Рис. III-11. К определению оптимальных параметров теплообменника прямоточного типа.



можно получить с помощью графического метода, для чего следует построить зависимость правой части выражения (III, 46) от величины y^* при заданном значении параметра v^* , определяемого формулой (II, 55). Примерный вид этой зависимости для одного из значений v^* показан на рис. III-11.

Как видно из рис. III-11, уравнение (III, 46) для известного значения z характеризуется двумя различными решениями y_1^* и y_2^* . Тем не менее физический смысл имеет только одно решение y_1^* , для которого выполняется условие

$$y_1^* < v^* \quad (\text{III, 47})$$

Необходимость этого условия следует из формулы замены переменной (III, 45).

Найденное значение y_1^* используется для расчета оптимальных значений нагрузки теплообменника по хладагенту и поверхности теплообмена по формулам:

$$v_{x, \text{опт}} = \frac{v c_P y_1^*}{c_{Px} (v^* - y_1^*)} \quad (\text{III, 48})$$

$$F_{\text{опт}} = -y_1^* \frac{v c_P}{v^* K_T} \ln \left(1 - \frac{1}{y_1^*} \right) \quad (\text{III, 49})$$

В рассмотренных примерах оптимизации теплообменников разных типов предполагалось, что коэффициент теплопередачи не зависит от величины нагрузки теплообменника по хладагенту. В действительности эта зависимость существует и должна приниматься во внимание при проектировании теплообменных аппаратов. В представленных примерах указанную зависимость нужно учитывать при вычислении производной dF/dv_x , которую затем подставляют в уравнение (III, 27). Естественно, что приведенные выше выкладки несколько усложняются, однако общий подход к решению оптимальной задачи остается прежним.

3. ОПТИМАЛЬНЫЕ УСЛОВИЯ ПРОВЕДЕНИЯ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ

Решение задач, связанных с отысканием оптимальных условий проведения химических реакций, несомненно играет важнейшую роль в общей организации химического производства, так как зачастую позволяет при этом же аппаратурном оформлении и тех же затратах сырья получить большой выход полезной продукции или повысить ее качество. Кроме того, химические процессы решающим образом влияют на экономику производства, поэтому существенное значение приобретает экономически обоснованный выбор эксплуатационных параметров химических реакторов. В данном разделе изучены оптимальные условия для ряда простейших реакций, проводимых в различных аппаратах, с учетом разных экономических оценок эффективности процессов. При этом рассмотренные ниже примеры могут явиться иллюстрацией возможностей использования методов исследований функций классического анализа для решения частных задач оптимизации химических реакторов.

Реакторы идеального смешения.

Математическое описание реактора идеального смешения для различных типов реакций приведено в главе II (см. стр. 80 и сл.). Здесь использованы некоторые из результатов, полученных выше, для постановки и решения оптимальных задач с указанными реакторами. При этом под оптимальными условиями понимаются оптимальное время пребывания реагентов в реакторе $\tau_{\text{опт}}$ и оптимальная температура реакции $T_{\text{опт}}$, обеспечивающие максимальное или минимальное (в зависимости от постановки задачи) значение заданного критерия R .

Пример III-1. Для реакции первого порядка, рассмотренной в примере II-1, определить оптимальные условия, при которых себестоимость продукта P будет минимальной. При вычислении себестоимости воспользоваться выражением

$$R = s_{\text{пр}} = \frac{1}{v x_P} (s_A v x_A^{(0)} + s_V V + s_d) \quad (\text{III, 50})$$

где S_A — стоимость единицы расходуемого сырья; s_V — стоимость единицы объема реактора, исчисляемая с учетом его амортизации; s_d — стоимость дополнительного оборудования реактора, исчисляемая с учетом амортизации; v — на-

грузка реактора по исходному сырью; x_P — концентрация получаемого продукта после реакции.

Принимается, что нагрузка на реактор v задана. При этом определение оптимального времени пребывания реагентов в реакторе фактически сводится к нахождению его оптимального объема $V_{\text{опт}}$.

Решение. Для рассматриваемого случая концентрация продукта реакции на выходе реактора может быть определена из соотношений (II, 114) и (II, 117), откуда находим:

$$x_P = \frac{\tau k x_A^{(0)}}{1 + \tau k} \quad (\text{III, 51})$$

Подстановка соотношения (III, 51) в выражение для критерия оптимальности (III, 50) дает:

$$R = \left(s_A + \frac{s_d}{v x_A^{(0)}} \right) \left(\frac{1}{\tau k} + 1 \right) + \frac{s_V}{k x_A^{(0)}} (\tau k + 1) \quad (\text{III, 52})$$

С учетом полученной зависимости (III, 52) критерий оптимальности R может рассматриваться как функция двух переменных — времени пребывания τ и температуры T , от которой зависит значение константы скорости химической реакции k . Для упрощения вместо переменной T в данном случае можно использовать переменную k , поскольку предполагается, что между ними существует однозначная зависимость, определяемая уравнением Аррениуса (II, 92).

Необходимые условия экстремума функции R могут быть получены дифференцированием функции R по обоим переменным и приравниванием производных нулю. В результате найдем:

$$\frac{\partial R}{\partial \tau} = - \left(s_A + \frac{s_d}{v x_A^{(0)}} \right) \frac{1}{\tau^2 k} + \frac{s_V}{x_A^{(0)}} = 0 \quad (\text{III, 53})$$

$$\frac{\partial R}{\partial k} = - \left(s_A + \frac{s_d}{v x_A^{(0)}} \right) \frac{1}{\tau k^2} - \frac{s_V}{k^2 x_A^{(0)}} = 0 \quad (\text{III, 54})$$

Легко видеть, что последнее уравнение (III, 54) не может быть удовлетворено никакими конечными значениями τ и k . Единственная возможность его выполнения будет в том случае, если принять для константы скорости реакции бесконечно большое значение. При этом для конечных значений k производная dR/dk всегда остается отрицательной величиной, что характеризует возможность достижения минимального значения критерия R только при бесконечно большой температуре реакции. Поскольку в реальных условиях температура реакции всегда ограничена определенными технологическими пределами, полученные результаты означают, что приближения к оптимальным условиям можно достигнуть лишь проведением процесса при максимально возможной температуре. Остающееся уравнение (III, 53) в этом случае позволяет найти оптимальное значение времени пребывания, соответствующее заданному значению температуры процесса:

$$\tau_{\text{опт}} = \left(\frac{s_A v x_A^{(0)} + s_d}{s_V v k} \right)^{0,5} \quad (\text{III, 55})$$

Подстановка соотношения (III, 55) в выражение для критерия оптимальности (III, 52) позволяет определить его минимальное значение для заданного максимально возможного значения температуры T :

$$R_{\text{опт}} = \frac{s_V}{k x_A^{(0)}} \left[1 + k \left(\frac{s_A v x_A^{(0)} + s_d}{s_V v k} \right)^{0,5} \right]^2 \quad (\text{III, 56})$$

При помощи формул (III, 55) и (III, 56) можно получить также количественную и качественную оценки оптимальных условий проведения реакции с учетом достаточно общего выражения критерия оптимальности (III, 50).

Пример III-2. Для обратимой реакции первого порядка, рассмотренной в примере II-2, найти оптимальные условия, минимизирующие стоимость потерь, которые складываются из стоимости непрореагировавшего сырья и потерь катализатора, пропорциональных объему реактора, т. е. заданных в виде выражения:

$$R = s_A v x_A + s_V V = v (s_A x_A + s_V \tau) \quad (\text{III, 57})$$

где x_A — концентрация исходного продукта реакции после реактора; s_V — стоимость потерь катализатора с единицы объема реактора в единицу времени.

Решение. Концентрация исходного продукта для случая обратимой реакции первого порядка, проводимой в реакторе идеального смешения, определяется формулой (II, 124)

$$x_A = x_A^{(0)} \frac{1 + \tau k_2}{1 + \tau (k_1 + k_2)} \quad (\text{II, 124})$$

подстановка которой в выражение для критерия оптимальности (III, 57) позволяет найти:

$$R = v \left[s_A x_A^{(0)} \frac{1 + \tau k_2}{1 + \tau (k_1 + k_2)} + s_V \tau \right] \quad (\text{III, 58})$$

В результате дифференцирования выражения (III, 58) получим систему уравнений, определяющих экстремум критерия оптимальности:

$$\frac{\partial R}{\partial \tau} = v \left\{ -s_A x_A^{(0)} \frac{k_1}{[1 + \tau (k_1 + k_2)]^2} + s_V \right\} = 0 \quad (\text{III, 59})$$

$$\frac{\partial R}{\partial T} = \frac{v s_A x_A^{(0)}}{R_1 T^2} \frac{\tau k_1 [\tau k_2 (E_2 - E_1)] - E_1}{[1 + \tau (k_1 + k_2)]^2} = 0 \quad (\text{III, 60})$$

Систему уравнений (III, 59) и (III, 60) нельзя решить аналитически. Однако ее можно свести к одному уравнению, которое уже может быть легко решено любым численным методом. Для того чтобы вывести это уравнение, выразим из первого уравнения системы (III, 59) значение τ :

$$\tau = \frac{1}{k_1 + k_2} \left[\left(\frac{s_A k_1 x_A^{(0)}}{s_V} \right)^{0,5} - 1 \right] \quad (\text{III, 61})$$

Уравнение (III, 60), как легко видеть, в свою очередь эквивалентно следующему:

$$\tau k_2 (E_2 - E_1) - E_1 = 0 \quad (\text{III, 62})$$

Исключая величину τ из выражений (III, 61) и (III, 62), найдем искомое уравнение для расчета оптимальной температуры:

$$\frac{E_1}{E_2 - E_1} = \frac{k_2}{k_1 + k_2} \left[\left(\frac{s_A k_1 x_A^{(0)}}{s_V} \right)^{0,5} - 1 \right] \quad (\text{III, 63})$$

Полученное в результате решения уравнения (III, 63) оптимальное значение температуры (рис. III-12) используется затем для расчета оптимального времени пребывания по формуле (III, 61).

Формулу (III, 61) можно рассматривать как решение оптимальной задачи для случая, когда температура реакции задана. Поскольку физический смысл имеют только положительные значения времени пребывания τ , из этой формулы

следует, что экстремум критерия оптимальности (III, 58) существует лишь при выполнении неравенства:

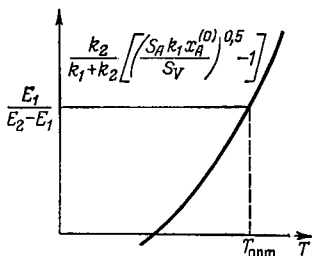
$$\frac{s_A k_1 x_A^{(0)}}{s_V} > 1 \quad (\text{III, 64})$$

Анализ уравнения (III, 63) показывает, что его решение при выполнении неравенства (III, 64) возможно только в том случае, когда энергия активации прямой реакции меньше энергии активации обратной реакции, т. е.

$$E_1 < E_2 \quad (\text{III, 65})$$

Неравенство (III, 65) представляет собой второе необходимое условие существования экстремума критерия оптимальности. Это условие вытекает из общих свойств рассматриваемого типа реакций, тогда как условие (III, 64) связано с видом критерия оптимальности, поскольку содержит стоимостные коэффициенты

Рис. III-12. Определение оптимальной температуры в реакторе идеального смешения для обратимой реакции $A \rightleftharpoons P$.



s_A и s_V , от значений которых, а точнее от их отношения s_A/s_V , зависит возможность существования оптимума. При увеличении стоимости исходного продукта s_A и уменьшении величины s_V , т. е. при увеличении отношения s_A/s_V , оптимальное значение времени пребывания неограниченно возрастает, что соответствует приближению к оптимальной задаче, в которой требуется найти минимальные потери исходного сырья без учета затрат на реактор.

Уравнение (III, 62) можно также считать соотношением, определяющим решение частной оптимальной задачи при заданном значении времени пребывания τ . Из него нетрудно получить формулу для расчета оптимального значения температуры реакции при заданном времени пребывания

$$T_{\text{опт}} = \frac{E_2}{R \ln \left[\tau k_{2\infty} \left(\frac{E_2}{E_1} - 1 \right) \right]} \quad (\text{III, 66})$$

из которой следует, что оптимальное значение температуры существует лишь при выполнении неравенства

$$\tau k_{2\infty} \left(\frac{E_2}{E_1} - 1 \right) > 1 \quad (\text{III, 67})$$

являющегося более сильным требованием, чем полученное выше соотношение между энергиями активации (III, 65).

Заметим, что формула (III, 66), определяющая оптимальное значение температуры для заданного времени пребывания, справедлива также, если в постановке оптимальной задачи нужно получить максимальный выход продукта реакции P . Сказанное вытекает из того обстоятельства, что для разбираемого случая минимальному значению концентрации x_A соответствует максимальный выход продукта P .

Пример III-3. Для параллельных реакций первого порядка, рассмотренных в примере II-3, найти оптимальные условия, минимизирующие себестоимость получаемого продукта P , исчисляемую с учетом затрат на сырье и амортизацию реактора.

Критерий оптимальности, минимальное значение которого определяется, в данном случае имеет вид:

$$R = s_{\text{пр}} = \frac{1}{v x_P} (s_A v x_A^{(0)} + s_V V) \quad (\text{III}, 68)$$

где $x_A^{(0)}$ — концентрация исходного сырья в реакционной смеси, подаваемой в реактор; x_P — концентрация продукта на выходе реактора; s_A — стоимость исходного сырья; s_V — стоимость единицы объема реактора, исчисляемая с учетом его амортизации.

Решение. Концентрация продукта реакции на выходе реактора для параллельных реакций первого порядка характеризуется уравнением (II, 135):

$$x_P = x_A^{(0)} \frac{\tau k_1}{1 + \tau (k_1 + k_2)} \quad (\text{II}, 135)$$

Подстановка этого соотношения в выражение для критерия оптимальности (III, 68) позволяет вывести зависимость

$$R = \frac{1}{k_1} [1 + \tau (k_1 + k_2)] \left(\frac{s_A}{\tau} + \frac{s_V}{x_A^{(0)}} \right) \quad (\text{III}, 69)$$

которая после преобразования может быть записана в виде:

$$R = s_A \left[\frac{1}{k_1 \tau} + 1 + \frac{k_2}{k_1} \right] + \frac{s_V}{k_1 x_A^{(0)}} [1 + \tau (k_1 + k_2)] \quad (\text{III}, 70)$$

Дифференцированием выражения (III, 70) по τ и T находим систему уравнений, которой должны удовлетворять оптимальные значения времени пребывания $\tau_{\text{опт}}$ и температуры $T_{\text{опт}}$:

$$\frac{\partial R}{\partial \tau} = \frac{1}{k_1} \left[\frac{s_V}{x_A^{(0)}} (k_1 + k_2) - \frac{s_A}{\tau^2} \right] = 0 \quad (\text{III}, 71)$$

$$\frac{\partial R}{\partial T} = \frac{s_A x_A^{(0)} + s_V \tau}{R_r T^2 \tau k_1 x_A^{(0)}} [\tau k_2 (E_2 - E_1) - E_1] = 0 \quad (\text{III}, 72)$$

Из уравнения (III, 72) следует соотношение:

$$\tau k_2 (E_2 - E_1) - E_1 = 0 \quad (\text{III}, 73)$$

в точности совпадающее с полученным выше аналогичным соотношением для обратимых реакций (III, 62). Поэтому для оптимальной задачи, в которой требуется найти максимальный выход продукта реакции P выбором оптимального значения температуры для заданного времени пребывания, также справедлива формула (III, 66) предыдущего примера.

Из уравнения (III, 71) может быть получено выражение:

$$\tau = \left[\frac{s_A x_A^{(0)}}{s_V (k_1 + k_2)} \right]^{0,5} \quad (\text{III}, 74)$$

представляющее собой решение оптимальной задачи для заданного значения температуры реакции.

Исключая из выражений (III, 73) и (III, 74) величину τ , найдем уравнение для определения оптимального значения температуры реакции $T_{\text{опт}}$, для которой

затем по формуле (III, 74) можно рассчитать соответствующее оптимальное время пребывания $\tau_{\text{опт}}$:

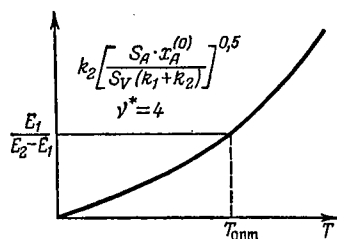
$$\frac{E_1}{E_2 - E_1} = k_2 \left[\frac{s_A x_A^{(0)}}{s_V (k_1 + k_2)} \right]^{0.5} \quad (\text{III, 75})$$

Правая часть полученного выражения является возрастающей положительной функцией температуры. Таким образом, если для энергий активаций параллельных реакций выполняется соотношение (III, 65), т. е. энергия активации основной реакции E_1 меньше энергии активации побочной реакции E_2 , то оптимальное значение температуры может быть найдено решением уравнения (III, 75) с помощью численного или графического метода (рис. III-13).

Пример III-4. Для последовательных реакций первого порядка, рассмотренных в примере II-4, определить оптимальные условия, максимизирующие концентрацию промежуточного продукта P на выходе реактора.

Рис. III-13. Определение оптимальной температуры в реакторе идеального смешения

для параллельных реакций $A \xrightarrow{P} S$.



Решение. Вначале разберем случай, когда концентрация промежуточного продукта P в исходной смеси, подаваемой в реактор, равна нулю. Принимая во внимание формулу (II, 144), характеризующую при этом концентрацию продукта P на выходе аппарата, будем иметь следующее выражение для критерия оптимальности:

$$R = x_P = x_A^{(0)} \frac{\tau k_1}{(1 + \tau k_1)(1 + \tau k_2)} \quad (\text{III, 76})$$

Дифференцированием выражения (III, 76) по τ и T находим систему уравнений, определяющую оптимальные условия реакции:

$$\frac{\partial R}{\partial \tau} = k_1 x_A^{(0)} \frac{1 - \tau^2 k_1 k_2}{[(1 + \tau k_1)(1 + \tau k_2)]^2} = 0 \quad (\text{III, 77})$$

$$\frac{\partial R}{\partial T} = \frac{\tau k_1 x_A^{(0)}}{R T^2} \frac{E_1 (1 + \tau k_2) - E_2 \tau k_2 (1 + \tau k_1)}{[(1 + \tau k_1)(1 + \tau k_2)]^2} = 0 \quad (\text{III, 78})$$

Эта система уравнений эквивалентна следующей:

$$1 - \tau^2 k_1 k_2 = 0 \quad (\text{III, 79})$$

$$E_1 (1 + \tau k_2) - E_2 \tau k_2 (1 + \tau k_1) = 0 \quad (\text{III, 80})$$

Из первого уравнения (III, 79) можно вывести формулу для нахождения оптимального времени пребывания в реакторе при заданном значении температуры:

$$\tau_{\text{опт}} = (k_1 k_2)^{-0.5} \quad (\text{III, 81})$$

Подставляя выражение (III, 81) в уравнение (III, 80), после преобразований получим:

$$E_1 = E_2 \quad (\text{III, 82})$$

Этот результат означает, что совместного решения уравнений (III, 79) и (III, 80) не существует и, следовательно, абсолютный экстремум функции R , определяемой выражением (III, 76), отсутствует. Тем не менее для заданного значения времени пребывания τ решение уравнения (III, 80) может быть получено, что можно показать, записав его в виде:

$$\frac{1}{\tau k_2} + 1 = \frac{E_2}{E_1} (1 + \tau k_1) \quad (\text{III, 83})$$

Очевидно, что левая часть уравнения (III, 83) — убывающая положительная функция температуры, остающаяся больше единицы, тогда как правая часть этого уравнения, напротив, является возрастающей функцией температуры, минимальное значение которой характеризуется отношением энергий активаций. Таким образом, решение уравнения (III, 83) в принципе может быть найдено.

Отсутствие абсолютного экстремума у критерия оптимальности (III, 76), рассматриваемого как функция переменных τ и T , означает, что его наибольшее значение следует искать на границе области допустимых значений этих переменных.

Из вида формулы (III, 81) следует, что с возрастанием температуры оптимальное время пребывания $\tau_{\text{опт}}$ уменьшается и, наоборот, с уменьшением температуры — увеличивается. Остается выяснить, когда возрастанию выхода промежуточного продукта способствует повышение и когда снижение температуры. С этой целью подставим выражение для оптимального времени пребывания (III, 81) в соотношение для критерия оптимальности (III, 76), в результате чего критерий оптимальности можно рассматривать как функцию только температуры реакции:

$$R(T) = x_A^{(0)} \left[1 + \left(\frac{k_1}{k_2} \right)^{0,5} \right]^{-2} \quad (\text{III, 84})$$

Продифференцируем выражение (III, 84) по температуре:

$$\frac{dR(T)}{dT} = \frac{x_A^{(0)}}{R_T T^2} \left(\frac{k_1}{k_2} \right)^{0,5} \left[1 + \left(\frac{k_1}{k_2} \right)^{0,5} \right]^{-3} (E_1 - E_2) \quad (\text{III, 85})$$

Очевидно, что знак производной dR/dT совпадает со знаком разности $E_1 - E_2$. При этом, если $E_1 > E_2$, то

$$\frac{dR}{dT} > 0 \quad (\text{III, 86})$$

и, следовательно, выход продукта P увеличивается при повышении температуры. Если же $E_1 < E_2$, то

$$\frac{dR}{dT} < 0 \quad (\text{III, 87})$$

и выход продукта P возрастает при снижении температуры.

Таким образом, если заданы ограничения на температуру реакции:

$$T_m \leq T \leq T_M \quad (\text{III, 88})$$

то оптимальная температура будет T_M при $E_1 > E_2$ и T_m при $E_1 < E_2$. Оптимальное время пребывания в этом случае рассчитывается по формуле (III, 81).

Если заданы ограничения на время пребывания:

$$\tau_m \leq \tau \leq \tau_M \quad (\text{III, 89})$$

то оптимальное время пребывания будет τ_m при $E_1 > E_2$ и τ_M при $E_1 < E_2$. Оптимальная температура реакции в этом случае определяется в результате решения уравнения (III, 80).

Пусть теперь концентрация продукта реакции P в исходной смеси, подаваемой в реактор, не равна нулю. Ограничимся решением задачи выбора оптимального времени пребывания.

Концентрация продукта P на выходе реактора идеального смешения для этого случая характеризуется выражением

$$x_P = \frac{x_P^{(0)} + \tau k_1 (x_A^{(0)} + x_P^{(0)})}{(1 + \tau k_1)(1 + \tau k_2)} \quad (\text{II}, 143)$$

дифференцированием которого и приравниванием нулю производной можно получить следующее уравнение для нахождения оптимального времени пребывания:

$$\tau^2 + 2\tau \frac{x_P^{(0)}}{x_A^{(0)} + x_P^{(0)}} - \frac{k_1 x_A^{(0)} - k_2 x_P^{(0)}}{k_1^2 k_2 (x_A^{(0)} + x_P^{(0)})} = 0 \quad (\text{III}, 90)$$

Решение уравнения (III, 90) позволяет вывести формулу:

$$\tau_{\text{опт}} = \frac{x_P^{(0)}}{x_A^{(0)} + x_P^{(0)}} \left\{ \left[1 + \frac{x_A^{(0)} - x_P^{(0)}}{k_1^2 k_2 (x_P^{(0)})^2} (k_1 x_A^{(0)} - k_2 x_P^{(0)}) \right]^{0,5} - 1 \right\} \quad (\text{III}, 91)$$

откуда следует, что оптимальное время пребывания $\tau_{\text{опт}}$ существует лишь в случае, когда выполняется условие:

$$k_1 x_A^{(0)} - k_2 x_P^{(0)} > 0 \quad (\text{III}, 92)$$

Условие (III, 92) означает по существу требование положительности скорости образования продукта P для состава исходной смеси, подаваемой в реактор:

$$w_P = k_1 x_A^{(0)} - k_2 x_P^{(0)} \quad (\text{III}, 93)$$

В случае равенства нулю этой скорости оптимальное время пребывания, рассчитанное по формуле (III, 91), также оказывается равным нулю, что доказывает нецелесообразность проведения реакции при заданных температурных условиях (см. рис. II-26).

Пример III-5. Для последовательных реакций первого порядка с обратимой первой стадией, рассмотренных в примере II-5, найти оптимальные условия, максимизирующие концентрацию промежуточного продукта P на выходе реактора.

Решение. Принимая во внимание формулу (II, 153), характеризующую для этого случая концентрацию продукта P на выходе аппарата, будем иметь выражение для критерия оптимальности:

$$R = x_P = x_A^0 \frac{\tau k_1}{1 + \tau (k_1 + k_2 + k_3) + \tau^2 k_1 k_2} \quad (\text{III}, 94)$$

Дифференцированием выражения (III, 94) по τ и T находим систему уравнений, определяющую оптимальные условия реакции

$$\frac{\partial R}{\partial \tau} = k_1 x_A^{(0)} \frac{1 - \tau^2 k_1 k_2}{[1 + \tau (k_1 + k_2 + k_3) + \tau^2 k_1 k_2]^2} = 0 \quad (\text{III}, 95)$$

$$\frac{\partial R}{\partial T} = \frac{\tau k_1 x_A^{(0)}}{R T^2} \frac{E_1 + (E_1 - E_2) \tau k_2 + (E_1 - E_3) \tau k_3 - E_2 \tau^2 k_1 k_2}{[1 + \tau (k_1 + k_2 + k_3) + \tau^2 k_1 k_2]^2} = 0 \quad (\text{III}, 96)$$

которая эквивалентна следующей системе:

$$1 - \tau^2 k_1 k_2 = 0 \quad (\text{III}, 97)$$

$$E_1 + (E_1 - E_2) \tau k_2 + (E_1 - E_3) \tau k_3 - E_2 \tau^2 k_1 k_2 = 0 \quad (\text{III}, 98)$$

Уравнение (III, 97) позволяет получить то же самое выражение для оптимального времени пребывания при заданной температуре реакции, что и формула (III, 81) предыдущего примера:

$$\tau = (k_1 k_2)^{-0.5} \quad (\text{III, 99})$$

т. е. оптимальное время пребывания не зависит от обратимости первой стадии реакции (II, 145).

Исключая переменную τ из уравнения (III, 98), после преобразований получим:

$$(E_3 - E_1) \frac{k_3}{(k_1 k_2)^{0.5}} = (E_1 - E_2) \left[\frac{k_2}{(k_1 k_2)^{0.5}} + 1 \right] \quad (\text{III, 100})$$

Уравнение (III, 100) характеризует оптимальную температуру реакции, зная которую, можно затем рассчитать и соответствующее ей оптимальное время пребывания по формуле (III, 99), т. е. определить условия, отвечающие абсолютному экстремуму критерия (III, 94). То, что этот экстремум соответствует искомому оптимуму, можно показать анализом производных второго порядка.

Из уравнения (III, 100) следует, что абсолютный экстремум существует лишь при определенном соотношении энергий активаций всех стадий реакции, а именно, когда выполняются условия:

$$E_3 > E_1 > E_2 \quad (\text{III, 101})$$

или

$$E_3 < E_1 < E_2 \quad (\text{III, 102})$$

Во всех остальных случаях оптимальные условия будут при максимальном или при минимальном значении температуры реакции в зависимости от того, больше или меньше энергия активации основной реакции E_1 , чем E_2 и E_3 .

Пример III-6. Для параллельно-последовательных реакций первого порядка, рассмотренных в примере II-6, найти оптимальное время пребывания, максимизирующее при заданной температуре реакции выход продукта P .

Решение. Принимая во внимание формулу (II, 165), определяющую для этого случая концентрацию продукта P на выходе реактора, будем иметь выражение для критерия оптимальности

$$R = x_P = x_A^{(0)} \frac{\tau k_1}{[1 + \tau(k_1 + k_2)](1 + \tau k_2)} \quad (\text{III, 103})$$

дифференцированием которого по τ получим уравнение для определения оптимального времени пребывания

$$\frac{dR}{d\tau} = k_1 x_A^{(0)} \frac{1 - \tau^2 k_2 (k_1 + k_3)}{[1 + \tau(k_1 + k_3)]^2 (1 + \tau k_2)^2} \quad (\text{III, 104})$$

откуда находим искомую формулу:

$$\tau_{\text{опт}} = [k_2 (k_1 + k_3)]^{-0.5} \quad (\text{III, 105})$$

Во всех рассмотренных выше примерах удавалось получить более или менее законченные конечные выражения для определения оптимальных условий проведения реакции в реакторе идеального смешения. Практически это стало возможным благодаря тому, что рассматривались предельно простые случаи с реакциями первого порядка, допускающими относительно простое аналитическое выражение критерия оптимальности. В более сложных случаях, в особенности для реакций, имеющих порядок, отличающийся от первого, решение существенно усложняется и, как правило, требует применения численных методов для получения конечных результатов.

Реакторы идеального вытеснения

Решение задачи оптимизации непрерывного реактора идеального вытеснения в общем случае значительно более сложно, чем оптимизация реактора идеального смешения. Это в первую очередь обусловлено тем, что реактор вытеснения представляет собой объект с распределенными параметрами и его математическое описание содержит дифференциальные уравнения, решение которых в аналитической форме может быть получено лишь в весьма ограниченном числе случаев. В связи с этим ниже рассмотрены некоторые частные задачи оптимизации реакторов идеального вытеснения, которые можно решить при использовании методов исследования функций классического анализа в аналитической форме либо в форме процедуры вычислений, приводящей к определению оптимальных условий.

Пример III-7. Для последовательной реакции первого порядка типа



проводимой в изотермическом реакторе идеального вытеснения, найти оптимальное время пребывания реагентов в аппарате $\tau_{\text{опт}}$, при котором достигается максимальный выход промежуточного продукта реакции P .

Решение. Принимая во внимание формулу (II, 184), определяющую для этого случая концентрацию продукта P на выходе реактора идеального вытеснения, найдем следующее выражение для критерия оптимальности:

$$R = x_P(\tau) = \frac{k_1 x_A^{(0)}}{k_2 - k_1} [\exp(-k_1 \tau) - \exp(-k_2 \tau)] \quad (\text{III, 107})$$

В результате дифференцирования по τ выражения (III, 107) и приравнивания нулю производной получим уравнение

$$\frac{dR}{d\tau} = -\frac{k_1 x_A^{(0)}}{k_2 - k_1} [k_1 \exp(-k_1 \tau) - k_2 \exp(-k_2 \tau)] = 0 \quad (\text{III, 108})$$

решение которого относительно τ имеет вид:

$$\tau_{\text{опт}} = \frac{\ln k_1 - \ln k_2}{k_1 - k_2} \quad (\text{III, 109})$$

Формулу (III, 109), характеризующую оптимальное время пребывания для изотермического реактора идеального вытеснения, нельзя применять, если $k_1 = k_2$, так как числитель и знаменатель правой части выражения (III, 109) при этом обращаются в нуль. Значение оптимального времени пребывания в данном случае можно найти предельным переходом при $k_1 \rightarrow k_2 = k$, т. е.

$$\tau_{\text{опт}}|_{k_1=k_2} = \lim_{k_1 \rightarrow k_2} \frac{\ln k_1 - \ln k_2}{k_1 - k_2} \quad (\text{III, 110})$$

Применяя правило Лопиталя [5] для раскрытия неопределенности типа 0/0, получим:

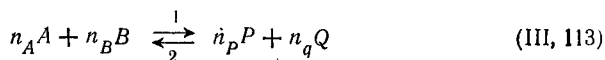
$$\tau_{\text{опт}}|_{k_1=k_2=k} = \frac{1}{k} \quad (\text{III, 111})$$

Зная оптимальное время пребывания, можно определить максимально возможный в изотермических условиях выход продукта P в реакторе идеального

вытеснения при протекании последовательной реакции (III, 106), для чего следует подставить значение из формулы (III, 109) в выражение (III, 107). В результате найдем:

$$R_{\text{онт}}(T) = x_A^{(0)} \left(\frac{k_1}{k_2} \right)^{\frac{k_2}{k_2 - k_1}} \quad (\text{III, 112})$$

Пример III-8. Для обратимой реакции общего вида



проводимой в реакторе идеального вытеснения, определить оптимальный температурный профиль (распределение температуры по длине реактора), при котором заданная степень превращения x_A исходного реагента A и, следовательно, заданный выход продукта реакции P достигаются при минимальном времени пребывания реагентов в реакторе или, что то же самое, при минимальном объеме реактора заданной производительности.

Решение. Математическое описание реактора для рассматриваемого случая может быть представлено в виде одного дифференциального уравнения, описывающего изменение концентрации реагента A по длине аппарата, или в зависимости от времени нахождения элементарного объема реагирующей смеси в реакторе:

$$\frac{dx_A}{dt} = w_A(T, x_A) \quad (\text{III, 114})$$

Воспользовавшись известным соотношением между концентрацией и степенью превращения

$$x_A = \frac{x_A^{(0)} - x_A}{x_A^{(0)}} \quad (\text{III, 115})$$

можно представить уравнение (III, 114) в виде:

$$\frac{dx_A}{dt} = - \frac{1}{x_A^{(0)}} w_A^*(T, x_A) \quad (\text{III, 116})$$

где $w_A^*(T, x_A)$ представляет собой аналитическое выражение скорости образования продукта A через степень превращения x_A и температуру T , являющуюся, в свою очередь, функцией t .

Уравнение (III, 116) должно интегрироваться в заданных пределах

$$x_A|_{t=0} = x_A^{(0)} \quad (\text{III, 117})$$

$$x_A|_{t=\tau} = x_A^{(k)} \quad (\text{III, 118})$$

причем выполнение условия (III, 118) обеспечивается выбором зависимости $T(t)$.

Аналитическое выражение критерия оптимальности в данном случае может быть получено из уравнения (III, 116) и условий (III, 117) и (III, 118), если это уравнение записать в интегральной форме:

$$\tau = - x_A^{(0)} \int_{x_A^{(0)}}^{x_A^{(k)}} \frac{dx_A}{w_A^*(T, x_A)} \quad (\text{III, 119})$$

При вычислении интеграла в правой части выражения (III, 119) температуру уже нужно считать функцией степени превращения x_A ,

Необходимое условие для выбора оптимальной температуры в каждом сечении реактора, минимизирующей общее время пребывания τ , можно найти из условия равенства нулю производной по температуре от выражения (III, 119). Дифференцируя интеграл в правой части формулы (III, 119) по температуре T , которая при этом принимается как параметр, и приравняв производную нулю, получим:

$$x_A^{(0)} \int_{x_A^{(0)}}^{x_A^{(k)}} \frac{\partial w_A^*}{\partial T} \cdot \frac{dx}{(w_A^*)^2} = 0 \quad (\text{III, 120})$$

Условию (III, 120), вообще говоря, могут удовлетворять различные температурные профили в реакторе идеального вытеснения, не обязательно оптимальные в смысле минимизации общего времени пребывания или минимизирующие его при определенных ограничениях на характер изменения температуры. Последний вариант, например, рассмотрен ниже при решении задачи оптимизации адиабатического реактора идеального вытеснения.

Наиболее простым случаем выполнения условия (III, 120) будет тот, когда подынтегральное выражение тождественно обращается в нуль. Очевидно, что при конечном значении скорости образования A это возможно только при условии равенства нулю производной

$$\frac{\partial w_A^*}{\partial T} = 0 \quad (\text{III, 121})$$

Скорость образования реагента A , взятая со знаком минус, т. е. $-w_A^*$, при протекании химической реакции в желаемом направлении всегда положительна и равна скорости расходования указанного реагента. Поэтому, если записать условие (III, 121) в виде

$$\frac{\partial w}{\partial T} = 0 \quad (\text{III, 122})$$

где

$$w = -\frac{1}{x_A^{(0)}} w_A^* \quad (\text{III, 123})$$

то соотношение (III, 122) можно рассматривать как требование максимизации скорости расходования $-w_A^*$ реагента A при любом значении степени превращения x_A . Поскольку с учетом равенства (III, 123) общее время пребывания, определяемое формулой (III, 119), может быть также записано как

$$\tau = \int_{x_A^{(0)}}^{x_A^{(k)}} \frac{dx_A}{w} \quad (\text{III, 124})$$

требование максимизации w очевидным образом соответствует условию получения минимального значения времени пребывания.

Для реакции (III, 113) скорость образования реагента A равна:

$$w_A = k_2 x_P^{n_P} x_Q^{n_Q} - k_1 x_A^{n_A} x_B^{n_B} \quad (\text{III, 125})$$

Воспользовавшись условием (III, 122) с учетом соотношения (III, 125), найдем уравнение, связывающее температуру реакции с концентрациями реагирующих

веществ в любом сечении реактора идеального вытеснения при оптимальном температурном режиме:

$$\frac{d(-w_A)}{dT} \sim E_1 k_1 x_A^{n_A} x_B^{n_B} - E_2 k_2 x_P^{n_P} x_Q^{n_Q} = 0 \quad (\text{III, 126})$$

Уравнение (III, 126) характеризует максимизирующее значение температуры для скорости расходования $-w_A$ реагента A лишь при экзотермических процессах, у которых энергия активации прямой реакции меньше энергии активации обратной реакции. Для таких процессов константа скорости прямой реакции с возрастанием температуры увеличивается медленнее, чем константа скорости обратной реакции. Поэтому знак производной $d(-w_A)/dT$ при значении температуры, удовлетворяющем условию (III, 126), изменяется с $(+)$ на $(-)$. Это свидетельствует о том, что величина $-w_A$ достигает при данной температуре максимального значения.

Для эндотермических реакций, у которых $E_1 > E_2$, максимальное значение скорости расходования $-w_A$ реагента A может быть достигнуто только при достаточно высокой температуре реакции, что и определяет оптимальные температурные условия для таких реакций, как изотермический режим при наибольшей температуре, допустимой технологическими ограничениями.

При анализе характера изменения оптимальной температуры по длине реактора идеального вытеснения для случая экзотермических реакций уравнение (III, 126) удобнее представить в виде:

$$\frac{E_1 k_1}{E_2 k_2} = \frac{x_P^{n_P} x_Q^{n_Q}}{x_A^{n_A} x_B^{n_B}} \quad (\text{III, 127})$$

Правая часть соотношения (III, 127) может быть записана как функция только одной переменной — степени превращения κ_A , поскольку для реакции рассматриваемого типа концентрации всех реагирующих веществ можно выразить через указанную степень превращения с помощью соотношений:

$$x_A = x_A^{(0)} (1 - \kappa_A) \quad (\text{III, 128})$$

$$x_B = x_B^{(0)} - \frac{n_B}{n_A} (x_A^{(0)} - x_A) = x_B^{(0)} - \frac{n_B}{n_A} x_A^{(0)} \kappa_A \quad (\text{III, 129})$$

$$x_P = x_P^{(0)} + \frac{n_P}{n_A} (x_A^{(0)} - x_A) = x_P^{(0)} + \frac{n_P}{n_A} x_A^{(0)} \kappa_A \quad (\text{III, 130})$$

$$x_Q = x_Q^{(0)} + \frac{n_Q}{n_A} (x_A^{(0)} - x_A) = x_Q^{(0)} + \frac{n_Q}{n_A} x_A^{(0)} \kappa_A \quad (\text{III, 131})$$

С учетом выражений (III, 128)–(III, 131) уравнение (III, 127) может быть представлено в виде

$$\frac{E_1 k_1}{E_2 k_2} = f(\kappa_A) \quad (\text{III, 132})$$

где

$$f(\kappa_A) = \frac{\left(x_P^{(0)} + \frac{n_P}{n_A} x_A^{(0)} \kappa_A\right)^{n_P} \left(x_Q^{(0)} + \frac{n_Q}{n_A} x_A^{(0)} \kappa_A\right)^{n_Q}}{\left(x_A^{(0)}\right)^{n_A} (1 - \kappa_A)^{n_A} \left(x_B^{(0)} - \frac{n_B}{n_A} x_A^{(0)} \kappa_A\right)^{n_B}} \quad (\text{III, 133})$$

С целью дальнейших упрощений введем вместо температуры новую переменную z , связанную с температурой соотношением:

$$z = \exp \left[\frac{E_1}{R_T} \left(\frac{1}{T_0} - \frac{1}{T} \right) \right] \quad (\text{III, 134})$$

Здесь T_0 — значение температуры, при котором выполняется равенство:

$$k_1(T_0) = R_2(T_0) = k_0 \quad (\text{III, 135})$$

Очевидно, что z является монотонно возрастающей функцией температуры T и ее значение показывает, во сколько раз нужно увеличить константу скорости прямой реакции k_1 , определенную при температуре T_0 , для того, чтобы найти величину этой константы при температуре T .

Введение новой переменной z позволяет записать константы скорости прямой (k_1) и обратной (k_2) реакций как

$$k_1 = k_0 z \quad (\text{III, 136})$$

$$k_2 = k_0 z^{E_2/E_1} \quad (\text{III, 137})$$

и представить уравнение (III, 132) в следующей форме

$$\frac{E_1}{E_2} z^{(E_1 - E_2)/E_1} = f(x_A) \quad (\text{III, 138})$$

откуда

$$z = \left[\frac{E_2}{E_1} f(x_A) \right]^{E_1/(E_1 - E_2)} \quad (\text{III, 139})$$

Из выражения (III, 133) видно, что $f(x_A)$ возрастает с увеличением степени превращения x_A . Причем при нулевых значениях начальных концентраций $x_P^{(0)}$ и $x_Q^{(0)}$ и нулевой степени превращения x_A выполняется равенство:

$$f(0) = 0 \quad (\text{III, 140})$$

Поскольку рассматривается экзотермическая реакция, для которой $E_1 < E_2$, из соотношения (III, 139) видно, что оптимальное значение z должно уменьшаться с увеличением степени превращения и, следовательно, должна снижаться и оптимальная температура. Если на входе реактора выполняется равенство (III, 140), то оптимальное значение температуры здесь будет бесконечно большим.

Таким образом получено, что оптимальная температура в реакторе идеального вытеснения в случае обратимой экзотермической реакции должна уменьшаться от входа в реактор к его выходу. Для того чтобы найти закон этого снижения как функцию времени пребывания τ , необходимо проинтегрировать уравнение (III, 116) с учетом полученного выражения (III, 139), которое используется при определении оптимальной температуры для любого значения степени превращения исходного реагента A . Найденное в результате интегрирования уравнения (III, 116) значение степени превращения в каждом сечении реактора применяют затем для расчета оптимальной температуры с помощью выражения (III, 139).

Процедуру определения оптимального температурного профиля в реакторе идеального вытеснения в данном случае удобно представить графически (рис. III-14). С учетом выражения (III, 139) в первом квадранте строят зависимость $T_{\text{опт}}(x_A)$. Далее интегрированием уравнения (III, 116) во втором квадранте строят зависимость $\tau_{\text{опт}}(x_A)$, рассчитанную при оптимальной температуре.

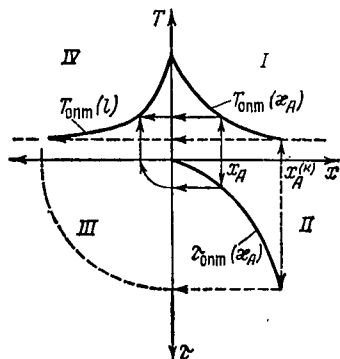


Рис. III-14. Графическое определение оптимального температурного профиля в реакторе идеального вытеснения для обратимых реакций.

Для построения последней зависимости уравнение (III, 116) удобно записать в виде

$$\tau_{\text{опт}}(\kappa_A) = -\kappa_A^{(0)} \int_{\kappa_A^{(0)}}^{\kappa_A} \frac{d\kappa}{\omega_A^* [T_{\text{опт}}(\kappa), \kappa]} \quad (\text{III, 141})$$

где интеграл берется с переменным верхним пределом. Последующий порядок определения оптимального температурного профиля, получаемого графически в четвертом квадранте, ясен из приведенного на рис. III-14 построения.

Существенную помощь при решении задач оптимизации реакторов, в которых протекают обратимые экзотермические реакции, может оказать знание зависимости между оптимальной температурой, максимизирующей скорость превращения, и равновесной температурой T_e для смеси того же состава.

Для вывода этого соотношения в случае обратимой экзотермической реакции (III, 13) представим скорость образования продукта реакции ω_P в виде:

$$\omega_P = k_1(T) f_1(\kappa_A) - k_2(T) f_2(\kappa_A) \quad (\text{III, 142})$$

причем $f_1(\kappa_1)$ и $f_2(\kappa_2)$ — некоторые функции концентраций веществ, участвующих в реакции, записанные через степень превращения исходного реагента A .

Как уже отмечалось выше, оптимальная температура, максимизирующая скорость образования продукта P в обратимой экзотермической реакции, может быть найдена решением уравнения:

$$\left. \frac{d\omega_P}{dT} \right|_{T=T_{\text{опт}}} \sim E_1 k_1(T_{\text{опт}}) f_1(\kappa_A) - E_2 k_2(T_{\text{опт}}) f_2(\kappa_A) = 0 \quad (\text{III, 143})$$

Для той же степени превращения равновесная температура T_e определяется из условия равенства нулю скорости образования ω_P т. е. из уравнения

$$\omega_P|_{T=T_e} = k_1(T_e) f_1(\kappa_A) - k_2(T_e) f_2(\kappa_A) = 0 \quad (\text{III, 144})$$

Исключая из уравнений (III, 143) и (III, 144) функции $f_1(\kappa_A)$ и $f_2(\kappa_A)$, получим искомое соотношение между оптимальной и равновесной температурами реакции

$$\frac{E_1 k_1(T_{\text{опт}})}{E_2 k_2(T_{\text{опт}})} = \frac{k_1(T_e)}{k_2(T_e)} \quad (\text{III, 145})$$

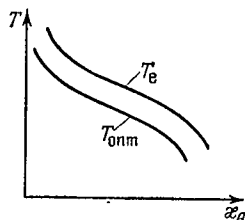
которое оказывается независящим от степени превращения κ_A .

Из соотношения (III, 145) с учетом зависимости констант скорости реакции от температуры в форме уравнения Аррениуса можно найти:

$$T_{\text{опт}} = \frac{T_e}{1 + \frac{R T_e}{E_2 - E_1} \ln \frac{E_2}{E_1}} \quad (\text{III, 146})$$

Таким образом, поставив эксперимент по определению равновесной температуры T_e смеси данного состава, что относительно просто, поскольку при этом не требуется подвода реагентов в зону реакции и отвода их из нее, далее по формуле (III, 146) уже можно рассчитать оптимальное значение температуры реакции, при котором смесь этого состава будет реагировать с максимальной скоростью. Если известна зависимость равновесной температуры T_e от степени превращения, то с помощью формулы (III, 146) можно построить и зависимость оптимальной температуры $T_{\text{опт}}$

Рис. III-15. Зависимость равновесной (T_e) и оптимальной $T_{\text{опт}}$ температур от степени превращения x исходных реагентов в обратимой реакции.



от степени превращения (рис. III-15), которая может быть использована для расчета оптимального температурного профиля в реакторе идеального вытеснения (рис. III-14).

Ступенчатые реакторы идеального вытеснения

Практическая реализация оптимального температурного профиля в реакторе вытеснения, как правило, встречает серьезные затруднения, связанные с необходимостью создания специальной системы теплообмена, которая должна обеспечивать определенное значение температуры в каждом сечении аппарата. Поэтому для приближения условий реакции к оптимальным иногда применяют ступенчатые реакторы с различными температурными условиями на ступенях. Такой ступенчатый реактор часто оформляют в виде последовательного соединения отдельных аппаратов с автономными системами теплообмена. В последнем случае принято говорить, что реакция проводится в каскаде реакторов.

Ниже рассмотрены примеры определения оптимальных условий в ступенчатых реакторах идеального вытеснения.

Пример III-9. Для параллельных реакций первого порядка



которые проводятся в ступенчатом реакторе идеального вытеснения, состоящем из двух изотермических ступеней с различными температурами, для заданного общего объема аппарата

$$V_r = V_r^{(1)} + V_r^{(2)} \quad (\text{III, 148})$$

найти оптимальное соотношение объемов ступеней $V_r^{(1)}$ и $V_r^{(2)}$, максимизирующее выход продукта реакции P ,

Решение. Чтобы записать аналитическое выражение для критерия оптимальности, необходимо рассчитать концентрацию продукта P на выходе реактора рассматриваемого типа. Указанная концентрация на выходе первой ступени x_P , определяется уравнением (II, 179):

$$x_P(\tau_1) = \frac{k_{11}}{k_{11} + k_{21}} \{1 - \exp[-(k_{11} + k_{21})\tau_1]\} \quad (\text{III, 149})$$

где второй индекс у констант скорости реакции показывает, что их значения вычисляются при температуре на первой ступени аппарата.

Во второй ступени реактора происходит дополнительное превращение непрореагировавшей части исходного вещества A , вследствие чего концентрация продукта P возрастает на величину $x_P(\tau_2)$, которая, в свою очередь, может быть рассчитана по формуле, аналогичной уравнению (III, 149):

$$\bar{x}_P(\tau_2) = \frac{k_{12}x_A(\tau_1)}{k_{12} + k_{22}} \{1 - \exp[-(k_{12} + k_{22})\tau_2]\} \quad (\text{III, 150})$$

Здесь константы скорости реакции k_{12} и k_{22} находят при температуре на второй ступени реактора, а величина $x_A(\tau_1)$ определяется выражением [см. уравнение (II, 178)]:

$$x_A(\tau_1) = x_A^{(0)} \exp[-(k_{11} + k_{21})\tau_1] \quad (\text{III, 151})$$

На выходе второй секции реактора значение концентрации продукта P , принимаемой в данном случае в качестве критерия оптимальности режима аппарата, описывается как

$$R = x_P(\tau) = x_P(\tau_1) + \bar{x}_P(\tau_2) \quad (\text{III, 152})$$

Подставляя выражение (III, 151) в соотношение (III, 150) и принимая во внимание, что

$$\tau_2 = \tau - \tau_1 \quad (\text{III, 153})$$

после подстановки формул (III, 149) и (III, 150) в выражение (III, 152) получим:

$$R = \frac{k_{11}x_A^{(0)}}{k_{11} + k_{21}} \{1 - \exp[-(k_{11} + k_{21})\tau_1]\} + \frac{k_{12}x_A^{(0)}}{k_{12} + k_{22}} \{1 - \exp[-(k_{12} + k_{22})(\tau - \tau_1)]\} \exp[-(k_{11} + k_{21})\tau_1] \quad (\text{III, 154})$$

Запись уравнения (III, 154) можно несколько упростить, если ввести следующие обозначения

$$k_{11} = k_0 z_1 \quad (\text{III, 155})$$

$$k_{12} = k_0 z_2 \quad (\text{III, 156})$$

где z и k_0 , как и раньше, определяются формулами (III, 134) и (III, 135), а величина

$$\sigma_i = \frac{k_{1i}}{k_{1i} + k_{2i}} \quad (\text{III, 157})$$

имеет смысл селективности для рассматриваемой реакции (III, 147).

С учетом обозначений (III, 155)–(III, 157) выражение для критерия оптимальности (III, 154) переписывается в виде:

$$R = x_A^{(0)} \left\{ \sigma_1 - (\sigma_1 - \sigma_2) \exp\left(-\frac{z_1}{\sigma_1} k_0 \tau_1\right) - \sigma_2 \exp\left[\left(\frac{z_2}{\sigma_2} - \frac{z_1}{\sigma_1}\right) k_0 \tau_1 - \frac{z_2}{\sigma_2} k_0 \tau\right] \right\} \quad (\text{III, 158})$$

Критерий оптимальности R , характеризуемый формулой (III, 158), может рассматриваться как функция одной независимой переменной τ_1 , оптимальное значение которой необходимо выбрать из условия максимума выражения (III, 158).

Дифференцируя формулу (III, 158), можно найти:

$$\frac{dR}{d\tau_1} = \sigma_2 k_0 x_A^{(0)} \exp\left(-\frac{z_1}{\sigma_1} k_0 \tau_1\right) \left\{ \frac{(\sigma_1 - \sigma_2) z_1}{\sigma_1 \sigma_2} - \left(\frac{z_2}{\sigma_2} - \frac{z_1}{\sigma_1}\right) \exp\left[-\frac{z_2}{\sigma_2} k_0 (\tau - \tau_1)\right] \right\} \quad (\text{III, 159})$$

Приравнявая производную (III, 159) нулю, получим следующее уравнение

$$\frac{(\sigma_1 - \sigma_2) z_1}{\sigma_1 \sigma_2} - \left(\frac{z_2}{\sigma_2} - \frac{z_1}{\sigma_1}\right) \exp\left[-\frac{z_2}{\sigma_2} k_0 (\tau - \tau_1)\right] = 0 \quad (\text{III, 160})$$

которое определяет значение τ_{1e} , отвечающее экстремуму критерия оптимальности R :

$$\tau_{1e} = \tau - \frac{\sigma_2}{k_0 z_2} \ln \frac{z_2 \sigma_1 - z \sigma_2}{(\sigma_1 - \sigma_2) z_1} \quad (\text{III, 161})$$

Анализ знака производной $dR/d\tau_1$ в окрестности значения τ_{1e} , характеризуемого формулой (III, 161), показывает, что это значение соответствует максимуму критерия оптимальности R лишь при условии выполнения неравенств:

$$\sigma_1 > \sigma_2 \quad (\text{III, 162})$$

$$\frac{z_2}{\sigma_2} > \frac{z_1}{\sigma_1} \quad (\text{III, 163})$$

Принимая во внимание формулы (III, 134) и (III, 155) — (III, 157), нетрудно найти, что эти неравенства эквивалентны следующим:

$$E_1 > E_2 \quad (\text{III, 164})$$

$$T_1 < T_2 \quad (\text{III, 165})$$

Условия (III, 164) и (III, 165) означают, что экстремальная величина критерия оптимальности R (III, 158) может быть максимумом только тогда, когда энергия активации основной реакции E_1 ниже энергии активации побочной реакции E_2 и температура второй ступени реактора T_2 выше температуры первой ступени T_1 . Во всех остальных случаях формула (III, 161) может определять либо минимум критерия оптимальности (III, 158), либо экстремум вообще отсутствует. Рассмотрим последовательно все возможные варианты:

а) Неравенства (III, 162) и (III, 163) или, что то же самое, (III, 164) и (III, 165) выполняются. Экстремум критерия оптимальности R существует и является максимумом. Максимизирующее значение τ_{1e} характеризуется формулой (III, 161).

Поскольку на выбор оптимального значения $\tau_{\text{опт}}$ наложены очевидные ограничения

$$0 \leq \tau_{\text{опт}} \leq \tau \quad (\text{III, 166})$$

при этом могут также представиться следующие случаи:

$$\tau_{1e} < 0 \quad (\text{III, 167a})$$

$$0 \leq \tau_{1e} \leq \tau \quad (\text{III, 167б})$$

$$\tau_{1e} > \tau \quad (\text{III, 167в})$$

Так как величина критерия оптимальности R при $\tau_1 < \tau_{1e}$ возрастает, а при $\tau_1 > \tau_{1e}$ убывает с увеличением τ_1 , то соответствующие этим трем вариантам оптимальные значения $\tau_{1, \text{опт}}$ определяются в виде:

$$\tau_{1, \text{опт}} = 0 \quad (\text{III}, 168a)$$

$$\tau_{1, \text{опт}} = \tau_{1e} \quad (\text{III}, 168б)$$

$$\tau_{1, \text{опт}} = \tau \quad (\text{III}, 168в)$$

б) Вместо неравенств (III, 162) и (III, 163) выполняются неравенства

$$\sigma_1 < \sigma_2 \quad (\text{III}, 169)$$

$$\frac{z_2}{\sigma_2} < \frac{z_1}{\sigma_1} \quad (\text{III}, 170)$$

которые эквивалентны условиям:

$$E_1 < E_2 \quad (\text{III}, 171)$$

$$T_1 > T_2 \quad (\text{III}, 172)$$

Экстремум критерия оптимальности существует, но является минимумом. Минимизирующее значение τ_{1e} определяется формулой (III, 161). При этом могут быть также случаи, характеризующиеся соотношениями (III, 167a) — (III, 167в).

Так как величина критерия оптимальности R при $\tau_1 < \tau_{1e}$ убывает, а при $\tau_1 > \tau_{1e}$ возрастает с увеличением τ_1 , то соответствующие формулам (III, 167a) и (III, 167в) оптимальные значения $\tau_{1, \text{опт}}$ записываются в виде:

$$\tau_{1, \text{опт}} = \tau \quad (\text{III}, 173a)$$

$$\tau_{1, \text{опт}} = 0 \quad (\text{III}, 173в)$$

Для случая (III, 167б) оптимальная величина $\tau_{1, \text{опт}}$ находится путем выбора наибольшего значения критерия оптимальности, рассчитываемого при $\tau_1 = 0$ и $\tau_1 = \tau$.

в) Вместо неравенств (III, 162) и (III, 163) выполняются неравенства

$$\sigma_1 > \sigma_2 \quad (\text{III}, 174)$$

$$\frac{z_2}{\sigma_2} < \frac{z_1}{\sigma_1} \quad (\text{III}, 175)$$

эквивалентные условиям:

$$E_1 > E_2 \quad (\text{III}, 176)$$

$$T_1 > T_2 \quad (\text{III}, 177)$$

Экстремума критерия оптимальности в данном случае не существует, поскольку выражение под знаком логарифма в формуле (III, 161) отрицательно и значение τ_{1e} , определяемое этой формулой, не имеет смысла. Производная $dR/d\tau_1$ при этом сохраняет положительное значение при любой величине τ_1 и, следовательно, величина критерия оптимальности может только увеличиваться с возрастанием значения τ_1 . Таким образом, оптимальное значение $\tau_{1, \text{опт}}$ будет равно:

$$\tau_{1, \text{опт}} = \tau \quad (\text{III}, 178)$$

г) Вместо неравенств (III, 162) и (III, 163) выполняются неравенства

$$\sigma_1 < \sigma_2 \quad (\text{III}, 179)$$

$$\frac{z_2}{\sigma_2} > \frac{z_1}{\sigma_1} \quad (\text{III}, 180)$$

эквивалентные условиям:

$$E_1 > E_2 \quad (\text{III}, 181)$$

$$T_1 < T_2 \quad (\text{III}, 182)$$

Экстремума критерия оптимальности, как и в предыдущем случае, не существует. Однако производная $dR/d\tau_1$ сохраняет отрицательное значение при любой величине τ_1 и, следовательно, критерий оптимальности уменьшается с увеличением значения τ_1 . Таким образом, оптимальное значение $\tau_{1, \text{опт}}$ будет равно:

$$\tau_{1, \text{опт}} = 0 \quad (\text{III}, 183)$$

Интересно отметить, что для случая, когда экстремальная величина критерия оптимальности характеризуется значением $\tau_{1, \text{опт}}$ (III, 1686), время пребывания реагентов во второй ступени реактора $\tau_{2, \text{опт}}$ не зависит от общего времени пребывания τ , а определяется лишь температурами обеих ступеней и кинетическими константами реакции:

$$\tau_{2, \text{опт}} = \frac{\sigma_2}{k_0 z_2} \ln \frac{z_2 \sigma_1 - z_1}{(\sigma_1 - \sigma_2) z_1} \quad (\text{III}, 184)$$

Таким образом, при изменении общего времени пребывания реагентов в двухступенчатом изотермическом реакторе для сохранения наибольшего выхода продукта P время пребывания на второй ступени $\tau_{2, \text{опт}}$ должно оставаться постоянным и равным величине, характеризующей формулой (III, 184).

Пример III-10. Пусть протекают те же реакции, что и в предыдущем примере. Предположим, что задачей оптимизации является нахождение минимального объема изотермического двухступенчатого реактора идеального вытеснения, в котором требуется достигнуть заданного выхода продукта реакции P , т. е. для определенной нагрузки на реактор v получить на выходе его продукт с заданной концентрацией $x_P(\tau)$.

Решение. Критерием оптимальности, минимальное значение которого следует найти, является выражение:

$$R = \tau_1 + \tau_2 \quad (\text{III}, 185)$$

В качестве независимой переменной, оптимальное значение которой нужно рассчитать при решении задачи оптимизации, для этого случая удобно ввести концентрацию исходного реагента A на выходе первой ступени реактора $x_A^{(1)} = x_A^{(1)}(\tau_1)$. При этом величина τ_1 как функция значения $x_A^{(1)}$ определится из уравнения (III, 151):

$$\tau_1 = \frac{\sigma_1}{k_0 z_1} \ln \frac{x_A^{(0)}}{x_A^{(1)}} \quad (\text{III}, 186)$$

Значение τ_2 , в свою очередь, может быть вычислено из формулы (III, 150), если принять во внимание, что

$$x_P(\tau_2) = x_P(\tau) - x_P(\tau_1) = x_P^{(k)} - x_P^{(1)} \quad (\text{III}, 187)$$

и

$$x_P^{(1)} = \sigma_1 (x_A^{(0)} - x_A^{(1)}) \quad (\text{III}, 188)$$

где $x_P^{(k)}$ рассматривается как заданная величина.

В результате можно найти:

$$\tau_2 = \frac{\sigma_2}{k_0 z_2} \ln \frac{\sigma_2 x_A^{(1)}}{\sigma_1 x_A^{(0)} - (\sigma_1 - \sigma_2) x_A^{(1)} - x_P^{(k)}} \quad (\text{III}, 189)$$

Подстановка выражения (III, 186) и (III, 189) в формулу (III, 185) позволяет получить в явном виде зависимость критерия оптимальности R от

концентрации исходного реагента $x_A^{(1)}$ на выходе первой ступени:

$$R = \frac{1}{k_0} \left\{ \frac{\sigma_1}{z_1} \ln \frac{x_A^{(0)}}{x_A^{(1)}} + \frac{\sigma_2}{z_2} \ln \frac{\sigma_2 x_A^{(1)}}{\sigma_1 x_A^{(0)} - (\sigma_1 - \sigma_2) x_A^{(1)} - x_P^{(k)}} \right\} \quad (\text{III, 190})$$

В результате дифференцирования выражения (III, 190) по $x_A^{(1)}$ найдем:

$$\frac{dR}{dx_A^{(1)}} = \frac{1}{k_0 x_A^{(1)}} \left[\frac{\sigma_2}{z_2} \cdot \frac{\sigma_1 x_A^{(0)} - x_P^{(k)}}{\sigma_1 x_A^{(0)} - (\sigma_1 - \sigma_2) x_A^{(1)} - x_P^{(k)}} - \frac{\sigma_1}{z_1} \right] \quad (\text{III, 191})$$

Приравнявая производную $dR/dx_A^{(1)}$ нулю и решая полученное уравнение относительно $x_A^{(1)}$, будем иметь:

$$x_A^{(1)} = \frac{z_2 \sigma_1 - z_1 \sigma_2}{(\sigma_1 - \sigma_2) z_2} \left(x_A^{(0)} - \frac{x_P^{(k)}}{\sigma_1} \right) \quad (\text{III, 192})$$

Анализ выражений (III, 191) и (III, 192) дает возможность выделить те же случаи, что и в рассмотренной выше иной постановке задачи оптимизации, и вывести аналогичные формулы для определения оптимального времени пребывания реагентов на первой или второй ступенях реактора. Так, при подстановке выражения (III, 192) в формулу (III, 189) получим соотношение для расчета оптимального времени пребывания на второй ступени реактора

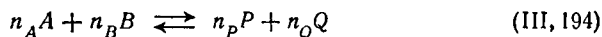
$$\tau_{2, \text{опт}} = \frac{\sigma_2}{k_0 z_2} \ln \frac{z_2 \sigma_1 - z_1 \sigma_2}{(\sigma_1 - \sigma_2) z_1} \quad (\text{III, 193})$$

которое в точности совпадает с аналогичным соотношением (III, 184) предыдущего примера.

В промышленных условиях, главным образом для реакций, проводимых в газовой фазе, например в производстве серной кислоты при окислении SO_2 в SO_3 , при синтезе аммиака, конверсии CO и т. п., часто используют адиабатические реакторы вытеснения. Поэтому решение задач оптимизации для таких процессов представляет собой весьма актуальную проблему, в особенности важную в связи с тем, что перечисленные процессы, как правило, относятся к многотоннажным производствам.

Однако прежде чем перейти к разбору примеров оптимизации адиабатических реакторов, необходимо остановиться на некоторых общих свойствах обратимых экзотермических реакций, осуществляемых в адиабатических условиях.

Рассмотрим общий случай обратимой реакции:



Как уже отмечалось выше (см. пример III-8), состояние реагирующей смеси для этой реакции однозначно определяется степенью превращения исходного реагента κ_A . Поэтому характер изменения концентраций всех реагентов по длине реактора идеального вытеснения может быть найден в результате решения уравнения

$$\frac{dx_A}{d\tau} = w^*(T, \kappa_A) \quad (\text{III, 195})$$

описывающего изменение степени превращения реагента A , где $w^*(T, \kappa_A)$ представляет собой скорость изменения κ_A в сечении реактора, выраженную через температуру и степень превращения в этом сечении.

При интегрировании уравнения (III, 195) необходимо учитывать закон изменения температуры по длине реактора $T(\tau)$, который целиком определяется используемым аппаратным оформлением процесса.

Для адиабатического процесса характерным является то, что температура реагирующей смеси в зоне реакции изменяется линейно с возрастанием степени превращения κ_A в соответствии с соотношением:

$$T = T^{(0)} + \Delta T_{\text{ад}} \kappa_A \quad (\text{III, 196})$$

в котором $T^{(0)}$ — температура исходной смеси, подаваемой в реактор; $\Delta T_{\text{ад}}$ — адиабатическое повышение температуры смеси при полном превращении исходного реагента A (предполагается, что реагент B подается на реакцию в достаточном количестве).

Таким образом, для обратимых экзотермических реакций температура смеси повышается по мере увеличения степени превращения исходных реагентов при проведении реакции в адиабатических условиях. Это обстоятельство, с одной стороны, находится в противоречии с оптимальными условиями процесса (см. пример III-8), согласно которым оптимальным температурным режимом является режим с понижением температуры при возрастании степени превращения (см. рис. III-14).

С другой стороны, наличие зависимости (III, 196) вызывает определенные трудности в аппаратном оформлении адиабатического процесса для обратимых экзотермических реакций. Действительно, если для заданной степени превращения в реакторе κ_A равновесная температура реагирующей смеси равна T_e , то на основании соотношения (III, 196) температура на входе аппарата должна быть выбрана такой, чтобы выполнялось условие:

$$T^{(0)} < T_e - \Delta T_{\text{ад}} \kappa_A \quad (\text{III, 197})$$

В противном случае степень превращения κ_A просто недостижима из-за разогрева реагирующей смеси в процессе реакции до равновесной температуры T_e . Если же входная температура $T^{(0)}$ смеси выбирается с учетом условия (III, 197), то для достижения нужной степени превращения в реакторе κ_A значение $T^{(0)}$ может оказаться таким низким, что реакция вообще не пойдет при данной температуре либо потребуются чрезмерное увеличение размеров аппарата вследствие малой скорости реакции в его начале.

Чтобы избежать этого, применяют ступенчатый адиабатический реактор с промежуточным охлаждением реагирующей смеси между ступенями; схематическое изображение аппарата показано на рис. III-16. На рис. III-17 приведен также характер изменения

температуры реагирующей смеси в таком реакторе. Наличие промежуточного теплообмена между секциями позволяет увеличить температуру реакции на первых ступенях, что обеспечивает высокую скорость реакции при малых степенях превращения и, тем самым, дает возможность существенно уменьшить общий объем реактора, необходимый для достижения заданной конечной степени превращения, по сравнению с одноступенчатым реактором.

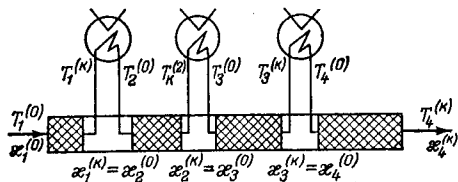


Рис. III-16. Схематическое изображение ступенчатого адиабатического реактора с промежуточным теплоотводом.

Особенно важно это для контактно-каталитических процессов, у которых затраты на катализатор прямо пропорциональны требуемому времени пребывания реагентов аппарате для его заданной производительности.

Эффективность работы ступенчатого адиабатического реактора, в котором проводится соответствующая обратимая реакция,

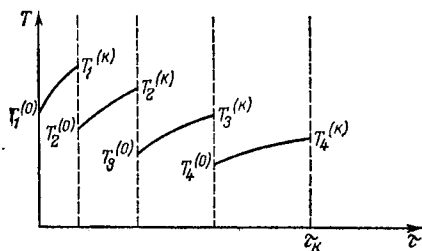


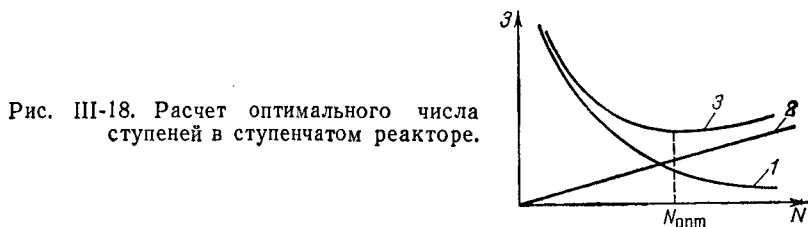
Рис. III-17. Изменение температуры по ступеням адиабатического реактора с промежуточным теплоотводом для экзотермической реакции.

зависит от того, сколько ступеней имеет аппарат, как выбраны входные температуры реагирующей смеси для каждой ступени $T_i^{(0)}$ ($i = 1, \dots, N$), каково общее время пребывания реагентов в реакторе τ и как распределено это время по ступеням. Задание всех указанных параметров однозначно характеризует режим работы аппарата, а их определение может явиться предметом постановки и решения задачи оптимизации.

Задачу оптимизации для такого реактора можно сформулировать различно, в зависимости от того, какая цель при этом преследуется. Например, для заданного общего времени пребывания τ и заданного числа ступеней N необходимо найти входные температуры ступеней $T_i^{(0)}$ ($i = 1, \dots, N$) и время пребывания реагентов на каждой ступени τ_i ($i = 1, \dots, N$) так, чтобы общая степень превращения в реакторе x_A была максимальной. Иная постановка оптимальной задачи заключается в требовании достижения заданной степени превращения x_A при минимальном

общем времени пребывания реагентов в аппарате и заданном числе ступеней.

Возможна также постановка оптимальной задачи, в которой требуется определить оптимальное число ступеней в реакторе. Правда, в последнем случае в качестве критерия оптимальности нужно использовать экономические оценки эффективности процесса, включающие стоимость затрат на дополнительное оборудование при увеличении числа ступеней аппарата. Очевидно, что оптимальным в смысле эффективности применения катализатора является ступенчатый реактор с бесконечно большим числом ступеней, так как при этом результирующий температурный профиль реактора приближается к оптимальному профилю для одноступенчатого реактора идеального вытеснения (см. рис. III-14).



Однако для такого реактора весьма существенными могут оказаться дополнительные затраты на организацию ступеней, которые в первом приближении можно принять пропорциональными их числу. Если в координатах «затраты Z — число ступеней N » построить зависимость затрат на катализатор (рис. III-18, кривая 1), то указанная зависимость будет иметь монотонно убывающий характер. Это объясняется тем, что при неограниченном увеличении числа ступеней в аппарате, рассчитываемом, например, на заданную степень превращения, температурный профиль приближается к оптимальному и обеспечивается более эффективное использование катализатора. С другой стороны, с увеличением числа ступеней возрастают расходы на аппаратное оформление промежуточного теплоотвода (рис. III-18, кривая 2). Суммарные затраты в этом случае имеют выраженный минимум (рис. III-18, кривая 3), положение которого и отвечает оптимальному числу ступеней реактора $N_{\text{опт}}$. Вместе с тем, при построении зависимости затрат на катализатор от числа ступеней реактора, рассчитываемого, например, на заданную степень превращения, необходимо для каждого значения числа ступеней минимизировать требуемое количество катализатора соответствующим выбором входных температур ступеней и их размеров. Эта задача оптимизации и рассматривается в приведенном ниже примере.

Пример III-11. Для обратимой экзотермической реакции (III, 194), проводимой в ступенчатом адиабатическом реакторе идеального вытеснения, имеющем N ступеней, найти минимальное время пребывания τ реагентов в аппарате

и распределение его по ступеням, обеспечивающее заданную степень превращения κ_A исходного реагента A .

Решение. Критерий оптимальности в данном случае имеет вид:

$$R = \tau = \sum_{i=1}^N \tau_i \quad (\text{III, 198})$$

Характер изменения температуры на i -й ступени определяется зависимостью:

$$T_i = T_i^{(0)} + \Delta T_{\text{ад}} (\kappa_i - \kappa_i^{(0)}) \quad (\text{III, 199})$$

Если принять, что температура на входе i -й ступени определена и заданы также степени превращения на входе i -й ступени $\kappa_i^{(0)}$ и ее выходе $\kappa_i^{(k)}$, то с учетом формулы (III, 199) и уравнения (III, 195) можно записать следующее выражение для времени пребывания τ_i на этой ступени:

$$\tau_i = \int_{\kappa_i^{(0)}}^{\kappa_i^{(k)}} \frac{d\kappa}{w^* [T_i^{(0)} + \Delta T_{\text{ад}} (\kappa - \kappa_i^{(0)})]} \quad (\text{III, 200})$$

Принимая во внимание, что для ступенчатого реактора с промежуточным теплоотводом справедливы соотношения

$$\kappa_i^{(k)} = \kappa_{i+1}^{(0)} \quad (\text{III, 201})$$

т. е. степень превращения на выходе i -й ступени равна степени превращения на входе следующей $(i+1)$ -й ступени, выражение (III, 200) можно представить также в виде:

$$\tau_i (\kappa_i^{(0)}, \kappa_{i+1}^{(0)}, T_i^{(0)}) = \int_{\kappa_i^{(0)}}^{\kappa_{i+1}^{(0)}} \frac{d\kappa}{w^* [T_i^{(0)} + \Delta T_{\text{ад}} (\kappa - \kappa_i^{(0)})]} \quad (\text{III, 202})$$

На основании выражения (III, 202) величину τ_i можно считать функцией значений трех величин $\kappa_i^{(0)}$, $\kappa_{i+1}^{(0)}$, $T_i^{(0)}$, а критерий оптимальности, определяемый формулой (III, 198), в свою очередь, может рассматриваться как функция $2N+1$ переменных:

$$R (\kappa_1^{(0)}, \kappa_2^{(0)}, \dots, \kappa_{N+1}^{(0)}, T_1^{(0)}, T_2^{(0)}, \dots, T_N^{(0)}) = \sum_{i=1}^N \tau_i (\kappa_i^{(0)}, \kappa_{i+1}^{(0)}, T_i^{(0)}) \quad (\text{III, 203})$$

где $\kappa_{N+1}^{(0)}$ представляет собой степень превращения на выходе последней N -й ступени реактора.

Так как значения степени превращения на входе аппарата $\kappa_1^{(0)}$ и его выходе $\kappa_{N+1}^{(0)}$ в разбираемой постановке оптимальной задачи можно полагать заданными, критерий оптимальности R для этого случая является функцией $2N-1$ переменных

$$\left. \begin{array}{ll} \kappa_i^{(0)} & i = 2, \dots, N \\ T_i^{(0)} & i = 1, \dots, N \end{array} \right\} \quad (\text{III, 204})$$

совокупность значений которых с учетом выражения (III, 202) полностью характеризует реактор и которые при решении оптимальной задачи должны приниматься как независимые переменные.

Экстремальное значение критерия оптимальности R теперь может быть найдено решением системы уравнений:

$$\frac{\partial R}{\partial \kappa_i^{(0)}} = 0 \quad i = 2, \dots, N \quad (\text{III, 205})$$

$$\frac{\partial R}{\partial T_i^{(0)}} = 0 \quad i = 1, \dots, N \quad (\text{III, 206})$$

Принимая во внимание вид функции R (III, 203), нетрудно показать, что система уравнений (III, 205) и (III, 206) эквивалентна следующей:

$$\frac{\partial \tau_{i-1}}{\partial \kappa_i^{(0)}} + \frac{\partial \tau_i}{\partial \kappa_i^{(0)}} = 0 \quad i = 2, \dots, N \quad (\text{III, 207})$$

$$\frac{\partial \tau_i}{\partial T_i^{(0)}} = 0 \quad i = 1, \dots, N \quad (\text{III, 208})$$

Производные в системе уравнений (III, 207) и (III, 208) могут быть вычислены из формулы (III, 202):

$$\frac{\partial \tau_{i-1}}{\partial \kappa_i^{(0)}} = \frac{1}{w^* [T_{i-1}^{(0)} + \Delta T_{\text{ад}} (\kappa_i^{(0)} - \kappa_{i-1}^{(0)}), \kappa_i^{(0)}]} \quad (\text{III, 209})$$

$$\frac{\partial \tau_i}{\partial \kappa_i^{(0)}} = - \frac{1}{w^* [T_i^{(0)}, \kappa_i^{(0)}]} - I \Delta T_{\text{ад}} \quad (\text{III, 210})$$

$$I = \frac{\partial \tau_i}{\partial T_i^{(0)}} = - \int_{\kappa_i^{(0)}}^{\kappa_{i+1}^{(0)}} \frac{dw^*}{dT} \cdot \frac{\partial \kappa}{(w^*)^2} \quad (\text{III, 211})$$

Подставляя выражения (III, 209) — (III, 211) в систему уравнений (III, 207) и (III, 208), получим соотношения

$$w^* (T_{i-1}^{(k)}, \kappa_i^{(0)}) = w^* (T_i^{(0)}, \kappa_i^{(0)}) \quad i = 2, \dots, N \quad (\text{III, 212})$$

$$\int_{\kappa_i^{(0)}}^{\kappa_{i+1}^{(0)}} \frac{dw^*}{dT} \cdot \frac{\partial \kappa}{(w^*)^2} = 0 \quad i = 1, \dots, N \quad (\text{III, 213})$$

которые используют для оптимизации реактора рассматриваемого типа [3].

Соотношение (III, 213) совпадает с выражением (III, 120), использованным в примере III-8 для расчета оптимального температурного профиля в реакторе идеального вытеснения при той же реакции. Однако если в примере III-8 из этого соотношения выводилось условие максимизации скорости реакции, что эквивалентно требованию обращения в нуль производной $\partial w^*/\partial T$ в подынтегральном выражении во всем интервале интегрирования, то в рассматриваемом случае подынтегральное выражение не может обращаться тождественно в нуль во всем интервале, так как на основании зависимости (III, 199) температура в зоне реакции определенным образом связана со степенью превращения.

Интеграл (III, 213) обращается в нуль только тогда, когда подынтегральное выражение изменяет знак в интервале интегрирования. Очевидно, что изменение знака подынтегрального выражения возможно лишь, если производная $\partial w^*/\partial T$ изменяет знак в этом интервале, т. е. скорость реакции w^* внутри интервала при своем изменении проходит через максимальное значение.

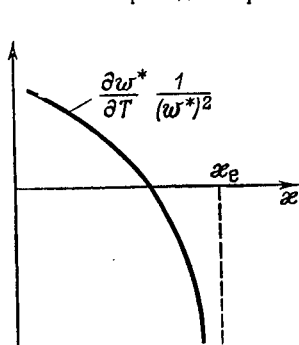


Рис. III-19. Характер зависимости подынтегрального выражения (III, 213) от степени превращения x .

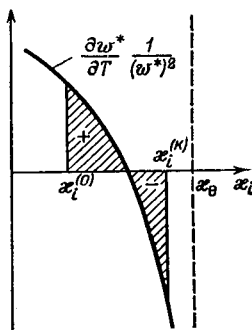


Рис. III-20. Определение оптимальной степени превращения на выходе ступени реактора.

Примерный вид кривой изменения подынтегрального выражения для этого случая показан на рис. III-19. В области отрицательных значений подынтегральное выражение

$$\frac{\partial w^*}{\partial T} \cdot \frac{1}{(w^*)^2}$$

рассматриваемое как функция x , стремится к $-\infty$ при увеличении значения x , поскольку с возрастанием x скорость реакции стремится к нулю за счет приближения температуры к равновесной.

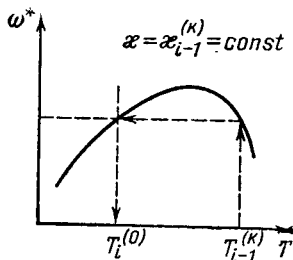


Рис. III-21. Определение оптимальной температуры на входе следующей ступени реактора.

Таким образом, если степень превращения на входе i -й ступени известна, то при условии, что температура на входе этой ступени $T_i^{(0)}$ выбрана ниже оптимальной для данной степени превращения, всегда можно так подобрать значение степени превращения на выходе ступени $x_i^{(k)} = x_{i+1}^{(0)}$, чтобы условие (III, 213) выполнялось. Это достигается выбором такого значения $x_{i+1}^{(0)}$, чтобы площади, заштрихованные на рис. III-20 и помеченные знаками (+) и (-), были равны.

Условие (III, 212), в свою очередь, позволяет выбрать оптимальную температуру на входе ступени, если известно значение температуры на выходе предыдущей ступени $T_{i-1}^{(k)}$. Порядок указанного расчета иллюстрируется рис. III-21, где представлена зависимость скорости реакции от температуры при постоянной степени превращения.

Очевидно, что условие (III, 212) может быть использовано для определения входных температур всех секций, за исключением первой. Значение входной температуры для первой секции $T_1^{(0)}$ при этом нужно выбрать таким, чтобы в реакторе достигалась заданная конечная степень превращения. Поэтому на первом этапе расчета аппарата величина $T_1^{(0)}$ задается произвольно и в дальнейшем уточняется по результатам нахождения степени превращения на выходе последней ступени реактора. Порядок расчета при этом следующий:

1. Задается значение температуры на входе первой ступени $T_1^{(0)}$.

2. Так как степень превращения на входе реактора $x_1^{(0)}$ может считаться известной, соотношение (III, 213) позволяет определить оптимальное значение (для этого цикла расчета) степени превращения на выходе первой ступени и соответствующее ей значение температуры $T_1^{(k)}$.

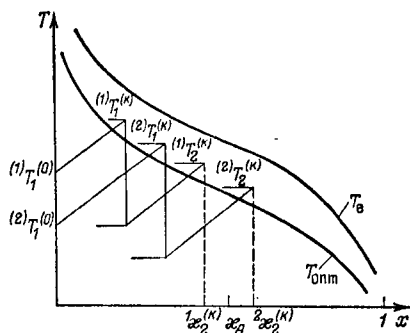


Рис. III-22. Температурные профили ступенчатого адиабатического реактора для обратимой экзотермической реакции, построенные в координатах «степень превращения — температура».

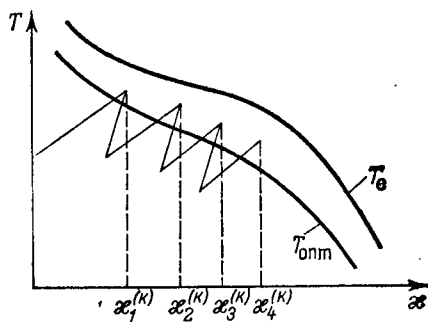


Рис. III-23. Характер оптимального температурного профиля ступенчатого адиабатического реактора с подачей на ступени части исходного сырья.

3. С помощью условия (III, 212) находится оптимальная входная температура следующей секции.

4. Условие (III, 213) определяет степень превращения и температуру на выходе этой секции.

5. Пункты (3) и (4) повторяют до тех пор, пока не будет рассчитано заданное число ступеней реактора. Если полученная в результате расчета степень превращения на выходе последней ступени окажется ниже заданной x_A , то цикл расчета повторяют, начиная с пункта (1) при уменьшенном значении $T_1^{(0)}$. Если же величина $x_N^{(k)}$ окажется выше заданной x_A , то входная температура первой ступени $T_1^{(0)}$ для следующего цикла расчета принимается более высокой. Циклы расчета повторяют, пока не подберут необходимое значение температуры на входе первой ступени, при котором в аппарате достигается заданная степень превращения x_A .

На рис. III-22 в координатах «степень превращения — температура» представлены результаты расчета двух циклов для двухступенчатого реактора.

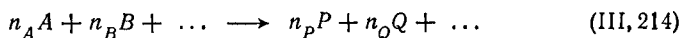
Иногда применяют и другой вариант ступенчатого адиабатического реактора с охлаждением реагирующей смеси между ступенями путем распределения между ними части исходного потока сырья. При этом между ступенями уменьшается не только температура реагирующей смеси, но и степень превращения вследствие

разбавления последней смесью исходных веществ [4]. Графическое изображение получаемого режима ступенчатого реактора в координатах «степень превращения — температура» показано на рис. III-23.

Использование зависимости селективности реакций от степени превращения для выбора оптимальных режимов процессов

Рассмотренные до сих пор методы и примеры решения задач оптимизации химических реакторов основывались на предположении об известном механизме химической реакции, проводимой в аппарате, тип которого задан в постановке оптимальной задачи. Вместе с тем, на практике часто встречаются случаи, когда исчерпывающая информация о механизме реакции в форме кинетических уравнений отсутствует. В таких случаях может оказаться полезной информация о химическом превращении, полученная в форме зависимости селективности реакции от степени превращения одного из исходных реагентов, участвующего в образовании полезного продукта сложной реакции [3].

Под *селективностью* сложной химической реакции, в которой наряду с образованием основного продукта P по уравнению



могут протекать также побочные реакции, сопровождающиеся расходом исходного реагента A , обычно понимается отношение

$$\sigma_P = \frac{n_A w_P}{n_P |w_A|} \quad (\text{III}, 215)$$

в котором w_P — скорость образования основного продукта реакции; $|w_A|$ — скорость расходования исходного продукта A ; n_A , n_P — стехиометрические коэффициенты в уравнении основной реакции (III, 214).

Очевидно, что для реакции, в которой побочные продукты не образуются, селективность, определенная согласно формуле (III, 125), равна единице. Поскольку селективность реакции σ_P в общем случае зависит от состава реагирующей смеси, анализируя эту зависимость, иногда можно выявить условия, при которых следует ожидать высокого выхода продукта P . В частности, если величина σ_P целиком характеризуется степенью превращения исходного реагента A , т. е.

$$\sigma_P = \sigma_P(x_A) \quad (\text{III}, 216)$$

имеется возможность довольно эффективного использования зависимости (III, 216) для решения задач выбора оптимальных условий проведения реакции, включая также выбор наилучшего типа реактора.

При экспериментальном определении вида зависимости (III, 216) можно применять реактор идеального смешения непре-

равного действия, изменяя в нем время пребывания исходного вещества A . При этом, рассчитывая селективность реакции для каждого значения степени превращения, можно использовать формулу

$$\sigma_P = \frac{n_A N_P}{n_P (N_A^{(0)} - N_A)} \quad (\text{III, 217})$$

в которой N_P — число молей продукта P , получаемых в единицу времени; $N_A^{(0)}$, N_A — число молей реагента A , подаваемых в реактор и отводимых из него с реакторным остатком в единицу времени.

Степень превращения для этого случая описывается выражением:

$$\kappa_A = \frac{N_A^{(0)} - N_A}{N_A^{(0)}} \quad (\text{III, 218})$$

Если для реакции известны кинетический механизм, а также зависимости скоростей w_A и w_P от состава, то, естественно, не составляет труда представить выражение (III, 216) в аналитической форме.

Пример III-12. Для параллельных химических реакций



где скорости образования w_P продукта P и расходования $|w_A|$ продукта A определяются уравнениями

$$w_P = n_P k_1 x_A^{n_{A1}} \quad (\text{III, 220})$$

$$|w_A| = n_{A1} k_1 x_A^{n_{A1}} + n_{A2} k_2 x_A^{n_{A2}} \quad (\text{III, 221})$$

найти зависимость селективности реакции от степени превращения реагента A .

Решение. Подставляя в формулу (III, 215) выражения (III, 220) и (III, 221), получим:

$$\sigma_P = \frac{n_{A1}}{n_P} \frac{n_P k_1 x_A^{n_{A1}}}{n_{A1} k_1 x_A^{n_{A1}} + n_{A2} k_2 x_A^{n_{A2}}} \quad (\text{III, 222})$$

Воспользовавшись связью между степенью превращения реагента A и его концентрацией

$$x_A = x_A^{(0)} (1 - \kappa_A) \quad (\text{III, 223})$$

соотношение (III, 222) можно записать в виде:

$$\sigma_P(\kappa_A) = \frac{1}{1 + v(1 + \kappa_A)^n} \quad (\text{III, 224})$$

Здесь введены обозначения:

$$n = n_{A_1} - n_{A_2} \quad (\text{III}, 225)$$

$$v = \frac{n_{A_2} k_2}{n_{A_1} k_1} (x_A^{(0)})^{n_{A_2} - n_{A_1}} \quad (\text{III}, 226)$$

Проанализируем характер полученной зависимости (III, 224) от величины x_A , для чего найдем выражение производной $d\sigma_P/dx_A$ и исследуем его знак. Выполняя дифференцирование, получим:

$$\frac{d\sigma_P}{dx_A} = \frac{nv(1-x_A)^{n-1}}{[1+v(1-x_A)^n]^2} \quad (\text{III}, 227)$$

Поскольку величина v всегда положительна, а $x_A \leq 1$, знак производной (III, 227) совпадает со знаком величины n , определяемой как разность порядков

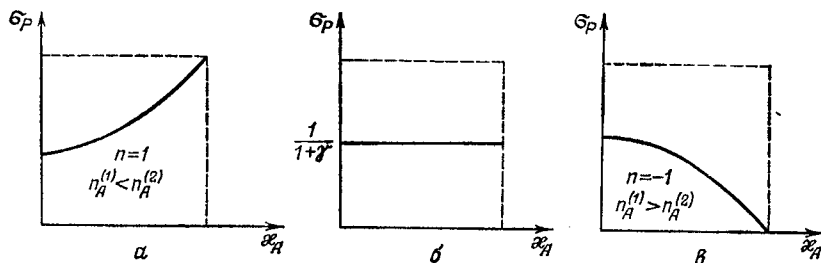


Рис. III-24 Зависимость селективности реакции от степени превращения для процессов с различным соотношением порядков основной и побочной параллельных реакций.

побочной и основной реакций формулой (III, 225). При этом, если $n < 0$, т. е. порядок основной реакции выше порядка побочной

$$n_{A_1} > n_{A_2} \quad (\text{III}, 228a)$$

то $\frac{d\sigma_P}{dx_A} < 0$ и селективность реакции монотонно убывает с увеличением степени превращения. Если же $n > 0$, т. е.

$$n_{A_1} < n_{A_2} \quad (\text{III}, 228б)$$

то $\frac{d\sigma_P}{dx_A} > 0$ и селективность реакции монотонно возрастает с увеличением степени превращения исходного реагента.

Из выражений (III, 224) следует, что

$$\sigma_P(0) = \frac{1}{1+v} \quad (\text{III}, 229)$$

$$\sigma_P(1) = \begin{cases} 1 & \text{при } n > 0 \\ \frac{1}{1+v} & \text{при } n = 0 \\ 0 & \text{при } n < 0 \end{cases} \quad (\text{III}, 230)$$

На рис. III-24 показан вид зависимости (III, 224) для различных значений величины n . На рис. III-24, б представлен случай $n = 0$, т. е. равенства порядков основной и побочной реакций. Для него селективность реакции σ_P вообще не зависит от степени превращения x_A .

Рассмотрим, каким образом может использоваться зависимость селективности реакции от степени превращения для определения выхода продукта P в реакторе заданного типа.

Для реактора идеального смешения непрерывного действия можно записать следующие уравнения материальных балансов исходного реагента A и продукта реакции P :

$$v(x_A^{(0)} - x_A) = V |w_A| \quad (\text{III, 231})$$

$$vx_P = Vw_P \quad (\text{III, 232})$$

Определим выход продукта P соотношением

$$\psi_P = \frac{n_A}{n_P} \frac{vx_P}{vx_A^{(0)}} = \frac{n_A}{n_P} \frac{x_P}{x_A^{(0)}} \quad (\text{III, 233})$$

которое может рассматриваться как отношение выхода продукта в реальных условиях $vx_P/vx_A^{(0)}$ к стехиометрическому выходу n_P/n_A , возможному при отсутствии побочных реакций и полном превращении исходного реагента A .

Поделив почленно уравнение (III, 232) на уравнение (III, 231), получим:

$$\frac{x_P}{x_A^{(0)} - x_A} = \frac{w_P}{|w_A|} \quad (\text{III, 234})$$

Принимая во внимание для степени превращения

$$\kappa_A = \frac{x_A^{(0)} - x_A}{x_A^{(0)}} \quad (\text{III, 235})$$

а также соотношение (III, 233) и определение селективности (III, 215), из выражения (III, 234) найдем

$$\psi_P^{(1)} = \sigma_P^{(1)} \kappa_A^{(1)} \quad (\text{III, 236})$$

где индекс (1) указывает на то, что анализируется единичный реактор идеального смешения.

Проведем теперь аналогичный вывод для реактора идеального вытеснения. При этом уравнения материальных балансов для реагентов A и P запишутся в дифференциальной форме:

$$dx_A = w_A d\tau = - |w_A| d\tau \quad (\text{III, 237})$$

$$dx_P = w_P d\tau \quad (\text{III, 238})$$

Поделив почленно уравнение (III, 238) на уравнение (III, 237), получим:

$$\frac{dx_P}{dx_A} = - \frac{w_P}{|w_A|} \quad (\text{III, 239})$$

Так как дифференциал степени превращения $d\kappa_A$ связан с дифференциалом концентрации dx_A соотношением

$$d\kappa_A = -\frac{1}{x_A^{(0)}} dx_A \quad (\text{III, 240})$$

то с учетом определения селективности (II, 215) выражение (III, 239) можно представить в виде:

$$\frac{n_A}{n_P} \frac{dx_P}{x_A^{(0)}} = \sigma_P d\kappa_A \quad (\text{III, 241})$$

Интегрированием левой части уравнения (III, 241) находим:

$$\frac{n_A}{n_P} \int_0^{x_P} \frac{dx_P}{x_A^{(0)}} = \frac{n_A x_P}{n_P x_A^{(0)}} = \Psi_P \quad (\text{III, 242})$$

Таким образом, соотношение (III, 241) после интегрирования обеих частей может быть записано как

$$\Psi_P = \int_0^{\kappa_A^{(k)}} \sigma_P d\kappa_A \quad (\text{III, 243})$$

что устанавливает искомую зависимость между селективностью реакции и выходом продукта P в реакторе идеального вытеснения.

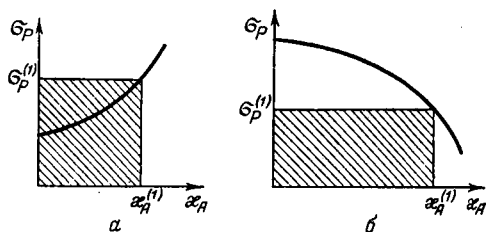


Рис. III-25. Выход продукта реакции в реакторе идеального смешения.

Полученные выражения (III, 236) и (III, 243) имеют наглядный геометрический смысл. Так, для реактора идеального смешения выражение (III, 236) определяет площадь прямоугольника, одна из вершин которого лежит на кривой $\sigma_P(\kappa_A)$, приведенной на рис. III-25. Для реактора идеального вытеснения интеграл в правой части уравнения (III, 243) определяет площадь под кривой $\sigma_P(\kappa_A)$, ограниченную абсциссой $\kappa_A = \kappa_A^{(k)}$ (рис. III-26).

Сравнение рис. III-25 с рис. III-26 показывает, что для случая, когда селективность реакции увеличивается с возрастанием степени превращения, больший выход дает реактор идеального смешения, поскольку площадь, характеризуемая выражением

(III-236) (рис. III-25, а), больше площади, определяемой уравнением (III, 243) (рис. III-26, а). Наоборот, если селективность реакции уменьшается с увеличением степени превращения (рис. III-25, б и рис. III-26, б), то предпочтительным оказывается реактор идеального вытеснения.

Зависимость селективности реакции от степени превращения может быть применена и для нахождения выхода в каскаде

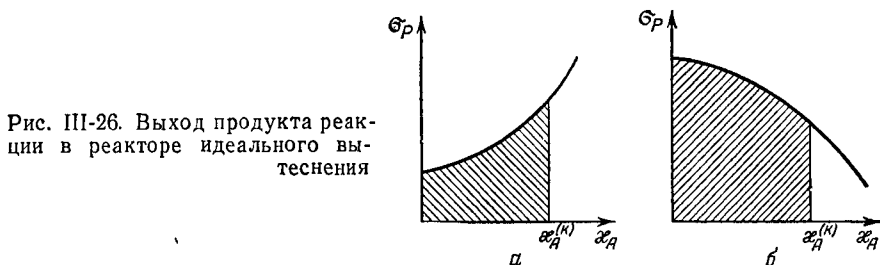


Рис. III-26. Выход продукта реакции в реакторе идеального вытеснения

реакторов идеального смешения. С этой целью прежде всего заметим, что соотношение (III, 236), как легко показать, может быть записано для произвольного i -го реактора каскада в следующем виде:

$$\psi_P^{(i)} - \psi_P^{(i-1)} = \sigma_P^{(i)} (x_A^{(i)} - x_A^{(i-1)}) \quad (\text{III, 244})$$

где $\psi_P^{(i)}$ — выход продукта P после i -го реактора; $\sigma_P^{(i)}$ — селективность реакции в i -ом реакторе; $x_A^{(i)}$ — степень превращения реагента A на выходе i -го реактора.

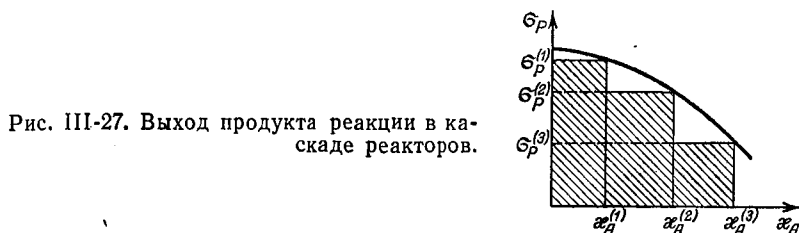


Рис. III-27. Выход продукта реакции в каскаде реакторов.

С учетом соотношения (III, 244) выражение для выхода продукта P в каскаде N реакторов идеального смешения можно представить как

$$\psi_P^{(N)} = \sum_{i=1}^N \sigma_P^{(i)} (x_A^{(i)} - x_A^{(i-1)}) \quad (\text{III, 245})$$

Геометрически оно определяет сумму площадей прямоугольников с площадью каждого численно равной выходу продукта P в соответствующем реакторе каскада (рис. III-27).

Выражение (III, 245) может быть использовано при расчете оптимального каскада реакторов, где для заданной конечной

степени превращения реагента A требуется обеспечить максимальный выход продукта P . Геометрически эта задача эквивалентна задаче выбора таких прямоугольников, у каждого из которых одна из вершин лежит на графике зависимости $\sigma_P(\kappa_A)$ и которые имели бы максимальную суммарную площадь. Ту же задачу можно сформулировать математически как задачу отыскания максимального значения функции $\psi_P^{(N)}$, определяемой выражением (III, 245) и рассматриваемой как функция $N-1$ переменных $\kappa_A^{(i)}$ ($i=1, \dots, N-1$). Дифференцирование выражения (III, 245) в этом случае дает систему уравнений

$$\frac{d\psi_P^{(N)}}{d\kappa_A^{(i)}} = -\sigma_P^{(i+1)} + \sigma_P^{(i)} + (\kappa_A^{(i)} - \kappa_A^{(i-1)}) \frac{d\sigma_P^{(i)}}{d\kappa_A^{(i)}} = 0 \quad i=1, \dots, N-1 \quad (\text{III, 246})$$

которой удовлетворяют искомые значения $\kappa_A^{(i)}$ ($i=1, \dots, N-1$), максимизирующие выход продукта P в каскаде при заданном значении конечной степени превращения $\kappa_A^{(N)}$ исходного реагента A .

Возможна и другая постановка оптимальной задачи, когда для заданного числа реакторов идеального смешения в каскаде требуется обеспечить максимальный выход продукта P . При этом к системе уравнений (III, 246) добавляется еще одно уравнение

$$\frac{\partial \psi_P^{(N)}}{\partial \kappa_A^{(N)}} = \sigma_P^{(N)} + (\kappa_A^{(N)} - \kappa_A^{(N-1)}) \frac{d\sigma_P^{(N)}}{d\kappa_A^{(N)}} = 0 \quad (\text{III, 247})$$

совместным решением которого с системой (III, 246) определяются оптимальные значения степени превращения для каждого из реакторов каскада.

Ниже рассмотрено несколько примеров нахождения оптимальных условий для параллельных реакций (III, 219), аналитическое выражение зависимости селективности от степени превращения для которых было получено в примере III-12.

Пример III-13. Для параллельных реакций (III, 219), характеризующихся следующими значениями констант

$$\left. \begin{array}{ll} n_{A_1} = n_P = 2 & n_{A_2} = 1 \\ k_1 = k_2 = 1 \text{ ч}^{-1} & x_A^{(0)} = 1 \end{array} \right\} \quad (\text{III, 248})$$

рассчитать оптимальную степень превращения, при которой в реакторе идеального смешения достигается максимальный выход продукта P .

Решение. Согласно определению выхода для одиночного реактора [см. уравнение (III, 236)] и найденному для указанных реакций выражению зависимости селективности от степени превращения (III, 224) имеем:

$$\psi_P = \frac{\kappa_A}{1 + v(1 - \kappa_A)^n} \quad (\text{III, 249})$$

Дифференцируя выражение (III, 249) по κ_A и приравнявая полученную производную нулю, получим уравнение

$$\frac{d\psi_P}{d\kappa_A} = \frac{1 + v(1 - \kappa_A)^n + nv\kappa_A(1 - \kappa_A)^{n-1}}{[1 + v(1 - \kappa_A)^n]^2} \quad (\text{III, 250})$$

откуда следует:

$$(1 - \kappa_A)^{1-n} + v(1 - n)(1 - \kappa_A) + nv = 0 \quad (\text{III, 250a})$$

Решение уравнения (III, 250a) в случае произвольного n не может быть найдено в аналитическом виде. В частном случае рассматриваемой оптимальной задачи

$$n = n_{A_2} - n_{A_1} = -1$$

уравнение (III, 250a) сводится к квадратному уравнению

$$(1 - \kappa_A)^2 + 2v(1 - \kappa_A) - v = 0 \quad (\text{III, 251})$$

решением которого будет

$$\kappa_{A, \text{опт}} = 1 + v - \sqrt{v(v+1)} \quad (\text{III, 252})$$

Легко проверить, что второе решение уравнения (III, 251) не удовлетворяет условию $0 \leq \kappa_A \leq 1$.

Оптимальное время пребывания реагентов в реакторе теперь можно рассчитать по формуле

$$\tau_{\text{опт}} = \frac{\kappa_{A, \text{опт}}}{n_{A_1} k_1 (x_A^{(0)})^{n_{A_1}-1} (1 - \kappa_{A, \text{опт}})^{n_{A_1}} + n_{A_2} k_2 (x_A^{(0)})^{n_{A_2}-1} (1 - \kappa_{A, \text{опт}})^{n_{A_2}}} \quad (\text{III, 253})$$

которая может быть получена из уравнения материального баланса реактора идеального смешения по реагенту А.

Для численных значений констант (III, 248) можно найти:

$$v = \frac{n_{A_2} k_2}{n_{A_1} k_1} (x_A^{(0)})^{n_{A_2}-n_{A_1}} = \frac{1 \cdot 1}{2 \cdot 1} 1^{-1} = 0,5 \quad (\text{III, 254a})$$

Подставляя значение v из уравнения (III, 254a) в формулу (III, 252), получим:

$$\kappa_{A, \text{опт}} = 1 + 0,5 - \sqrt{0,5(1+0,5)} = 0,634 \quad (\text{III, 254б})$$

Выход продукта P , достигаемый при найденной степени превращения, теперь может быть вычислен по формуле (III, 249):

$$\psi_P = \frac{0,634}{1 + 0,5(1 - 0,634)^{-1}} = 0,634 \cdot 0,422 = 0,268 \quad (\text{III, 254в})$$

Наконец, подстановка численных значений величин в формулу (III, 253) позволяет рассчитать оптимальное время пребывания в реакторе:

$$\tau_{\text{опт}} = \frac{0,634}{2 \cdot 1 \cdot 1 (1 - 0,634)^2 + 1 \cdot 1 \cdot 1 (1 - 0,634)} = 1 \text{ ч} \quad (\text{III, 254г})$$

Пример III-14. Определить оптимальное время пребывания в каскаде двух реакторов идеального смешения для заданной конечной степени превращения $\kappa_A = 0,634$, найденной в предыдущем примере для одиночного реактора.

Решение. Для этой постановки оптимальной задачи требуется вычислить степень превращения в первом реакторе, для чего используется лишь одно уравнение системы (III, 246), которое записывается следующим образом:

$$-\sigma_P^{(2)} + \sigma_P^{(1)} + \kappa_A^{(1)} \frac{d\sigma_P^{(1)}}{d\kappa_A^{(1)}} = 0 \quad (\text{III, 255})$$

где $\sigma_P^{(2)}$ — заданная постоянная величина, так как степень превращения на выходе второго реактора каскада задана.

С учетом выражений для селективности реакции (III, 224) и ее производной по κ_A (III, 227) уравнение (III, 255) может быть представлено в форме:

$$-\sigma_P^{(2)} + \frac{1}{1 + v(1 - \kappa_A^{(1)})^n} + \kappa_A^{(1)} \frac{nv(1 - \kappa_A^{(1)})^{n-1}}{[1 + v(1 - \kappa_A^{(1)})^n]^2} = 0 \quad (\text{III, 256})$$

Для случая $n = -1$ уравнение (III, 256) упрощается и сводится к квадратному уравнению

$$(1 - \kappa_A^{(1)})^2 + 2v(1 - \kappa_A^{(1)}) - v \frac{1 + v\sigma_P^{(2)}}{1 - \sigma_P^{(2)}} = 0 \quad (\text{III, 257a})$$

единственное решение которого, удовлетворяющее условию $0 \leq \kappa_A \leq 1$, имеет вид:

$$\kappa_{A, \text{опт}}^{(1)} = 1 + v - \sqrt{v \frac{1 + v}{1 + \sigma_P^{(2)}}} \quad (\text{III, 257б})$$

Подстановка численных значений величин в формулу (III, 257б) позволяет найти:

$$\kappa_{A, \text{опт}}^{(1)} = 1 + 0,5 - \sqrt{0,5 \frac{1 + 0,5}{1 - 0,422}} = 0,360 \quad (\text{III, 257в})$$

Время пребывания в первом реакторе каскада рассчитывается по формуле (III, 253):

$$\tau_{1, \text{опт}} = \frac{0,360}{2 \cdot 1 \cdot 1 \cdot (1 - 0,360)^2 + 1 \cdot 1 \cdot 1 \cdot (1 - 0,360)} = 0,247 \text{ ч} \quad (\text{III, 257г})$$

Относительно расчета оптимального времени пребывания во втором реакторе каскада следует сделать некоторые предварительные замечания. Формула (III, 253) определяет величину времени пребывания через степень превращения, достигаемую в данном реакторе, тогда как заданное в условии оптимальной задачи значение степени превращения $\kappa_A = 0,634$ характеризует каскад в целом, т. е. вычисляется по отношению к его входу. Поэтому с учетом найденного для первого аппарата значения степени превращения $\kappa_{A, \text{опт}}^{(1)}$ необходимо определить степень превращения $\kappa_{A, 2}$, достигаемую только во втором реакторе, после чего можно воспользоваться формулой (III, 253) для расчета времени пребывания $\tau_{2, \text{опт}}$.

Значение $\kappa_{A, 2}$ может быть найдено из очевидного соотношения

$$1 - \kappa_A = (1 - \kappa_{A1})(1 - \kappa_{A2}) \quad (\text{III, 258})$$

показывающего, что доля непревращенного реагента в реакторном остатке на выходе каскада равна произведению долей этого реагента для всех аппаратов

каскада. Из соотношения (III, 258) получим:

$$\kappa_{A_2} = \frac{\kappa_A - \kappa_{A_1}}{1 - \kappa_{A_1}} = \frac{\kappa_A - \kappa_{A, \text{опт}}^{(1)}}{1 - \kappa_{A, \text{опт}}^{(1)}} \quad (\text{III, 259})$$

Кроме того, для расчета по формуле (III, 253) вместо величины $\kappa_A^{(0)}$ нужно подставить значение концентрации реагента A на входе второго реактора каскада, которое определяется выражением:

$$\kappa_A^{(1)} = \kappa_A^{(0)} (1 - \kappa_A^{(1)}) \quad (\text{III, 260})$$

С учетом сказанного выше для расчета оптимального времени пребывания во втором реакторе каскада можно найти формулу

$$\tau_{2, \text{опт}} = \frac{(\kappa_A - \kappa_{A, \text{опт}}^{(1)})}{n_{A_1} k_1 (\kappa_A^{(0)})^{n_{A_1}-1} (1 - \kappa_A)^{n_{A_1}} + n_{A_2} k_2 (\kappa_A^{(0)})^{n_{A_2}-1} (1 - \kappa_A)^{n_{A_2}}} \quad (\text{III, 261})$$

подставляя в которую численные значения величин, получим:

$$\tau_{2, \text{опт}} = \frac{0,634 - 0,360}{2 \cdot 1 \cdot 1 (1 - 0,634)^2 + 1 \cdot 1 \cdot 1 (1 - 0,634)} = 0,433 \text{ ч} \quad (\text{III, 257д})$$

Сравнение найденных значений времени пребывания для первого и второго реакторов каскада показывает, что они различаются почти в два раза. Суммарное время пребывания в каскаде составляет

$$\tau = \tau_{1, \text{опт}} + \tau_{2, \text{опт}} = 0,247 + 0,433 = 0,680 \text{ ч} \quad (\text{III, 257е})$$

что почти на $1/3$ меньше оптимального времени пребывания для одиночного реактора, рассмотренного в предыдущем примере.

Выход продукта P , достигаемый в каскаде реакторов, может быть рассчитан по формуле (III, 245), которая после подстановки численных значений величин позволяет найти:

$$\Psi_P = \sigma_P^{(1)} \kappa_A^{(1)} + \sigma_P^{(2)} (\kappa_A^{(2)} - \kappa_A^{(1)}) = 0,562 \cdot 0,360 + 0,422 (0,634 - 0,360) = 0,318 \quad (\text{III, 257ж})$$

Таким образом, выход продукта P в каскаде двух реакторов почти на 20% выше, чем в одиночном реакторе [ср. выражения (III, 254в) и (III, 257ж)] для одной и той же степени превращения исходного реагента A .

Интересно сравнить полученные выше характеристики одиночного реактора и каскада двух реакторов с параметрами реактора идеального вытеснения, рассчитанного на ту же степень превращения исходного реагента A .

Для определения выхода продукта P в реакторе идеального вытеснения можно воспользоваться выражением (III, 243), для рассматриваемого случая имеющего вид:

$$\Psi_P = \int_0^{\kappa_A} \frac{d\kappa}{1 + v(1 - \kappa)^{-1}} = \kappa_A + v \ln \left(1 - \frac{\kappa_A}{1 + v} \right) \quad (\text{III, 262})$$

Подставляя в выражение (III, 262) численные значения

$$v = 0,5 \quad \kappa_A = 0,634$$

находим:

$$\Psi_P = 0,634 + 0,5 \ln \left(1 - \frac{0,634}{1 + 0,5} \right) = 0,360 \quad (\text{III, 263а})$$

Для расчета времени пребывания в реакторе идеального вытеснения применим формулу (III, 119), интеграл в которой может быть найден, в результате чего получим:

$$\tau_L = x_A^{(0)} \int_0^{x_A} \frac{dx}{n_{A1} k_1 (x_A^{(0)})^{n_{A1}-1} (1-x)^{n_{A1}} + n_{A2} k_2 (x_A^{(0)})^{n_{A2}-1} (1-x)^{n_{A2}}} =$$

$$= \int_0^{x_A} \frac{dx}{2(1-x)^2 + (1-x)} = \frac{1}{2} \ln \frac{3-x_A}{3(1-x_A)} \quad (\text{III, 263б})$$

После подстановки в выражение (III, 263б) значения $x_A = 0,634$ находим:

$$\tau_L = \frac{1}{2} \ln \frac{3-0,634}{3(1-0,634)} = 0,385 \text{ ч} \quad (\text{III, 263в})$$

В табл. 2 представлены результаты проведенных расчетов для различных вариантов аппаратного оформления реактора.

ТАБЛИЦА 2

Сравнение различных вариантов аппаратного оформления для параллельных реакций (III, 248), рассчитанных на заданную степень превращения исходного реагента А ($x_A = 0,634$)

Аппаратурное оформление	Общее время пребывания τ	Выход продукта
Одиночный реактор смешения	1,0	0,268
Каскад двух реакторов смешения . .	0,680	0,318
Реактор вытеснения	0,385	0,360

Рассмотренными выше примерами использования методов исследования функций классического анализа, разумеется, не исчерпываются возможности их применения для решения оптимальных задач химической технологии. Число примеров легко может быть увеличено, особенно за счет тех случаев, когда нельзя получить решения в аналитической форме и необходимы численные методы.

Область использования методов исследования функций классического анализа относится главным образом к тем задачам, когда относительно просто можно найти аналитическое выражение для параметров, входящих в критерий оптимальности. Однако применение этих методов оказывается также полезным при предварительном анализе и более сложных задач в первоначальном, возможно относительно грубом приближении.

Основная трудность, возникающая при использовании методов исследования функций в задачах, включающих больше двух независимых переменных, заключается в сложности проверки условий достаточности и совместности получаемых систем уравнений, определяющих экстремальные значения критерия оптимальности.

Вместе с тем, такие же трудности встречаются и при применении других методов решения оптимальных задач, причем иногда даже в еще более сложной форме, как, например, в вариационном исчислении.

Остается заметить, что методы исследования функций классического анализа являются той базой, на которой основано использование и более тонких и общих методов решения задач оптимизации, поэтому указанные методы не теряют своего значения в теории оптимальных процессов по мере дальнейшего ее развития.

ЛИТЕРАТУРА

1. Привалов И. И. Аналитическая геометрия. М., Физматгиз, 1957. 299 с.
2. Гантмахер Ф. Р. Теория матриц. М., Гостехиздат, 1966. 576 с.
3. Крамерс Х., Вестертен К. Химические реакторы. Расчет и управление ими. Пер. с англ. М., «Химия», 1967. 264 с.
4. Бесков В. С., Буджан Я. М., Слинко М. Г. Хим. пром., 1963, № 10, с. 721—724.
5. Смирнов В. И. Курс высшей математики. Т. 1. М., Физматгиз, 1958. 478 с

МЕТОД МНОЖИТЕЛЕЙ ЛАГРАНЖА

Настоящая глава посвящена рассмотрению методов решения одного важного класса задач, которые могут быть представлены как задачи отыскания экстремума соответствующего критерия оптимальности при условии, что на независимые переменные наложены определенные ограничения, имеющие вид равенств. Типичными примерами подобных задач служат задачи, в которых требуется оптимальным образом распределить заданное количество ресурсов, чтобы принятая оценка эффективности процесса имела при этом максимальное или минимальное значение. Как показано ниже, к задачам с ограничениями на независимые переменные типа равенств можно свести и такие задачи, в которых ограничения данного типа в явном виде отсутствуют.

Для решения экстремальных задач с такими ограничениями в классическом анализе разработан и используется метод неопределенных множителей Лагранжа [1], сводящий задачу с ограничениями к обычной экстремальной задаче без ограничений, что позволяет применить для ее решения приемы, рассмотренные в главе III. В этом смысле настоящая глава является логическим продолжением предыдущей. Метод же множителей Лагранжа дает возможность иногда использовать более эффективные приемы, ведущие к решению исходной оптимальной задачи.

Следует также отметить, что множители Лагранжа часто применяют и в других методах оптимизации в качестве вспомогательного средства, позволяющего упростить решение более сложных задач (подробно см. главы, посвященные изложению вариационного исчисления динамического программирования).

1. ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ

Пусть требуется найти экстремум функции

$$R(x_1, x_2, \dots, x_n) \quad (IV, 1)$$

которая зависит от n переменных x_i ($i = 1, \dots, n$), связанных в свою очередь соотношениями:

$$\Phi_k(x_1, x_2, \dots, x_n) \quad (k = 1, \dots, n) \quad m \quad (IV, 2)$$

Экстремум, который достигается функцией R с учетом выполнения соотношений (IV, 2), обычно называется условным или относительным.

Очевидно, что число m соотношений (IV, 2) в постановке экстремальной задачи должно быть меньше числа независимых переменных n , так как, например, при $m = n$ диапазон изменения переменных $x_i = (i = 1, \dots, n)$ по существу сведется лишь к определенному набору дискретных точек $x^{(l)}$ ($l = 1, \dots, q$), который может быть найден решением системы уравнений (IV, 2), поскольку для данного случая число уравнений равно числу неизвестных. При этом решение оптимальной задачи в конечном итоге сведется к проверке значений функции R только в дискретном множестве точек, т. е. экстремальную задачу можно решить перебором допустимых точек, удовлетворяющих ограничивающим условиям (IV, 2).

Если число m условий (IV, 2) меньше числа независимых переменных n , то принципиально для решения экстремальной задачи может быть использован следующий прием. Из систем m уравнений (IV, 2) можно выразить m независимых переменных x_i как функции остальных $n - m$ переменных, т. е., другими словами, представить ограничения (IV, 2) в виде:

$$x_k = f_k(x_1, x_2, \dots, x_{n-m}) \quad k = n - m + 1, \dots, n \quad (\text{IV}, 3)$$

Подставляя полученные соотношения (IV, 3) в выражение (IV, 1), получим функцию R^* , которая будет зависеть уже только от переменных, не связанных дополнительными условиями:

$$R^*(x_1, x_2, \dots, x_{n-m}) \quad (\text{IV}, 4)$$

Таким образом, устраняя ограничивающие условия (IV, 2), удалось и уменьшить размерность исходной оптимальной задачи.

Практически часто бывает трудно, а иногда и вообще невозможно аналитически решить систему уравнений (IV, 2) относительно некоторых переменных, т. е. представить ее в виде соотношений (IV, 3). Поэтому для решения задач отыскания экстремума функции многих переменных (IV, 1) с ограничениями на независимые переменные (IV, 2) обычно используют метод неопределенных множителей Лагранжа, вывод основных соотношений которого рассмотрен ниже.

Предположим, что в некоторой точке $x^{(0)}(x_1^{(0)}, \dots, x_n^{(0)})$ функция R (IV, 1) имеет условный экстремум. Это означает, что система ограничивающих условий (IV, 2) в данной точке также выполняется.

Необходимым условием экстремума функции многих переменных, как известно [1], является равенство нулю дифференциала этой функции в экстремальной точке, т. е.

$$\sum_{i=1}^n \frac{\partial R(x^{(0)})}{\partial x_i} dx_i = 0 \quad (\text{IV}, 5)$$

При этом дифференциалы переменных dx_i ($i = 1, \dots, n$) в выражении (IV, 5) не все являются независимыми, поскольку на указанные переменные наложены дополнительные условия (IV, 2). Продифференцируем эти условия в точке $x^{(0)}$, в результате чего получим систему равенств:

$$\sum_{i=1}^n \frac{\partial \varphi_k(x^{(0)})}{\partial x_i} dx_i = 0 \quad k = 1, \dots, m \quad (\text{IV}, 6)$$

Умножим каждое из равенств системы (IV, 6) на пока неопределенный множитель λ_k ($k = 1, \dots, m$) и сложим все эти равенства с выражением (IV, 5). Тогда, объединяя слагаемые с одинаковыми дифференциалами dx_i , найдем:

$$\sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial R(x^{(0)})}{\partial x_i} + \lambda_1 \frac{\partial \varphi_1(x^{(0)})}{\partial x_i} + \dots + \lambda_m \frac{\partial \varphi_m(x^{(0)})}{\partial x_i} \right) dx_i = 0 \quad (\text{IV}, 7)$$

Среди дифференциалов dx_i независимыми являются только $n - m$, тогда как остальные m дифференциалов зависят от первых. Поэтому в соотношении (IV, 7) независимым образом можно изменять лишь $n - m$ дифференциалов, например dx_i ($i = 1, \dots, n - m$). Для того, чтобы исключить m зависимых дифференциалов dx_i ($i = n - m + 1, \dots, n$) из выражения (IV, 7), выберем m множителей λ_k ($k = 1, \dots, m$) так, чтобы коэффициенты при этих дифференциалах обратились в нуль. Другими словами, определим λ_k из системы уравнений:

$$\frac{\partial R(x^{(0)})}{\partial x_i} + \lambda_1 \frac{\partial \varphi_1(x^{(0)})}{\partial x_i} + \dots + \lambda_m \frac{\partial \varphi_m(x^{(0)})}{\partial x_i} = 0 \quad i = n - m + 1, \dots, n \quad (\text{IV}, 8)$$

Тогда в соотношении (IV, 7) останется только $n - m$ слагаемых с независимыми дифференциалами dx_i ($i = 1, \dots, n - m$) и оно может быть переписано в виде:

$$\sum_{i=1}^{n-m} \left(\frac{\partial R(x^{(0)})}{\partial x_i} + \lambda_1 \frac{\partial \varphi_1(x^{(0)})}{\partial x_i} + \dots + \lambda_m \frac{\partial \varphi_m(x^{(0)})}{\partial x_i} \right) dx_i = 0 \quad (\text{IV}, 9)$$

Для того чтобы соотношение (IV, 9) выполнялось при любых значениях независимых дифференциалов dx_i ($i = 1, \dots, n - m$), необходимо равенство нулю коэффициентов при этих дифференциалах, что дает систему уравнений

$$\frac{\partial R(x^{(0)})}{\partial x_i} + \lambda_1 \frac{\partial \varphi_1(x^{(0)})}{\partial x_i} + \dots + \lambda_m \frac{\partial \varphi_m(x^{(0)})}{\partial x_i} = 0 \quad i = 1, \dots, n - m \quad (\text{IV}, 10)$$

аналогичную системе (IV, 8). Объединяя системы уравнений (IV, 8) и (IV, 10), окончательно получим:

$$\frac{\partial R(x^{(0)})}{\partial x_i} + \lambda_1 \frac{\partial \varphi_1(x^{(0)})}{\partial x_i} + \dots + \lambda_m \frac{\partial \varphi_m(x^{(0)})}{\partial x_i} = 0 \quad i = 1, \dots, n \quad (\text{IV}, 11)$$

Системе уравнений (IV, 11) должны удовлетворять как величины λ_k ($k = 1, \dots, m$), так и значения переменных x_i ($i = 1, \dots, n$), при которых функция R имеет условный экстремум. Кроме системы (IV, 11), переменные x_i ($i = 1, \dots, n$) должны также удовлетворять системе условий (IV, 2). Таким образом, всего получим $m + n$ уравнений систем (IV, 2) и (IV, 11), из которых можно найти n значений переменных x_i ($i = 1, \dots, n$), соответствующих условному экстремуму функции R и m значений множителей λ_k ($k = 1, \dots, m$).

Чтобы представить полученные результаты в более компактной форме, введем вспомогательную функцию Лагранжа, которую определим соотношением:

$$\Phi(x, \lambda) = R(x) + \sum_{k=1}^m \lambda_k \varphi_k(x) \quad (\text{IV, 12})$$

С помощью функции Φ систему уравнений (IV, 11), как трудно видеть, можно записать в виде

$$\frac{\partial \Phi(x, \lambda)}{\partial x_i} = 0 \quad i = 1, \dots, n \quad (\text{IV, 13})$$

Итак, для решения задачи отыскания условного экстремума функции R (IV, 1) при ограничениях на переменные (IV, 2) необходимо решить систему уравнений (IV, 13), где функция Φ определяется выражением (IV, 12) совместно с системой ограничивающих условий (IV, 2).

Можно также пойти дальше по пути обобщения и обозначить неопределенные множители как новые вспомогательные переменные:

$$\lambda_k = x_{n+k} \quad k = 1, \dots, m \quad (\text{IV, 14})$$

Тогда формально задача нахождения условного экстремума функции R (IV, 1) эквивалентна задаче определения стационарной точки функции Φ (IV, 2), рассматриваемой как функция $n + m$ переменных x_i ($i = 1, \dots, n + m$), поскольку при дифференцировании функции Φ по вспомогательным переменным в результате приравнивания нулю получаемых производных находится система уравнений (IV, 2).

При решении задачи отыскания условного экстремума оказываются известными как значения переменных x_i ($i = 1, \dots, n$), при которых функция R имеет условный экстремум, так и значения множителей λ_k ($k = 1, \dots, m$), соответствующие этому экстремуму. Фактически значения множителей λ_k не нужны в окончательном решении оптимальной задачи, поэтому иногда задача совместного решения систем (IV, 13) и (IV, 2) ставится как задача исключения указанных множителей с последующим решением остающейся системы n уравнений с n неизвестными x_i . Другой способ получения конечных результатов заключается в том, что из

системы уравнений (IV, 13) пытаются найти переменные x_i ($i = 1, \dots, n$) как функции неопределенных множителей λ_k ($k = 1, \dots, m$), что принципиально возможно, поскольку система (IV, 13) содержит в точности n уравнений.

Если это удается, т. е. можно найти выражения

$$x_i = \Psi_i(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m) \quad i = 1, \dots, n \quad (\text{IV}, 15)$$

то, подставляя их затем в условия (IV, 2), получают систему m уравнений с m неизвестными значениями величин λ_k . После решения последней системы относительно λ_k по формулам (IV, 15) вычисляют искомые значения переменных x_i в точке условного экстремума.

Следует особо подчеркнуть, что метод множителей Лагранжа позволяет найти лишь необходимые условия существования условного экстремума для непрерывных функций, имеющих к тому же непрерывные производные. Полученные в результате решения систем уравнений (IV, 2) и (IV, 13) значения неизвестных x_i могут и не давать экстремального значения функции R , точно так же как в задачах на безусловный экстремум, приведенных в предыдущей главе. Поэтому найденные при решении указанных систем уравнений значения переменных, вообще говоря, должны быть проверены на экстремум с помощью анализа производных более высокого порядка или какими-либо другими методами.

В качестве простейшего примера применения множителей Лагранжа для отыскания условного экстремума заданной функции решим задачу расчета размеров цилиндрической емкости заданного объема V , которая имела бы минимальную поверхность S .

Критерием оптимальности рассматриваемой задачи, минимальное значение которого требуется найти, в данном случае является поверхность цилиндрической емкости

$$S = 2\pi(r^2 + rh) \quad (\text{IV}, 16)$$

где r — радиус цилиндра; h — его высота.

В используемых обозначениях объем этой емкости описывается выражением

$$V = \pi r^2 h \quad (\text{IV}, 17)$$

которое нужно считать ограничением на переменные r и h при минимизации S . Для того чтобы привести условие (IV, 17) к виду соотношений (IV, 2), перепишем его в форме:

$$V - \pi r^2 h = 0 \quad (\text{IV}, 18)$$

где V рассматривается как постоянная величина, заданная условиями задачи.

С учетом процедуры применения метода множителей Лагранжа составим вспомогательную функцию (IV, 12) для этой задачи:

$$\Phi = 2\pi(r^2 + rh) + \lambda(V - \pi r^2 h) \quad (\text{IV}, 19)$$

Дифференцированием выражения (IV, 19) по r и h находим систему уравнений, соответствующую системе (IV, 13):

$$\frac{\partial \Phi}{\partial r} = 2\pi(2r + h) - 2\pi\lambda rh = 0 \quad (\text{IV}, 20)$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial h} = 2\pi r - \pi\lambda r F^2 = 0 \quad (\text{IV}, 21)$$

Из уравнения (IV, 21) получим:

$$r_1 = 0 \quad r_2 = \frac{2}{\lambda} \quad (\text{IV, 22})$$

Первое из найденных значений r_1 , как нетрудно видеть, отвечает нулевому значению поверхности S , что хотя и соответствует экстремальной точке функции S (IV, 16), т. е. точке минимума, но не удовлетворяет требованию получения заданного объема V . Поэтому для дальнейших рассуждений в соотношениях (IV, 22) имеет смысл только второе значение r_2 . Подставляя это значение в уравнение (IV, 20), найдем выражение h через λ :

$$h = \frac{4}{\lambda} \quad (\text{IV, 23})$$

Теперь можно определить величину λ , если подставить в условие (IV, 17) или (IV, 18) значения r и h , выраженное через λ . В результате подстановки получим:

$$V = \pi \left(\frac{2}{\lambda} \right)^2 \frac{4}{\lambda} = \frac{16\pi}{\lambda^3}$$

Отсюда

$$\lambda = 2 \sqrt[3]{\frac{2\pi}{V}} \quad (\text{IV, 24})$$

Подставляя далее найденное значение λ в формулы для r и h , найдем:

$$r = \frac{2}{\lambda} = \sqrt[3]{\frac{V}{2\pi}} \quad (\text{IV, 25})$$

$$h = \frac{4}{\lambda} = 2 \sqrt[3]{\frac{V}{2\pi}} \quad (\text{IV, 26})$$

Для того чтобы убедиться, что полученные значения r и h действительно характеризуют минимальное значение S , необходимо провести дополнительный анализ функции S (IV, 16) в точке, определяемой значениями (IV, 25) и (IV, 26).

Для этого продифференцируем условие (IV, 18)

$$\pi (2rh \, dr + r^2 \, dh) = 0$$

откуда найдем связь между дифференциалами dr и dh , которая должна существовать при выполнении указанного условия в экстремальной точке:

$$dh = - \frac{2h}{r} \, dr \quad (\text{IV, 27})$$

Определим теперь дифференциал dS из выражения (IV, 16):

$$dS = 2\pi (2r + h) \, dr + 2\pi r \, dh \quad (\text{IV, 28})$$

и подставим в него соотношение между дифференциалами независимых переменных (IV, 27). В результате получим:

$$dS = 2\pi \left[(2r + h) \, dr - r \frac{h}{r} \, dr \right] = 2\pi (2r - h) \, dr \quad (\text{IV, 29})$$

Отсюда следует:

$$\frac{dS}{dr} = 2\pi (2r - h) \quad (\text{IV, 30})$$

Для того чтобы узнать, какой тип условного экстремума имеет функция S в рассматриваемой точке, найдем вторую производную по r из выражения (IV, 30):

$$\frac{d^2S}{dr^2} = 2\pi \left(2 - \frac{dh}{dr} \right) \quad (\text{IV, 31})$$

Значение производной dh/dr можно определить из условия (IV, 27):

$$\frac{dh}{dr} = -2 \frac{h}{r} \quad (\text{IV, 32})$$

Подставляя теперь выражение (IV, 32) в соотношение (IV, 31), получим:

$$\frac{d^2S}{dr^2} = 2\pi \left(1 + \frac{h}{r} \right) \quad (\text{IV, 33})$$

Таким образом найдено, что производная d^2S/dr^2 , вычисленная с учетом условия (IV, 18), положительна и, следовательно, условный экстремум, характеризующийся значениями (IV, 25) и (IV, 26), является точкой минимума функции S (IV, 16).

Минимальное значение S может быть определено подстановкой значений r и h из выражений (IV, 25) и (IV, 26) в соотношение (IV, 16):

$$S_{\text{опт}} = 2\pi \sqrt[3]{\left(\frac{V}{2\pi}\right)^2} + 4\pi \sqrt[3]{\left(\frac{V}{2\pi}\right)^2} = 3 \sqrt[3]{2\pi V^2} \quad (\text{IV, 34})$$

В примерах оптимальных задач, рассмотренных в следующих разделах, анализ условного экстремума, аналогичный проделанному выше, как правило, не проводится, поскольку в общем случае он требует довольно сложных выкладок при исследовании высших производных. В основном характер получаемого экстремума определяется, исходя из физического смысла решаемой задачи.

2. ОПТИМАЛЬНОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ПОТОКОВ СЫРЬЯ МЕЖДУ ПАРАЛЛЕЛЬНО РАБОТАЮЩИМИ АППАРАТАМИ

Сформулируем общую постановку задачи оптимального распределения нескольких потоков разных видов сырья для параллельно работающих аппаратов химического производства. Эта задача служит типичной иллюстрацией более общего класса задач о распределении ограниченного количества ресурсов между несколькими потребителями. С примерами подобных процессов можно встретиться в производствах большой мощности, когда параллельно работающие аппараты являются к тому же однотипными, например реакторами, колоннами разделения и т. д.

Постановка задачи оптимального распределения нескольких потоков сырья, рассматриваемая ниже, сформулирована безотносительно к типу параллельно работающих аппаратов, т. е. в общем случае поток сырья может распределяться между несколькими различными процессами, дающими неодинаковую продукцию.

На рис. IV-1 представлена схема такого производства, в котором m потоков сырья распределяются между N параллельно работающими аппаратами или процессами, включающими целый ряд

аппаратов. Предположим, что каждый из N процессов характеризуется своим критерием оптимальности r_i^* , выражение для которого выбрано так, чтобы эффективность всего производства оценивалась суммарным значением критериев оптимальности отдельных процессов. Другими словами, результирующий критерий оптимальности производства в целом является аддитивной функцией критериев оптимальности отдельных процессов:

$$R = \sum_{i=1}^n r_i^* \quad (\text{IV}, 35)$$

Естественно предположить, что эффективность i -го процесса зависит от принятого в данный момент времени распределения потоков сырья, т. е. представляет собой функцию величин v_k^i ($k = 1, \dots, m$). Кроме того, в общем случае на эффективность r_i^* может оказывать влияние еще ряд параметров i -го процесса, которые характеризуют его режим и могут быть как управляемыми, так и неуправляемыми переменными величинами. Это могут быть, например, параметры теплового режима процесса, поддающиеся управлению, или же активность катализатора, изменяющаяся случайным образом в процессе эксплуатации, и т. п.

Пусть в дальнейшем совокупность индивидуальных параметров каждого процесса составляет $u^{(i)}$, что является векторным обозначением группы переменных параметров, определяющих при заданном распределении сырья эффективность i -го процесса:

$$u^{(i)} = (u_1^{(i)}, u_2^{(i)}, \dots, u_{q_i}^{(i)}) \quad (\text{IV}, 36)$$

Число переменных параметров этого типа q_i в общем случае может быть различным для любого процесса рассматриваемого производства.

Таким образом, критерий оптимальности каждого из процессов можно записать как

$$r_i^* = r_i^*(v^i, u^{(i)}) \quad i = 1, \dots, N \quad (\text{IV}, 37)$$

Критерий оптимальности всего производства, в свою очередь, может считаться функцией $n = mN$ значений $v_k^{(i)}$ и N значений векторных величин $u^{(i)}$. Полагая, что параметры u_k^i произвольным образом влияют на вид оценки эффективности i -го процесса r_i^* ,

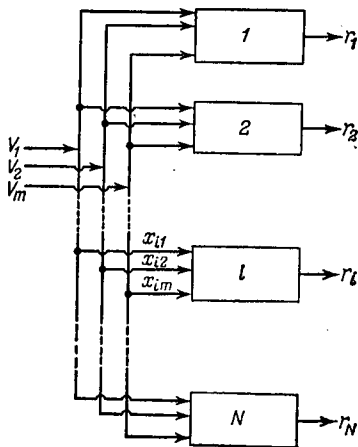


Рис. IV-1. Схематическое изображение производства с распределением нескольких потоков сырья.

представим соотношение (IV, 37) в форме:

$$r_i = r_i(v^{(i)}) \quad (\text{IV, 38})$$

Это позволяет записать общее выражение критерия оптимальности всего производства как функцию только распределения потоков сырья между отдельными процессами:

$$R(v^{(1)}, v^{(2)}, \dots, v^{(N)}) = \sum_{i=1}^N r_i(v^{(i)}) \quad (\text{IV, 39})$$

Поставим задачей оптимизации отыскание такого распределения потоков сырья между отдельными процессами, при котором критерий оптимальности производства в целом (IV, 39) имел бы минимальное значение при любой заданной совокупности значений величин $u^{(i)}$ ($i = 1, \dots, N$). Эта задача может возникнуть, например, при решении вопросов управления распределением сырья в производстве, когда оптимальный режим каждого процесса в отдельности уже обеспечивается локальной системой оптимизации с помощью параметров $u_k^{(i)}$, допустимых для целенаправленного изменения.

Поскольку значение любого потока сырья V_k , поступающего в производство, задано, выбор оптимальных значений $v_k^{(i)}$ должен производиться с учетом условий

$$\sum_{i=1}^N v_k^{(i)} = V_k \quad k = 1, \dots, m \quad (\text{IV, 40})$$

которые представляют собой ограничения типа равенств на независимые переменные $v_k^{(i)}$ и позволяют использовать для решения поставленной оптимальной задачи метод множителей Лагранжа.

Вывод основных соотношений

Перепишем систему ограничивающих условий в виде уравнений

$$V_k - \sum_{i=1}^N v_k^{(i)} = 0 \quad k = 1, \dots, m \quad (\text{IV, 41})$$

и составим с учетом выражений (IV, 39) и (IV, 41) функцию Лагранжа для рассматриваемой оптимальной задачи

$$\Phi = \sum_{i=1}^N r_i(v^{(i)}) + \sum_{k=1}^m \lambda_k \left(V_k - \sum_{i=1}^N v_k^{(i)} \right) \quad (\text{IV, 42})$$

или

$$\Phi = \sum_{k=1}^m \lambda_k V_k + \sum_{i=1}^N \left[r_i(v^{(i)}) - \sum_{k=1}^m \lambda_k v_k^{(i)} \right] \quad (\text{IV, 43})$$

В последнем уравнении каждое слагаемое второй суммы зависит только от тех величин $v_k^{(i)}$ ($k = 1, \dots, m$), которые определяют нагрузку по сырью лишь i -го процесса.

Из выражения (IV, 43) теперь уже нетрудно получить в общем виде систему уравнений (IV, 13), решение которой совместно с условиями (IV, 41) характеризует оптимальное распределение потоков сырья. Дифференцируя выражение (IV, 43) по $v_k^{(i)}$, найдем соотношение

$$\frac{\partial \Phi}{\partial v_k^{(i)}} = \frac{\partial r_i(v^{(i)})}{\partial v_k^{(i)}} - \lambda_k \quad (\text{IV, 44})$$

с учетом которого система уравнений (IV, 13) может быть представлена как

$$\frac{\partial r_i(v^{(i)})}{\partial v_k^{(i)}} = \lambda_k \quad k = 1, \dots, m, \quad i = 1, \dots, N \quad (\text{IV, 45})$$

Параметры λ_k можно исключить из уравнений системы (IV, 45), после чего получим:

$$\frac{\partial r_1(v^{(1)})}{\partial v_k^{(1)}} = \frac{\partial r_2(v^{(2)})}{\partial v_k^{(2)}} = \dots = \frac{\partial r_N(v^{(N)})}{\partial v_k^{(N)}} \quad k = 1, \dots, m \quad (\text{IV, 46})$$

Отсюда следует, что при оптимальном распределении потока k -го сырья производные $dr_i/dv_k^{(i)}$ ($i = 1, \dots, N$) от критериев оптимальности всех процессов, на которые это сырье распределяется, должны быть равны между собой.

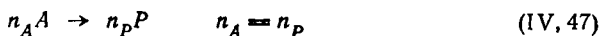
Система уравнений (IV, 46) включает уже $m(N - 1)$ равенств. Добавляя к этой системе m условий (IV, 41), получим систему mN уравнений относительно mN неизвестных величин $v_k^{(i)}$.

Следует отметить, что решение систем уравнений (IV, 46) и (IV, 41) на практике может оказаться достаточно сложным. Однако вывод, сделанный относительно равенства производных (IV, 46) при оптимальном распределении потоков сырья, сам по себе представляет практический интерес и может быть использован для организации управления производством.

Примеры распределения для различных типов реакций

Ниже рассмотрено несколько примеров применения полученных результатов для решения задач распределения одного потока сырья на группу параллельно действующих однотипных химических реакторов.

Пример IV-1. Поток сырья A , поступающего в производство в количестве V , распределяется на N параллельно работающих реакторов идеального смешения. В них протекает химическая реакция



скорость которой описывается выражением:

$$w_A = -n_A k x_A^{n_A} \quad (\text{IV, 48})$$

Предполагается, что объемы реакторов $V_r^{(i)}$ могут различаться между собой и, кроме того, по каким-либо причинам, например неодинаковой активности катализатора в аппаратах, разных температурных условиях и т. п., константы скорости реакции в различных реакторах также могут быть неодинаковы.

Для заданного значения V требуется найти оптимальный режим распределения сырья по всем реакторам, при котором достигается максимальное превращение исходного продукта A .

Решение. Критерий r_i , характеризующий эффективность работы i -го реактора, в данном случае определяется выражением

$$r_i = v^{(i)} x_A^{(i)} \quad (\text{IV, 49})$$

где $v^{(i)}$ — нагрузка на i -й реактор по исходному сырью; $x_A^{(i)}$ — концентрация продукта A на выходе i -го реактора.

Следовательно, величина r_i численно равна количеству непрореагировавшего вещества A на выходе аппарата, и критерий оптимальности всей системы параллельно работающих реакторов может быть записан в виде:

$$R = \sum_{i=1}^N v^{(i)} x_A^{(i)} \quad (\text{IV, 50})$$

Минимальное значение критерия оптимальности (IV, 50) нужно находить при условии:

$$V - \sum_{i=1}^N v^{(i)} = 0 \quad (\text{IV, 51})$$

Для того чтобы получить систему уравнений (IV, 46), найдем выражение для производной $\partial r_i / \partial v^{(i)}$. Поскольку, с одной стороны, величина $x_A^{(i)}$ является функцией нагрузки на реактор $v^{(i)}$, в результате дифференцирования выражения (IV, 49) по $v^{(i)}$ получим:

$$\frac{\partial r_i}{\partial v^{(i)}} = x_A^{(i)} + v^{(i)} \frac{\partial x_A^{(i)}}{\partial v^{(i)}} \quad (\text{IV, 52})$$

С другой стороны, концентрацию исходного продукта реакции на выходе i -го реактора $x_A^{(i)}$ можно определить из уравнения материального баланса аппарата по этому компоненту:

$$v^{(i)} (x_A^{(0)} - x_A^{(i)}) - V_r^{(i)} n_A k^{(i)} (x_A^{(i)})^{n_A} = 0 \quad (\text{IV, 53})$$

где $x_A^{(0)}$ — концентрация реагента A в исходном сырье.

Производная $dx_A^{(i)} / dv$ может быть найдена из выражения (IV, 53) как производная неявной функции [1], для чего следует продифференцировать это выражение по $v^{(i)}$. В результате получим уравнение

$$x_A^{(0)} - x_A^{(i)} - v^{(i)} \frac{\partial x_A^{(i)}}{\partial v^{(i)}} - n_A^2 V_r^{(i)} k^{(i)} (x_A^{(i)})^{n_A-1} \frac{\partial x_A^{(i)}}{\partial v^{(i)}} = 0$$

из которого находим:

$$\frac{\partial x_A^{(i)}}{\partial v^{(i)}} = \frac{1}{v^{(i)}} \cdot \frac{x_A^{(0)} - x_A^{(i)}}{1 + n_A \left(\frac{x_A^{(0)}}{x_A^{(i)}} - 1 \right)} \quad (\text{IV, 54})$$

Подставляя уравнение (IV, 54) в соотношение (IV, 52), получим:

$$\frac{\partial r_i}{\partial v^{(i)}} = \frac{(n_A + 1) x_A^{(0)} - n_A x_A^{(i)}}{1 + n_A \left(\frac{x_A^{(0)}}{x_A^{(i)}} - 1 \right)} \quad (\text{IV, 55})$$

Таким образом найдено, что производная $\partial r_i / \partial v^{(i)}$ выражается только через концентрацию исходного продукта реакции на выходе реактора $x_A^{(i)}$ и стехиометрические характеристики реакции (IV, 47) и не зависит от остальных параметров реактора. Отсюда с учетом условия (IV, 46) сразу следует, что при оптимальном распределении потока исходного сырья по всем реакторам концентрации $x_A^{(i)}$ на выходе всех аппаратов должны быть равны между собой, т. е. должно выполняться условие:

$$x_A^{(1)} = x_A^{(2)} = \dots = x_A^{(N)} \quad (\text{IV, 56})$$

Из условия (IV, 56) и материальных балансов реакторов (IV, 53) теперь может быть получено соотношение:

$$\frac{V_r^{(1)} k^{(1)}}{v^{(1)}} = \frac{V_r^{(2)} k^{(2)}}{v^{(2)}} = \dots = \frac{V_r^{(i)} k^{(i)}}{v^{(i)}} = \dots = \frac{V_r^{(N)} k^{(N)}}{v^{(N)}} \quad (\text{IV, 57})$$

откуда

$$v^{(i)} = v^{(1)} \frac{V_r^{(i)} k^{(i)}}{V_r^{(1)} k^{(1)}} \quad (\text{IV, 58})$$

Комбинируя выражение (IV, 58) и условие (IV, 51), находим формулу

$$v^{(1)} = \frac{V_r^{(1)} k^{(1)}}{\sum_{i=1}^N V_r^{(i)} k^{(i)}} V \quad (\text{IV, 59})$$

при подстановке которой в соотношение (IV, 58) получим:

$$v^{(i)} = \frac{V_r^{(i)} k^{(i)}}{\sum_{p=1}^N V_r^{(p)} k^{(p)}} V \quad (\text{IV, 60})$$

Выражение (IV, 60) определяет решение поставленной оптимальной задачи, если известны объемы всех реакторов $V_r^{(i)}$ и значения констант скорости реакции $k^{(i)}$ во всех аппаратах. В частном случае, когда объемы всех реакторов равны между собой:

$$V_r^{(1)} = V_r^{(2)} = \dots = V_r^{(N)} \quad (\text{IV, 61})$$

и условия реакции во всех аппаратах одинаковы, т. е.

$$k^{(1)} = k^{(2)} = \dots = k^{(N)} \quad (\text{IV, 62})$$

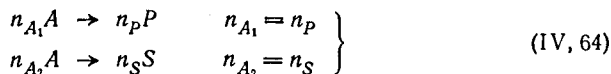
формула (IV, 60) существенно упрощается:

$$v^{(i)} = \frac{1}{N} V \quad (\text{IV, 63})$$

Выражение (IV, 63) означает, что при оптимальном распределении нагрузки на все реакторы должны быть одинаковы.

Следует также отметить один важный результат, который может быть использован для организации управления оптимальным распределением нагрузки при изменяющихся произвольным образом характеристиках реакторов. Речь идет о соотношении (IV, 56); с его помощью нетрудно построить систему регулирования, обеспечивающую автоматическое поддержание оптимального распределения нагрузки независимо от условий осуществления реакции в отдельных аппаратах.

Пример IV-2. Поток сырья A , поступающего в производство в количестве V , распределяется на N параллельно работающих реакторов идеального смешения, в которых проводится реакция:



При этом скорости образования продуктов реакции описываются выражениями:

$$\left. \begin{array}{l} w_A = - (n_{A_1} k_1 x_A^{n_{A_1}} + n_{A_2} k_2 x_A^{n_{A_2}}) \\ w_P = n_P k_1 x_A^{n_{A_1}} \end{array} \right\} \quad (\text{IV, 65})$$

Условия для реакции в разных аппаратах могут различаться из-за неодинаковых объемов реакторов $V_r^{(i)}$ и разных температурных условий, влияющих на величины констант скоростей образования продуктов реакции $k_1^{(i)}$ и $k_2^{(i)}$.

Для заданного значения V требуется найти оптимальный режим распределения сырья по аппаратам, при котором достигается максимальный выход продукта реакции P .

Решение. Критерий r_i , характеризующий эффективность работы i -го реактора, в данном случае вычисляется по выражению

$$r_i = v^{(i)} x_P^{(i)} \quad (\text{IV, 66})$$

где $v^{(i)}$ — нагрузка на i -й реактор по исходному сырью; $x_P^{(i)}$ — концентрация продукта P на выходе i -го реактора, т. е. r_i численно равен съему продукта P с i -го аппарата.

При этом критерий оптимальности всей системы параллельно работающих реакторов может быть записан как

$$R = \sum_{i=1}^N v^{(i)} x_P^{(i)} \quad (\text{IV, 67})$$

Максимальное значение критерия оптимальности (IV, 67) должно определяться при условии (IV, 51).

Выражение для производной $\partial r_i / \partial v_i$ в данном случае имеет вид:

$$\frac{\partial r_i}{\partial v^{(i)}} = x_P^{(i)} + v^{(i)} \frac{\partial x_P^{(i)}}{\partial v^{(i)}} \quad (\text{IV, 68})$$

Производную $\partial x_P^{(i)} / \partial v^{(i)}$ можно рассчитать из уравнений материальных балансов по реагентам A и P :

$$v^{(i)} (x_A^{(0)} - x_A^{(i)}) - V_r^{(i)} [n_{A_1} k_1^{(i)} (x_A^{(i)})^{n_{A_1}} + n_{A_2} k_2^{(i)} (x_A^{(i)})^{n_{A_2}}] = 0 \quad (\text{IV, 69})$$

$$v^{(i)} x_P^{(i)} - V_r^{(i)} n_P k_1^{(i)} (x_A^{(i)})^{n_{A_1}} = 0 \quad (\text{IV, 70})$$

Эти уравнения могут рассматриваться как неявная форма задания зависимости концентрации $x_P^{(i)}$ от величины $v^{(i)}$.

Дифференцируя уравнение (IV, 70), получим:

$$\frac{\partial x_P^{(i)}}{\partial v^{(i)}} = \frac{1}{v^{(i)}} \left(n_{A1} v^{(i)} \frac{x_P^{(i)}}{x_A^{(i)}} \cdot \frac{\partial x_A^{(i)}}{\partial v^{(i)}} - x_P^{(i)} \right) \quad (\text{IV, 71})$$

Производная $\partial x_A^{(i)} / \partial v^{(i)}$, в свою очередь, может быть найдена из уравнения (IV, 69):

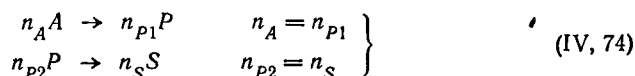
$$\frac{\partial x_A^{(i)}}{\partial v^{(i)}} = \frac{1}{v^{(i)}} \frac{(x_A^{(0)} - x_A^{(i)}) x_A^{(i)}}{n_{A2} x_A^{(0)} - (n_{A2} - 1) x_A^{(i)} + (n_{A1} - n_{A2}) x_P^{(i)}} \quad (\text{IV, 72})$$

Подставляя теперь значение производной $\partial x_A^{(i)} / \partial v^{(i)}$ из соотношения (IV, 72) в выражение (IV, 71) и затем в уравнение (IV, 68), после преобразований получим:

$$\frac{\partial r_i}{\partial v^{(i)}} = \frac{n_{A1} (x_A^{(0)} - x_A^{(i)}) x_P^{(i)}}{n_{A2} x_A^{(0)} - (n_{A2} - 1) x_A^{(i)} + (n_{A1} - n_{A2}) x_P^{(i)}} \quad (\text{IV, 73})$$

Таким образом, из условия (IV, 46) следует, что при оптимальном распределении нагрузки выражения (IV, 73) для всех реакторов должны быть равны между собой. Для расчета нагрузок на отдельные реакторы в данном случае можно воспользоваться следующим приемом. Задавая нагрузкой на один аппарат, например $v^{(1)}$, можно вычислить соответствующее этой нагрузке значение $\partial r_i / \partial v^{(1)}$ по формуле (IV, 73), для чего необходимо предварительно решить систему уравнений (IV, 69) и (IV, 70). Затем величины нагрузок на остальные реакторы подбирают из условия выполнения системы равенств (IV, 46). Если в результате проведенных расчетов, в процессе которых определяются нагрузки на все реакторы, условие (IV, 51) оказывается нарушенным, то вычисления повторяют для другого значения $v^{(i)}$ и т. д., до тех пор, пока не будет получена совокупность величин $v^{(i)}$ ($i = 1, \dots, N$), удовлетворяющая условию (IV, 51) с необходимой степенью точности.

Пример IV-3. Поток сырья A , поступающего в производство в количестве V , распределяется на N параллельно работающих реакторов идеального смешения, в которых осуществляется химическая реакция:



При этом скорости образования продуктов реакции описываются выражениями:

$$\left. \begin{array}{l} w_A = -n_A k_1 x_A \\ w_P = n_A k_1 x_A - n_{P2} k_2 x_P \end{array} \right\} \quad (\text{IV, 75})$$

Как и в предыдущем примере, требуется найти оптимальные условия распределения исходного сырья A по всем аппаратам, при которых достигается максимальный выход продукта реакции P в системе реакторов.

Решение. Выражения (IV, 66) — (IV, 68), приведенные в предыдущем примере, справедливы и для рассматриваемого случая.

Уравнения материальных балансов по реагентам A и P для реакции (IV, 74) имеют вид:

$$v^{(i)} (x_A^{(0)} - x_A^{(i)}) - V_r^{(i)} n_A k_1^{(i)} (x_A^{(i)})^{n_A} = 0 \quad (\text{IV, 76})$$

$$v^{(i)} x_P^{(i)} - V_r^{(i)} [n_A k_1^{(i)} (x_A^{(i)})^{n_A} - n_{P2} k_2^{(i)} (x_P^{(i)})^{n_{P2}}] = 0 \quad (\text{IV, 77})$$

Из уравнения (IV, 77) по правилам дифференцирования неявных функций получим:

$$\frac{\partial x_P^{(i)}}{\partial v^{(i)}} = \frac{x_P^{(i)}}{v^{(i)}} \cdot \frac{\frac{n_A}{x_A^{(i)}} v^{(i)} (x_A^{(0)} - x_A^{(i)}) \frac{\partial x_A^{(i)}}{\partial v^{(i)}} - x_P^{(i)}}{x_P^{(i)} + n_{P2} (x_A^{(0)} - x_A^{(i)} - x_P^{(i)})} \quad (\text{IV, 78})$$

Далее из уравнения (IV, 76) находим:

$$\frac{\partial x_A^{(i)}}{\partial v^{(i)}} = \frac{1}{v^{(i)}} \cdot \frac{(x_A^{(0)} - x_A^{(i)}) x_A^{(i)}}{x_A^{(i)} + n_A (x_A^{(0)} - x_A^{(i)})} \quad (\text{IV, 79})$$

Комбинируя уравнения (IV, 78) и (IV, 79) и подставляя затем полученное соотношение в выражение (IV, 68), находим:

$$\frac{\partial r_i}{\partial v^{(i)}} = x_P^{(i)} \frac{n_A (n_{P2} + 1) y^2 + n_{P2} (x_A^{(i)} - n_A x_P^{(i)}) y - n_{P2} x_A^{(i)} x_P^{(i)}}{[n_A y + x_A^{(i)}][n_{P2} y + (1 - n_{P2}) x_P^{(i)}]} \quad (\text{IV, 80})$$

где $y = x_A^{(0)} - x_A^{(i)}$.

Таким образом, как и во всех предыдущих примерах, установлено, что выражение для производной $\partial r_i / \partial v^{(i)}$ может быть представлено только через концентрации реагентов на входе в реактор и на выходе из него. С учетом условия (IV, 46) соотношение (IV, 80) можно также использовать для организации автоматического управления оптимальным распределением сырья на параллельно работающие аппараты.

Порядок расчета значений нагрузок $v^{(i)}$ по всем реакторам при оптимальном распределении тот же, что и в примере IV-2.

Пример IV-4. Поток сырья A , поступающий в производство в количестве V , распределяется на N параллельно работающих изотермических реакторов идеального вытеснения, в которых проводится химическая реакция типа (IV, 64) только первого порядка:

$$n_{A1} = n_{A2} = 1 \quad (\text{IV, 81})$$

Постановка задачи оптимального распределения сырья по всем аппаратам аналогична постановке задачи в примере IV-2, т. е. требуется обеспечить максимальный выход продукта P в системе реакторов.

Решение. Чтобы найти аналитический вид выражения для производной $\partial r_i / \partial v^{(i)}$ (IV, 68), в данном случае можно применить полученные ранее [см. уравнения (II, 178) и (II, 179)] уравнения для расчета концентраций $x_A^{(i)}$ и $x_P^{(i)}$ на выходе изотермического реактора идеального вытеснения, которые для i -го аппарата могут быть записаны в виде:

$$x_A^{(i)} = x_A^{(0)} \exp \left[- \frac{V_r^{(i)}}{v^{(i)}} (k_1^{(i)} + k_2^{(i)}) \right] \quad (\text{IV, 82})$$

$$x_P^{(i)} = x_A^{(0)} \frac{k_1^{(i)}}{k_1^{(i)} + k_2^{(i)}} \left\{ 1 - \exp \left[- \frac{V_r^{(i)}}{v^{(i)}} (k_1^{(i)} + k_2^{(i)}) \right] \right\} \quad (\text{IV, 83})$$

Дифференцируя выражение (IV, 83) по $v^{(i)}$ и принимая во внимание уравнение (IV, 82), можно найти:

$$\frac{\partial x_P^{(i)}}{\partial v^{(i)}} = \frac{1}{v^{(i)}} \cdot \frac{x_A^{(i)} x_P^{(i)}}{x_A^{(0)} - x_A^{(i)}} \ln \frac{x_A^{(i)}}{x_A^{(0)}} \quad (\text{IV, 84})$$

После подстановки соотношения (IV, 84) в выражение (IV, 68) получим:

$$\frac{\partial r_i}{\partial v^{(i)}} = \frac{x_p^{(i)}}{x_A^{(0)} - x_A^{(i)}} \left[x_A^{(0)} - x_A^{(i)} \left(1 + \ln \frac{x_A^{(0)}}{x_A^{(i)}} \right) \right] \quad (\text{IV, 85})$$

Дальнейший ход решения аналогичен рассмотренному в примере IV-2.

Анализ различных случаев проведения реакций в параллельно работающих реакторах можно было бы продолжить, но и приведенные примеры дают уже достаточно ясное представление о возможностях использования метода множителей Лагранжа для решения задач оптимального распределения потоков сырья.

Интересно отметить, что во всех приведенных примерах аналитическое выражение для $dr_i/dv^{(i)}$ [см. уравнения (IV, 55), (IV, 73), (IV, 80) и (IV, 85)] представляется только через концентрации реагентов на входе в реактор и выходе из него. Следовательно, в практических условиях эксплуатации рассмотренных систем аппаратов можно организовать контроль за оптимальным распределением нагрузки на реакторы непосредственно по данным измерения этих концентраций. При необходимости результаты измерения могут быть применены также и для автоматического управления оптимальным распределением общих потоков сырья.

3. ОПТИМИЗАЦИЯ МНОГОСТАДИЙНЫХ ПРОЦЕССОВ

Вывод основных соотношений

Метод неопределенных множителей можно с успехом использовать в задачах оптимизации многостадийных процессов с сосредоточенными параметрами, т. е. процессов, описываемых системами конечных уравнений. В качестве иллюстрации приведем многостадийный процесс, схематическое изображение которого показано на рис. IV-2.

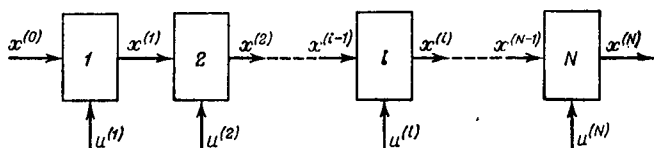


Рис. IV-2. Многостадийный управляемый процесс.

Такие процессы, в которых исходное сырье последовательно проходит ряд стадий переработки, чрезвычайно широко распространены в химических производствах, что делает их весьма важным объектом оптимизации.

Предположим, что каждая стадия указанного процесса описывается системой конечных уравнений

$$x_k^{(i)} = \varphi_k^{(i)} (x_1^{(i-1)}, x_2^{(i-1)}, \dots, x_{m_{i-1}}^{(i-1)}, u_1^{(i)}, u_2^{(i)}, \dots, u_{r_i}^{(i)}) \quad (\text{IV, 86})$$

$$k = 1, \dots, m_i$$

выражающей связь выходных параметров стадии $x_k^{(i)}$ ($k=1, \dots, m_i$) с ее входными параметрами $x_k^{(i-1)}$ ($k=1, \dots, m_{i-1}$) и используемыми на этой стадии управляющими воздействиями $u_l^{(i)}$ ($l=1, \dots, r_i$). Входные параметры i -й стадии, в свою очередь, являются выходными параметрами предыдущей стадии процесса. Размерность вектора выходных параметров стадии m_i в общем случае может быть не равна размерности вектора входных параметров m_{i-1} , однако для упрощения последующих выкладок предположим, что эти размерности равны, т. е.

$$m_{i-1} = m_i = m \quad i = 1, \dots, N \quad (\text{IV}, 87)$$

Допущение (IV, 87) не нарушает общности приводимых ниже рассуждений, так как всегда можно принять размерность векторов выходных параметров всех стадий равной максимальному значению, положив при необходимости некоторые из выходных параметров на ряде стадий тождественно равными нулю.

Относительно векторов управляющих воздействий на всех стадиях также будем считать, что их размерности одинаковы и равны r , что всегда можно принять добавлением на некоторых стадиях необходимого числа управляющих воздействий, тождественно равных нулю.

Далее примем, что критерий оптимальности многостадийного процесса задан в виде некоторой функции от выходных параметров процесса, т. е. от выходных параметров последней стадии $x_k^{(N)}$ ($k=1, \dots, m$):

$$R = R(x_1^{(N)}, x_2^{(N)}, \dots, x_m^{(N)}) \quad (\text{IV}, 88)$$

Нетрудно показать, что к такому критерию можно свести и любую другую постановку оптимальной задачи. Пусть, например, критерий оптимальности процесса зависит не только от выходных параметров последней стадии $x_k^{(N)}$ ($k=1, \dots, m$), но также и от параметра $x_p^{(j)}$, являющегося выходным для j -й стадии. Тогда, добавив к выходным параметрам всех стадий $x_k^{(i)}$ ($i=1, \dots, N$; $k=1, \dots, m$) еще один $x_{m+1}^{(i)}$ и определив его изменение по стадиям соотношениями

$$x_{m+1}^{(i)} = \begin{cases} 0 & i < j \\ x_p^{(j)} & i = j \\ x_{m+1}^{(i-1)} & i > j \end{cases} \quad (\text{IV}, 89)$$

снова получим возможность записать критерий оптимальности многостадийного процесса в виде (IV, 88) с увеличенным на единицу числом выходных параметров каждой стадии процесса.

Соотношения, характеризующие связь между выходными и входными параметрами и управляющими воздействиями, обязательно должны определять ее в явном виде, т. е. в виде уравнений

(IV, 86). В общем случае эта связь может быть задана в неявной форме:

$$f_k^{(i)}(x^{(i-1)}, x^{(i)}, u^{(i)}) = 0 \quad i = 1, \dots, N \quad k = 1, \dots, m \quad (\text{IV, 90})$$

Основная идея в применении метода неопределенных множителей для оптимизации рассмотренного выше многостадийного процесса состоит в том, что при решении задачи оптимизации соотношения (IV, 90), характеризующие связь входных и выходных параметров и управляющих воздействий на всех стадиях процесса, принимаются как ограничивающие условия, имеющие вид равенств, наложенные на переменные процесса $x_k^{(i)}$, часть из которых входит в выражение критерия оптимальности (IV, 88). Это, в свою очередь, позволяет использовать для решения оптимальной задачи математический аппарат метода неопределенных множителей Лагранжа (см. стр. 148).

С учетом сказанного выше, составим для рассматриваемого многостадийного процесса функцию Лагранжа Φ , которая имеет вид:

$$\Phi = R(x^{(N)}) - \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^m \lambda_k^{(i)} f_k^{(i)}(x^{(i-1)}, x^{(i)}, u^{(i)}) \quad (\text{IV, 91})$$

Для составления функции Φ в данном случае потребовалось ввести mN неопределенных множителей $\lambda_k^{(i)}$ в соответствии с числом уравнений (IV, 90), описывающих многостадийный процесс.

Для вывода соотношений, характеризующих экстремум критерия оптимальности (IV, 88), следует продифференцировать функцию Φ по всем переменным, включая и управляющие воздействия, и положить найденные производные равными нулю. При этом можно получить три типа уравнений.

В результате дифференцирования по $x_j^{(i)}$ ($i = 1, \dots, N-1$; $j = 1, \dots, m$) найдем:

$$\sum_{k=1}^m \left[\lambda_k^{(i+1)} \frac{\partial f_k^{(i+1)}(x^{(i)}, x^{(i+1)}, u^{(i+1)})}{\partial x_j^{(i)}} + \lambda_k^{(i)} \frac{\partial f_k^{(i)}(x^{(i-1)}, x^{(i)}, u^{(i)})}{\partial x_j^{(i)}} \right] = 0 \quad (\text{IV, 92})$$

Дифференцированием по $x_j^{(N)}$ ($j = 1, \dots, m$) получим:

$$\frac{\partial R(x^{(N)})}{\partial x_j^{(N)}} - \sum_{k=1}^m \lambda_k^{(N)} \frac{\partial f_k^{(N)}(x^{(N-1)}, x^{(N)}, u^{(N)})}{\partial x_j^{(N)}} = 0 \quad (\text{IV, 93})$$

Наконец, дифференцирование по $u_l^{(i)}$ ($i = 1, \dots, N$; $l = 1, \dots, r$) дает еще одну систему соотношений:

$$\sum_{k=1}^m \lambda_k^{(i)} \frac{\partial f_k^{(i)}(x^{(i-1)}, x^{(i)}, u^{(i)})}{\partial u_l^{(i)}} = 0 \quad (\text{IV, 94})$$

Для определения значений переменных $x_{(k)}^{(i)}$ и $u_l^{(i)}$, при которых критерий оптимальности (IV, 88) может иметь экстремальные значения, система уравнений (IV, 92)—(IV, 94) должна решаться совместно с уравнениями (IV, 90), для чего в общем случае необходимо использовать средства вычислительной техники. Однако для некоторых частных случаев эта система уравнений существенно упрощается, что позволяет даже иногда найти ее решение в аналитическом виде.

Каскад реакторов идеального смешения

Рассмотрим постановку оптимальной задачи для каскада реакторов идеального смешения, в котором проводится сложная химическая реакция, не изменяющая общего числа молей реагирующей смеси. Математическое описание каскада аппаратов с такой реакцией представляет собой систему уравнений материальных балансов для всех (или только ключевых) компонентов смеси, записанных для всех реакторов каскада:

$$f_k^{(i)} = x_k^{(i-1)} - x_k^{(i)} + \tau_i w_k^{(i)}(x^{(i)}) = 0 \quad k = 1, \dots, m \quad i = 1, \dots, N \quad (\text{IV, 95})$$

в которой $x_k^{(i)}$ — концентрация k -го реагента на выходе i -го реактора; τ_i — время пребывания реагентов в i -м реакторе; $w_k^{(i)}$ — скорость образования k -го реагента в i -м реакторе, являющаяся в общем случае функцией температуры T_i и концентраций всех реагентов $x_k^{(i)}$ в этом аппарате, т. е.

$$w_k^{(i)} = w_k^{(i)}(x^{(i)}, T_i) \quad (\text{IV, 96})$$

Предположим, что критерий оптимальности каскада задан в виде функции от состава смеси на выходе каскада и, кроме того, зависит от общего времени пребывания в нем реагентов τ :

$$R = R(x^{(N)}, \tau) \quad (\text{IV, 97})$$

Для того чтобы представить критерий оптимальности в виде функции только от выходных параметров каскада, введем дополнительную переменную $x_{m+1}^{(i)}$, определяемую соотношениями

$$f_{m+1}^{(i)} = x_{m+1}^{(i-1)} - x_{m+1}^{(i)} + \tau_i = 0, \quad x_{m+1}^{(0)} = 0 \quad i = 1, \dots, N \quad (\text{IV, 98})$$

которые при решении задачи оптимизации должны рассматриваться совместно с системой уравнений (IV, 95).

С учетом величины $x_{m+1}^{(i)}$ выражение для критерия оптимальности (IV, 97) перепишется в виде:

$$R = R(x^{(N)}, x_{m+1}^{(N)}) \quad (\text{IV, 99})$$

В качестве независимых переменных, выбор значений которых обеспечивает экстремум критерия оптимальности (IV, 99), принимаются температура T_i и время пребывания реагентов τ_i во всех реакторах каскада.

Система уравнений (IV, 92) — (IV, 94) для рассматриваемого варианта постановки оптимальной задачи приобретает вид:

$$\lambda_j^{(i+1)} - \lambda_j^{(i)} + \tau_i \sum_{k=1}^m \lambda_k^{(i)} \frac{\partial w_k^{(i)}(x^{(i)}, T_i)}{\partial x_j^{(i)}} = 0 \quad (IV, 100)$$

$$i = 1, \dots, N-1 \quad j = 1, \dots, m$$

$$\lambda_{m+1}^{(i+1)} - \lambda_{m+1}^{(i)} = 0 \quad i = 1, \dots, N-1 \quad (IV, 100a)$$

$$\frac{\partial R(x^{(N)}, x_{m+1}^{(N)})}{\partial x_j^{(N)}} - \lambda_j^{(N)} + \tau_N \sum_{k=1}^m \lambda_k^{(N)} \frac{\partial w_k^{(N)}(x^{(N)}, T_N)}{\partial x_j^{(N)}} = 0 \quad j = 1, \dots, m \quad (IV, 101)$$

$$\frac{\partial R(x^{(N)}, x_{m+1}^{(N)})}{\partial x_{m+1}^{(N)}} - \lambda_{m+1}^{(N)} = 0 \quad (IV, 101a)$$

$$\sum_{k=1}^m \lambda_k^{(i)} \frac{\partial w_k^{(i)}(x^{(i)}, T_i)}{\partial T_i} = 0 \quad i = 1, \dots, N \quad (IV, 102)$$

$$\sum_{k=1}^m \lambda_k^{(i)} w_k^{(i)}(x^{(i)}, T_i) + \lambda_{m+1}^{(i)} = 0 \quad i = 1, \dots, N \quad (IV, 102a)$$

Система уравнений (IV, 100) — (IV, 102 а) включает $(m+3)N$ уравнений, решение которых совместно с условиями (IV, 95) и (IV, 98), содержащими $(m+1)N$ уравнений, позволяет определить $(m+3)N$ значений неизвестных $x_k^{(i)}$, τ_i , T_i ($i = 1, \dots, N$; $k = 1, \dots, m+1$) и $(m+1)N$ значений $\lambda_k^{(i)}$ ($i = 1, \dots, N$; $k = 1, \dots, m+1$).

Возможна и другая постановка задачи оптимизации каскада реакторов идеального смешения, отличающаяся от приведенной выше.

Допустим, что требуется найти наибольшее или наименьшее значение критерия оптимальности, заданного как функция только состава смеси на выходе каскада:

$$R = R(x^{(N)}) \quad (IV, 103)$$

но при условии, что на выбор значений τ_i наложено ограничение

$$\sum_{i=1}^N \tau_i - \tau = 0 \quad (IV, 104)$$

т. е. для заданного общего времени пребывания реагентов в каскаде реакторов τ необходимо оптимизировать критерий (IV, 103).

Система уравнений (IV, 92) — (IV, 94) в этом случае имеет несколько иной вид из-за того, что в функцию Φ (IV, 91) нужно включить также ограничение (IV, 104).

Опуская промежуточные выкладки, которые несущественно отличаются от выполненных ранее, запишем лишь конечную

систему уравнений, определяющую для заданного варианта экстремальное значение критерия оптимальности (IV, 103):

$$\lambda_j^{(i+1)} - \lambda_j^{(i)} + \tau_i \sum_{k=1}^m \lambda_k^{(i)} \frac{\partial \omega_k^{(i)}(x^{(i)}, T_i)}{\partial x_j^{(i)}} = 0 \quad (IV, 105)$$

$$i = 1, \dots, N-1 \quad j = 1, \dots, m$$

$$\frac{\partial R(x^{(N)})}{\partial x_j^{(N)}} - \lambda_j^{(N)} + \tau_N \sum_{k=1}^m \lambda_k^{(N)} \frac{\partial \omega_k^{(N)}(x^{(N)}, T_i)}{\partial x_j^{(N)}} = 0 \quad j = 1, \dots, m \quad (IV, 106)$$

$$\sum_{k=1}^m \lambda_k^{(i)} \frac{\partial \omega_k^{(i)}(x^{(i)}, T_i)}{\partial T_i} = 0 \quad i = 1, \dots, N \quad (IV, 107)$$

$$\sum_{k=1}^m \lambda_k^{(i)} \omega_k^{(i)}(x^{(i)}, T_i) + \lambda_\tau = 0 \quad i = 1, \dots, N \quad (IV, 107a)$$

причем λ_τ — неопределенный множитель, соответствующий условию (IV, 104).

Решение систем уравнений, рассмотренных выше, как правило, достаточно сложно и обычно выполняется на вычислительных машинах. Лишь в очень простых случаях, один из которых приведен ниже, можно найти аналитическое решение.

Пример IV-5. Для каскада реакторов идеального смешения, в котором осуществляется реакция типа



скорость которой

$$w_A = -kx_A \quad (IV, 109)$$

найти оптимальное распределение заданного времени пребывания по всем аппаратам каскада, обеспечивающее максимальное превращение реагента A , если температура во всех реакторах одинакова и равна заданному значению.

Решение. Система уравнений (IV, 95) для каскада реакторов в данном случае имеет вид:

$$x^{(i-1)} - x^{(i)} - \tau_i k x^{(i)} = 0 \quad i = 1, \dots, N \quad (IV, 110)$$

Поскольку на выбор значений τ_i наложено ограничение (IV, 104), для решения оптимальной задачи используется система уравнений (IV, 105) — (IV, 107a). Критерий оптимальности каскада при этом может быть представлен как

$$R = x^{(N)} \quad (IV, 111)$$

С учетом выражений (IV, 109) и (IV, 111) система уравнений (IV, 105) — (IV, 107a) записывается в виде:

$$\lambda^{(i+1)} - \lambda^{(i)}(1 + \tau_i k) = 0 \quad i = 1, \dots, N-1 \quad (IV, 112)$$

$$1 - \lambda^{(N)}(1 + \tau_N k) = 0 \quad (IV, 113)$$

$$-\lambda^{(i)} k x^{(i)} + \lambda_\tau = 0 \quad i = 1, \dots, N \quad (IV, 114)$$

Система уравнений (IV, 112) — (IV, 114) должна решаться совместно с системой (IV, 110) и уравнением (IV, 104), в результате чего определяются значения λ_τ , $\lambda^{(i)}$, $x^{(i)}$, τ_i ($i = 1, \dots, N$).

Нетрудно показать, что, с одной стороны, из системы уравнений (IV, 112) и (IV, 113) следует:

$$\lambda^{(i)} = \prod_{l=i}^N (1 + \tau_l k)^{-1} \quad (\text{IV, 115})$$

С другой стороны, из системы (IV, 110) можно получить формулу:

$$x^{(i)} = x^{(0)} \prod_{l=1}^i (1 + \tau_l k)^{-1} \quad (\text{IV, 116})$$

Подставляя значения $\lambda^{(i)}$ и $x^{(i)}$ из выражений (IV, 115) и (IV, 116) в соотношение (IV, 114), найдем:

$$\lambda_\tau = k x^{(0)} (1 + \tau_i k)^{-1} \prod_{l=1}^N (1 + \tau_l k)^{-1} \quad (\text{IV, 117})$$

откуда

$$\tau_i = \frac{1}{k} \left[\frac{k x^{(0)}}{\lambda_\tau} \prod_{l=1}^N (1 + \tau_l k)^{-1} - 1 \right] \quad (\text{IV, 118})$$

Из последнего выражения (IV, 118) видно, что оптимальное время пребывания в i -м реакторе τ не зависит от номера аппарата. Комбинируя теперь выражение (IV, 118) и последнее неиспользованное условие (IV, 104), получим уравнение

$$\frac{N}{k} \left[\frac{k x^{(0)}}{\lambda_\tau} \prod_{l=1}^N (1 + \tau_l k)^{-1} - 1 \right] - \tau = 0 \quad (\text{IV, 119})$$

из которого находим:

$$\lambda_\tau = k x^{(0)} \left(\frac{k \tau}{N} + 1 \right)^{-1} \prod_{l=1}^N (1 + \tau_l k)^{-1} \quad (\text{IV, 120})$$

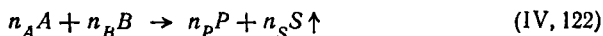
Подстановка значения λ_τ из выражения (IV, 120) в формулу (IV, 118) позволяет получить:

$$\tau_i = \frac{\tau}{N} \quad (\text{IV, 121})$$

т. е. время пребывания τ должно быть равным образом распределено между всеми реакторами каскада для достижения максимальной степени превращения исходного реагента A в каскаде.

В случае решения задач оптимизации многостадийных процессов с сосредоточенными параметрами при применении метода неопределенных множителей наилучший способ не всегда заключается в решении общей системы уравнений (IV, 90), (IV, 92) — (IV, 94). Иногда, используя особенности математического описания оптимизируемого процесса, можно уменьшить порядок решаемой системы за счет соответствующих предварительных преобразований уравнений математического описания и сокращения числа вводимых неопределенных множителей.

Рассмотрим задачу оптимального распределения объемов в каскаде N реакторов, применяемом для проведения реакции



скорость которой по условиям процесса зависит только от концентрации исходного реагента A и описывается выражением:

$$w_A = -n_A k x_A^{n_A} \quad (\text{IV, 123})$$

Предположим для общности рассматриваемого случая, что количество смеси на входе в аппарат не равно количеству на его выходе. (Например, вследствие образования одного из продуктов реакции в виде газовой фазы или распределения подпитки на все реакторы каскада или же за счет того и другого вместе.)

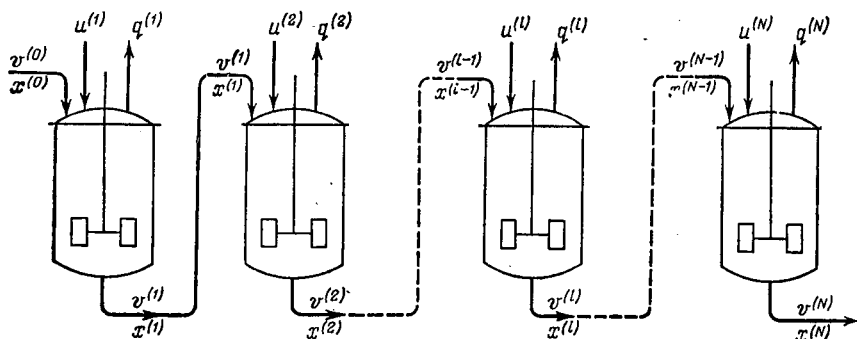


Рис. IV-3. Схема каскада реакторов идеального смешения.

Кроме того, количество реагирующей смеси, поступающей в различные аппараты, может также меняться в результате изменения общего числа молей в процессе химического превращения, что также необходимо учитывать при использовании математического описания, в котором потоки представлены в мольном выражении.

Схематическое изображение такого каскада показано на рис. IV-3, где обозначены потоки, участвующие в процессе. Для сокращения записи в дальнейшем у величины $x_A^{(i)}$, характеризующей концентрацию реагента A на выходе i -го реактора, индекс A опущен. Помимо этого, предполагается, что подпитка реакторов не содержит исходного реагента A и ее величина для всех аппаратов каскада $u^{(i)}$ задана.

Допустим, что оптимальная задача для рассматриваемого каскада реакторов заключается в отыскании такого распределения объемов по всем аппаратам, при котором заданная степень превращения исходного реагента A достигается при минимальном суммарном объеме реакторов. Другими словами, критерий опти-

мальности в данном случае имеет вид

$$R = \sum_{i=1}^N V_r^{(i)} \quad (\text{IV}, 124)$$

а его минимальное значение находится при условии

$$\kappa^{(N)} - \kappa = 0 \quad (\text{IV}, 125)$$

в котором κ — заданное значение степени превращения реагента A на выходе каскада; $\kappa^{(N)}$ — степень превращения реагента A на выходе каскада, определяемая формулой:

$$\kappa^{(N)} = \frac{v^{(0)}x^{(0)} - v^{(N)}x^{(N)}}{v^{(0)}x^{(0)}} \quad (\text{IV}, 126)$$

Ограничение (IV, 125) не содержит в явном виде независимых переменных $V_r^{(i)}$, влияние которых проявляется лишь через величину $x^{(N)}$. Поэтому функция Лагранжа не может быть составлена только из выражений (IV, 124) и (IV, 125) и должна включать также уравнения математического описания реакторов, содержащие в явном виде переменные $V_r^{(i)}$. Для этого необходимо ввести соответствующее число неопределенных множителей, подлежащих нахождению при решении оптимальной задачи.

Однако в данном случае все же возможно заменой переменных найти достаточно удобные аналитические выражения, позволяющие при использовании метода множителей Лагранжа получить конечные результаты значительно быстрее.

Для этого вместо независимых переменных $V_r^{(i)}$ введем новые переменные η_i , которые представим выражениями:

$$\eta_i = \frac{v^{(i)}x^{(i)}}{v^{(i-1)}x^{(i-1)}} \quad (\text{IV}, 127)$$

Величина η_i имеет определенный физический смысл, заключающийся в том, что ее значение равно доле непрореагировавшего реагента A для i -го реактора, вычисляемой по отношению к количеству вещества A , подаваемому в аппарат.

С помощью величин η_i ($i = 1, \dots, N$) можно рассчитать долю непрореагировавшего реагента A для всего каскада по формуле:

$$\eta^{(N)} = \eta_1 \eta_2 \dots \eta_N = \prod_{i=1}^N \eta_i \quad (\text{IV}, 128)$$

Эта доля $\eta^{(N)}$ связана со степенью превращения вещества A в каскаде $\kappa^{(N)}$ очевидным соотношением

$$\eta^{(N)} = 1 - \kappa^{(N)} \quad (\text{IV}, 129)$$

с учетом которого условие (IV, 125) может быть записано в виде:

$$\prod_{i=1}^N \eta_i - \eta = 0 \quad (\text{IV, 130})$$

причем $\eta = 1$ — рассматривается как заданная величина.

Остается выразить величины $V_r^{(i)}$ через новые переменные η_i , для чего необходимо воспользоваться уравнениями математического описания реакторов каскада.

В рассматриваемом случае математическое описание i -го реактора включает:

а) уравнение общего материального баланса

$$v^{(i-1)} + u^{(i)} - q^{(i)} - v^{(i)} = 0 \quad (\text{IV, 131})$$

б) уравнение материального баланса по реагенту A

$$v^{(i-1)}x^{(i-1)} - v^{(i)}x^{(i)} - V_r^{(i)}n_Ak^{(i)}(x^{(i)})^{n_A} = 0 \quad (\text{IV, 132})$$

в) уравнение мольного баланса для жидкой фазы реактора

$$v^{(i-1)} + u^{(i)} - v^{(i-1)}x^{(i-1)}(1 - \eta_i)v - v^{(i)} = 0 \quad (\text{IV, 133})$$

в котором

$$v = 1 - \frac{n_B}{n_A} + \frac{n_P}{n_A}$$

По выражению (IV, 127) нетрудно получить уравнение для количества реагента A , отводимого из i -го аппарата с реакторным остатком, через общее количество этого реагента $v^{(0)}x^{(0)}$, поступающее в каскад, и величины η_k ($k = 1, \dots, i$), заданные для всех предшествующих реакторов:

$$v^{(i)}x^{(i)} = v^{(0)}x^{(0)} \prod_{k=1}^i \eta_k \quad (\text{IV, 134})$$

Записав уравнение (IV, 133) в виде

$$v^{(P)} = v^{(P-1)} + u^{(P)} - v(1 - \eta_P) \prod_{k=1}^{P-1} \eta_k \quad (\text{IV, 135})$$

и просуммировав левую и правую части соотношения (IV, 135) по P от 1 до i , получим следующую формулу, определяющую количество реакторного остатка на выходе i -го реактора:

$$v^{(i)} = v^{(0)} + \sum_{P=1}^i u^{(P)} - v \sum_{P=1}^i \left(\prod_{k=1}^{P-1} \eta_k - \prod_{k=1}^P \eta_k \right) \quad (\text{IV, 136})$$

Входящая в правую часть формулы (IV, 136) сумма произведений может быть легко вычислена:

$$\sum_{P=1}^i \left(\prod_{k=1}^{P-1} \eta_k - \prod_{k=1}^P \eta_k \right) = 1 - \prod_{k=1}^i \eta_k \quad (\text{IV, 137})$$

В результате найдем формулу для расчета количества реакторного остатка на выходе i -го реактора в следующем виде

$$v^{(i)} = v^{(0)} \left(A_i + B \prod_{k=1}^i \eta_k \right) \quad (\text{IV, 138})$$

где для сокращения записи введены обозначения:

$$A_i = 1 - vx^{(0)} + \frac{1}{v^{(0)}} \sum_{k=1}^i u^{(k)} \quad (\text{IV, 139})$$

$$B = vx^{(0)} \quad (\text{IV, 140})$$

Зная величину $v^{(i)}$, из уравнения (IV, 134) можно найти значение концентрации реагента A в i -ом реакторе:

$$x^{(i)} = x^{(0)} \frac{\prod_{k=1}^i \eta_k}{A_i + B \prod_{k=1}^i \eta_k} = \frac{x^{(0)}}{A_i \prod_{k=1}^i \eta_k^{-1} + B} \quad (\text{IV, 141})$$

Теперь можно записать выражение, связывающее значения $V_r^{(i)}$ с новыми переменными η_i , для чего необходимо воспользоваться уравнением (IV, 132), из которого следует:

$$V_r^{(i)} = \frac{v^{(i-1)} x^{(i-1)} - v^{(i)} x^{(i)}}{n_A k^{(i)} (x^{(i)})^{n_A}} \quad (\text{IV, 142})$$

Подставляя в соотношение (IV, 142) значения $v^{(i)} x^{(i)}$ и $x^{(i)}$, выраженные через новые независимые переменные η_i в соответствии с формулами (IV, 134) и (IV, 141), получим:

$$V_r^{(i)} = \frac{v^{(0)} x^{(0)}}{n_A k^{(i)} (x^{(0)})^{n_A}} \left(\frac{1}{\eta_i} - 1 \right) \prod_{k=1}^i \eta_k \left(A_i \prod_{k=1}^i \eta_k^{-1} + B \right)^{n_A} \quad (\text{IV, 143})$$

Поскольку рассматривается простая реакция, скорость которой увеличивается с возрастанием температуры, естественно предположить, что во всех реакторах каскада поддерживается одинаковая температура, равная допустимому технологическими условиями максимальному значению. В этом случае можно принять, что константы скорости реакции $k^{(i)}$ одинаковы во всех аппаратах, и выражение (IV, 143) может быть представлено как

$$V_r^{(i)} = C \left(\frac{1}{\eta_i} - 1 \right) \prod_{k=1}^i \eta_k \left(A_i \prod_{k=1}^i \eta_k^{-1} + B \right)^{n_A} \quad (\text{IV, 144})$$

где введено обозначение:

$$C = \frac{v^{(0)}}{n_A k^{(0)} (x^{(0)})^{n_A - 1}} \quad (\text{IV, 145})$$

С учетом выражения (IV, 144) критерий оптимальности, равный суммарному объему каскада, принимает вид:

$$R(\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_N) = \sum_{i=1}^N V_r^{(i)} = \\ = C \sum_{i=1}^N \left(\frac{1}{\eta_i} - 1 \right) \prod_{k=1}^i \eta_k \left(A_i \prod_{k=1}^i \eta_k^{-1} + B \right)^{n_A} \quad (\text{IV, 146})$$

Для решения задачи выбора оптимальных значений η_i теперь можно составить следующую функцию Лагранжа:

$$\Phi(\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_N, \lambda) = \sum_{i=1}^N V_r^{(i)}(\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_i) - \lambda \left(\prod_{i=1}^N \eta_i - \eta \right) \quad (\text{IV, 147})$$

Прежде чем приступить к дифференцированию функции Φ по всем переменным η_i ($i = 1, \dots, N$), отметим одно свойство величин $V_r^{(i)}$, рассматриваемых как функции переменных η_i . Каждая из указанных величин зависит только от тех переменных η_i , для которых индекс i меньше или равен l . Это значит, что при дифференцировании суммы

$$\sum_{i=1}^N V_r^{(i)}(\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_i)$$

по η_i в полученной производной останутся только те члены, в которых индекс i больше или равен l . Кроме того, заметим, что дифференцирование произведения $\prod_{k=1}^i \eta_k$ по η_l эквивалентно делению этого произведения на величину η_l , т. е.

$$\frac{\partial}{\partial \eta_l} \left(\prod_{k=1}^i \eta_k \right) = \frac{1}{\eta_l} \prod_{k=1}^i \eta_k \quad l \leq i \quad (\text{IV, 148})$$

Можно также показать справедливость и другого выражения

$$\frac{\partial}{\partial \eta_l} \left(\prod_{k=1}^i \eta_k^{-1} \right) = - \frac{1}{\eta_l} \prod_{k=1}^i \eta_k^{-1} \quad l \leq i \quad (\text{IV, 149})$$

которое использовано ниже при вычислении производных.

На основании сделанных выше замечаний, для производной $\partial \Phi / \partial \eta_l$ получим следующее уравнение:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \eta_l} = \sum_{i=l}^N \frac{\partial V_r^{(i)}}{\partial \eta_l} - \frac{\lambda}{\eta_l} \prod_{i=1}^N \eta_i \quad (\text{IV, 150})$$

Аналогично для производной $\partial\Phi/\partial\eta_{l+1}$ может быть найдено выражение:

$$\frac{\partial\Phi}{\partial\eta_{l+1}} = \sum_{i=l+1}^N \frac{\partial V_r^{(i)}}{\partial\eta_{l+1}} - \frac{\lambda}{\eta_{l+1}} \prod_{i=1}^N \eta_i \quad (\text{IV, 151})$$

Согласно процедуре применения метода множителей Лагранжа, эти производные следует приравнять нулю и совместно с уравнениями, получаемыми приравниванием остальных производных по η_i , и уравнением (IV, 130) решать относительно величин η_i ($i = 1, \dots, N$). Найденная таким образом совокупность значений η_i и определит возможные точки условного экстремума функции R (IV, 146).

Решение этой системы уравнений в аналитическом виде в общем случае реакции произвольного порядка получить нельзя. Поэтому более целесообразно воспользоваться приемом исключения неопределенных множителей, что позволяет вывести достаточно удобное для численных расчетов рекуррентное соотношение между величинами η_i .

Для этого, приравнявая выражения (IV, 150) и (IV, 151) нулю, запишем их соответственно в виде:

$$\sum_{i=l}^N \frac{\partial V_r^{(i)}}{\partial\eta_l} = \frac{\lambda}{\eta_l} \prod_{i=1}^N \eta_i \quad (\text{IV, 152})$$

$$\sum_{i=l+1}^N \frac{\partial V_r^{(i)}}{\partial\eta_{l+1}} = \frac{\lambda}{\eta_{l+1}} \prod_{i=1}^N \eta_i \quad (\text{IV, 153})$$

После умножения уравнения (IV, 152) на η_l , а уравнения (IV, 153) — на η_{l+1} найдем:

$$\sum_{i=l}^N \eta_i \frac{\partial V_r^{(i)}}{\partial\eta_l} = \lambda \prod_{i=1}^N \eta_i \quad (\text{IV, 154})$$

$$\sum_{i=l+1}^N \eta_{l+1} \frac{\partial V_r^{(i)}}{\partial\eta_{l+1}} = \lambda \prod_{i=1}^N \eta_i \quad (\text{IV, 155})$$

Правые части двух последних уравнений тождественно равны между собой, что дает возможность исключить из них параметр λ :

$$\eta_l \frac{\partial V_r^{(l)}}{\partial\eta_l} + \eta_l \frac{\partial V_r^{(l+1)}}{\partial\eta_l} - \eta_{l+1} \frac{\partial V_r^{(l+1)}}{\partial\eta_{l+1}} + \sum_{i=l+2}^N \left(\eta_l \frac{\partial V_r^{(i)}}{\partial\eta_l} - \eta_{l+1} \frac{\partial V_r^{(i+1)}}{\partial\eta_{l+1}} \right) = 0 \quad (\text{IV, 156})$$

Вычисляя значение производной $\partial V_r^{(l)}/\partial \eta_l$ при $l > i$, найдем:

$$\frac{\partial V_r^{(i)}}{\partial \eta_l} = \frac{1}{\eta_l} \left(\frac{1}{\eta_l} - 1 \right) \left(A_i \prod_{k=1}^i \eta_k^{-1} + B \right)^{n_A} \prod_{k=1}^i \eta_k \left(1 - \frac{n_A A_i}{A_i + B \prod_{k=1}^i \eta_k} \right) \quad (\text{IV, 157})$$

Из выражения (IV, 157) нетрудно установить, что величина произведения $\eta_l \left(\frac{\partial V_r^{(i)}}{\partial \eta_l} \right)$ не зависит от переменной η_l , по которой осуществляется дифференцирование. Таким образом, значение суммы в соотношении (IV, 156) будет равно нулю, так как все его слагаемые (выражения, заключенные в круглые скобки) тождественно равны нулю, и это соотношение может быть записано в виде:

$$\eta_l \frac{\partial V_r^{(l)}}{\partial \eta_l} + \eta_l \frac{\partial V_r^{(l+1)}}{\partial \eta_l} - \eta_{l+1} \frac{\partial V_r^{(l+1)}}{\partial \eta_{l+1}} = 0 \quad (\text{IV, 158})$$

Остается найти значение производной $\partial V_r^{(l)}/\partial \eta_l$ при $i = l$.

Дифференцируя выражение (IV, 144), в котором предварительно принято $i = l$, после преобразований получим:

$$\frac{\partial V_r^{(l)}}{\partial \eta_l} = - \frac{1}{\eta_l} \prod_{k=1}^l \eta_k \left(A_l \prod_{k=1}^l \eta_k^{-1} + B \right)^{n_A} \left(1 + \frac{1 - \eta_l}{\eta_l} \frac{n_A A_l}{A_l + B \prod_{k=1}^l \eta_k} \right) \quad (\text{IV, 159})$$

Подставляя в уравнение (IV, 156) выражения для производных (IV, 157) и (IV, 159), после упрощений находим

$$\left(A_l \prod_{k=1}^l \eta_k^{-1} + B \right) \left(1 + \frac{1 - \eta_l}{\eta_l} \frac{n_A A_l}{A_l + B \prod_{k=1}^l \eta_k} \right) - \left(A_{l+1} \prod_{k=1}^{l+1} \eta_k + B \right)^{n_A} = 0 \quad (\text{IV, 160})$$

откуда уже несложно получить рекуррентное соотношение

$$\eta_{l+1} = \frac{A_{l+1}}{\left(A_l + B \prod_{k=1}^l \eta_k \right) \left(1 + \frac{1 - \eta_l}{\eta_l} \frac{n_A A_l}{A_l + B \prod_{k=1}^l \eta_k} \right)^{1/n_A} - B \prod_{k=1}^l \eta_k} \quad (\text{IV, 161})$$

которое позволяет по известным значениям η_k ($k = 1, \dots, l$) определить оптимальную величину η_{l+1} .

Таким образом, задача расчета оптимального каскада реакторов сведена к выбору значения η_1 для первого аппарата каскада, так как остальные величины $\eta_i (i = 2, \dots, N)$ находятся последовательно с помощью рекуррентного соотношения (IV, 161). При этом значение η_1 должно быть выбрано таким, чтобы значения η_i , вычисленные с использованием указанного соотношения, удовлетворяли условию (IV, 130).

Поэтому полезно знать некоторые аналитические свойства соотношения (IV, 161), важнейшие из которых следующие:

1. Все величины η_i , рассчитанные по рекуррентному соотношению (IV, 161), являются монотонно возрастающими функциями значения η_1 при изменении η_1 в интервале от 0 до 1. Справедливость этого свойства следует из положительности производной $\partial \eta_{i+1} / \partial \eta_1$, которая может быть найдена дифференцированием выражения (IV, 161).

2. При $\eta_1 = 0$ все остальные значения η_i , определяемые рекуррентным соотношением (IV, 161), также равны нулю. Это свойство с очевидностью следует из выражения (IV, 161), поскольку при $\eta_1 = 0$ величина η_2 также равна нулю из-за обращения знаменателя этого выражения в бесконечность.

Приведенные свойства рекуррентного соотношения (IV, 161) дают возможность сделать вывод, что зависимость

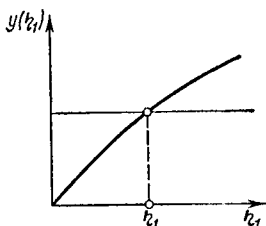


Рис. IV-4. Графическое определение оптимального значения η_1 .

$$y(\eta_1) = \prod_{i=1}^N \eta_i \quad (\text{IV, 162})$$

где η_i — последовательные значения, определяемые соотношением (IV, 161), представляет собой монотонно возрастающую функцию величины η_1 , которая принимает нулевое значение при $\eta_1 = 0$.

Подобный характер зависимости $y(\eta_1)$ позволяет легко отыскивать совокупность значений $\eta_i (i = 1, \dots, N)$, являющуюся решением оптимальной задачи, простым графическим построением (рис. IV-4).

Значение η_1 при этом находится как абсцисса точки пересечения кривой, описываемой уравнением (IV, 162), с прямой $y = \eta_1$, где η — величина, заданная условиями оптимальной задачи.

Разумеется, что в данном случае может быть использован также любой численный метод решения одного уравнения с одной неизвестной величиной. Причем после расчета значения η_1 все остальные величины $\eta_i (i = 2, \dots, N)$ также определены, поскольку их применяли для расчета значения $y(\eta_1)$.

Рассмотрим теперь несколько частных примеров, для которых найденное рекуррентное соотношение (IV, 161) дает возможность провести более детальный анализ решения оптимальной задачи.

Пример IV-6. При помощи рекуррентного соотношения (IV, 161) исследовать оптимальные условия в каскаде реакторов для реакции первого порядка ($n_A = 1$).

Решение. В случае реакции первого порядка ($n_A = 1$) рекуррентное соотношение (IV, 161) принимает весьма простую форму:

$$\eta_{l+1} = \frac{A_{l+1}}{A_l} \eta_l \quad (\text{IV, 163})$$

Из выражения (IV, 163) следует также уравнение

$$\eta_l = \frac{A_l}{A_1} \eta_1 \quad (\text{IV, 164})$$

которое позволяет после подстановки в условие (IV, 130) получить соотношение

$$\eta_1^N \frac{\prod_{k=1}^N A_k}{A_1^N} - \eta = 0 \quad (\text{IV, 165})$$

определяющее оптимальное значение η_1 :

$$\eta_1 = A_1 \left(\frac{\eta}{\prod_{k=1}^N A_k} \right)^{1/N} \quad (\text{IV, 166})$$

Подставляя теперь формулу (IV, 166) в соотношение (IV, 164), найдем:

$$\eta_i = A_i \left(\eta \prod_{k=1}^N A_k^{-1} \right)^{1/N} \quad i = 1, \dots, N \quad (\text{IV, 167})$$

Выражение (IV, 167) дает решение исходной оптимальной задачи, поскольку значения A_i ($i = 1, \dots, N$) известны и могут быть рассчитаны по формуле (IV, 139).

Оптимальные объемы реакторов каскада могут быть рассчитаны по формуле (IV, 144), которая для случая реакции первого порядка также упрощается:

$$V_r^{(i)} = \frac{v^{(0)}}{k^{(0)}} \left(\frac{1}{\eta_i} - 1 \right) \left(A_i + B \prod_{k=1}^i \eta_k \right) \quad (\text{IV, 168})$$

Подставляя в формулу (IV, 168) значение η_i из выражения (IV, 167), получим:

$$V_r^{(i)} = \frac{v^{(0)}}{k^{(0)}} \left[\frac{1}{A_i} \left(\frac{1}{\eta} \prod_{k=1}^N A_k \right)^{1/N} - 1 \right] \left(A_i + B \eta^{1/N} \prod_{k=1}^N A_k^{-1} \right) \quad (\text{IV, 169})$$

Воспользовавшись формулой (IV, 169), можно найти следующее выражение для суммарного объема всех реакторов каскада:

$$\sum_{i=1}^N V_r^{(i)} = \frac{v^{(0)}}{k^{(0)}} \left[N \left(\frac{1}{\eta} \prod_{k=1}^N A_k \right)^{1/N} - \sum_{k=1}^N A_k + B (1 - \eta) \right] \quad (\text{IV, 170})$$

При отсутствии подпитки реакторов все полученные выражения еще более упрощаются. При этом все величины A , определяемые соотношением (IV, 139), будут равны между собой:

$$A_i = 1 - vx^{(0)} = 1 - B \quad (\text{IV, 171})$$

Подстановка выражения (IV, 171) в формулу (IV, 167) позволяет найти:

$$\eta_i = \eta^{1/N} \quad (\text{IV, 172})$$

Формула (IV, 172) означает, что для оптимального каскада в каждом аппарате должна реагировать одна и та же доля вещества A , подаваемого в данный реактор.

Соотношения (IV, 169) и (IV, 170) в этом случае принимают вид:

$$V_r^{(i)} = \frac{v^{(0)}}{k^{(0)}} (\eta^{-1/N} - 1) [1 - B(1 - \eta^{1/N})] \quad (\text{IV, 173})$$

$$\sum_{i=1}^N V_r^{(i)} = \frac{v^{(0)}}{k^{(0)}} [N(1 - B)(\eta^{-1/N} - 1) + B(1 - \eta)] \quad (\text{IV, 174})$$

Наконец, если в процессе химического превращения не происходит изменения числа молей реагирующих веществ и продукты реакции не выделяются в виде газовой фазы ($B = 0$), то формулы (IV, 173) и (IV, 174) еще более упрощаются:

$$V_r^{(i)} = \frac{v^{(0)}}{k^{(0)}} (\eta^{-1/N} - 1) \quad (\text{IV, 175})$$

$$\sum_{i=1}^N V_r^{(i)} = \frac{v^{(0)}}{k^{(0)}} N (\eta^{-1/N} - 1) \quad (\text{IV, 176})$$

В частности, из выражения (IV, 175) следует, что в последнем случае объемы всех реакторов оптимального каскада равны между собой.

Пример IV-7. Для каскада реакторов идеального смешения, в котором проводится реакция первого порядка, протекающая без изменения числа молей реагирующих веществ, определить выигрыш в суммарном реакционном объеме каскада по сравнению с одиночным реактором идеального смешения, рассчитанным на ту же степень превращения исходного реагента A .

Решение. Для расчета объема одиночного реактора можно воспользоваться формулой (IV, 175), положив в ней $N = 1$:

$$V_{r1} = \frac{v^{(0)}}{k^{(0)}} \left(\frac{1}{\eta} - 1 \right) \quad (\text{IV, 177})$$

В качестве оценки выигрыша в реакционном объеме при замене одиночного аппарата каскадом N реакторов примем величину отношения:

$$\frac{V_{rN}}{V_{r1}} = \frac{\sum_{i=1}^N V_r^{(i)}}{V_{r1}} = \frac{N(\eta^{-1/N} - 1)}{\eta^{-1} - 1} \quad (\text{IV, 178})$$

С помощью предельного перехода при $N \rightarrow \infty$ нетрудно оценить также максимально возможный выигрыш в реакционном объеме, который можно обеспечить при бесконечном увеличении числа реакторов в каскаде. Применяя правило

Лопитала [1] для раскрытия неопределенности $\infty \cdot 0$ в числителе выражения (IV, 178), получим:

$$\frac{V_{r,\infty}}{V_{r1}} = -\frac{\ln \eta}{\eta^{-1} - 1} \quad (\text{IV, 179})$$

Этот выигрыш практически достигается при переходе от реактора идеального смещения к реактору идеального вытеснения, так как каскад с бесконечно большим числом аппаратов, каждый из которых имеет объем, стремящийся к нулю, эквивалентен реактору идеального вытеснения.

Выражения (IV, 178) и (IV, 179) показывают, что возможный выигрыш в реакционном объеме зависит от степени превращения реагента А, на которую рассчитывается реакторная система.

В табл. 3 представлены результаты вычислений по формулам (IV, 178) и (IV, 179) для трех значений степени превращения реагента А. Эти же данные показаны на рис. IV-5 в виде графиков.

ТАБЛИЦА 3

Сравнение суммарного объема каскада реакторов V_{rN} с объемом одиночного реактора V_{r1} для различных степеней превращения исходного реагента А в случае реакции первого порядка

Степень превращения	x_A	0,80	0,90	0,95	Степень превращения	x_A	0,80	0,90	0,95
$\frac{V_{rN}}{V_{r1}}$	$N=1$	1,0	1,0	1,0	$\frac{V_{rN}}{V_{r1}}$	$N=4$	0,495	0,347	0,236
	$N=2$	0,620	0,480	0,366		$N=5$	0,474	0,325	0,215
	$N=3$	0,533	0,383	0,270		$N=\infty$	0,402	0,256	0,158

Как следует из приведенной таблицы и рис. IV-5, использование каскада реакторов с $N > 3-4$ дает уже несущественный выигрыш в уменьшении общего объема каскада для рассмотренных степеней превращения. Кроме того, резуль-

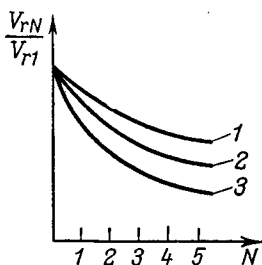


Рис. IV-5. Уменьшение суммарного объема каскада реакторов при увеличении числа реакторов в каскаде, рассчитанном на заданную степень превращения исходных реагентов.

таты, представленные в табл. 3, показывают, что наибольший выигрыш в требуемом реакционном объеме можно получить при высоких степенях превращения, когда одиночный реактор имеет значительные размеры.

Таким образом, применение каскада реакторов особенно эффективно при необходимости достижения высоких значений степеней превращения исходных реагентов в реакциях, которые могут быть отнесены к типу (IV, 122).

Пример IV-8. Для каскада реакторов без дополнительной подпитки, где проводится реакция (IV, 122) произвольного порядка, протекающая при отсутствии газовыделения и изменения числа молей реагирующей смеси, определить соотношение реакционных объемов соседних аппаратов оптимально рассчитанного каскада.

Решение. В данном случае рекуррентное соотношение (IV,161) также существенно упрощается и принимает вид:

$$\eta_{l+1} = \left(\frac{\eta_l}{n_A - (n_A - 1) \eta_l} \right)^{1/n_A} \quad (\text{IV, 180})$$

Если порядок реакции отличен от первого, то формула (IV,180) не позволяет найти величины η_l ($l = 1, \dots, N$) в аналитическом виде, как было сделано

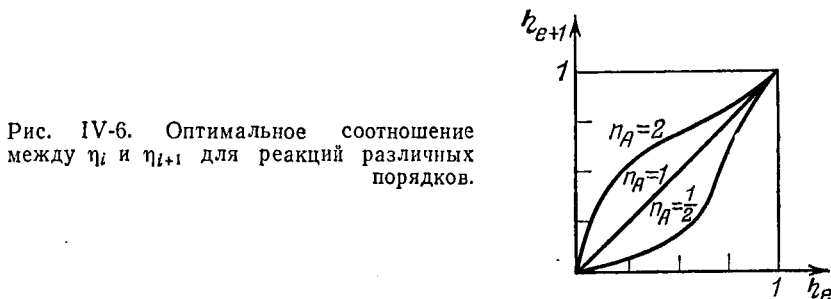


Рис. IV-6. Оптимальное соотношение между η_l и η_{l+1} для реакций различных порядков.

для реакции первого порядка, рассмотренной в примере IV-7. Однако общая процедура определения оптимальных значений η_l ($l = 1, \dots, N$) при этом становится относительно простой вследствие применения графоаналитического метода, основанного на том, что выражение (IV,180) связывает оптимальные величины η_{l+1} и η_l для любых двух соседних реакторов каскада.

На рис. IV-6 представлена кривая зависимости $\eta_{l+1} = \eta_{l+1}(\eta_l)$, полученная при использовании формулы (IV,180) для различных значений порядка реакции n_A . Очевидно, что эту зависимость в каждом конкретном случае всегда можно построить, если известен порядок реакции n_A .

Из формулы (IV,180) следует, что для любого значения n_A величина η_{l+1} при $\eta_l = 1$ также равна единице, т. е. семейство графиков для разных значений n_A имеет общие точки $\eta_l = 0$ и $\eta_l = 1$.

Изобразим теперь графически зависимость $\eta_{l+1} = \eta_{l+1}(\eta_l)$ для заданного значения n_A во всех четырех квадрантах системы координат (рис. IV-7). Тогда последовательность η_l ($l = 1, \dots, N$) определяется для любого значения N с помощью простого приема, смысл которого ясен из рис. IV-7, где построение проведено для варианта $N = 6$. Из этого построения также легко увидеть, в какую сторону следует изменить первоначально принятое значение η_1 , чтобы увеличить

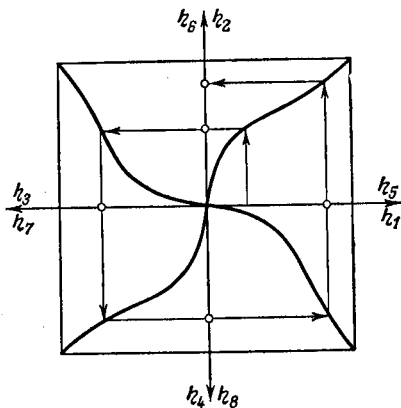


Рис. IV-7. Графический метод расчета оптимального каскада.

или уменьшить величину произведения $\prod_{l=1}^N \eta_l$ и тем самым обеспечить выполнение условия (IV,130).

Отношение реакционных объемов соседних аппаратов каскада для рассматриваемого случая может быть найдено из выражения (IV,144), характеризую-

шего объем i -го реактора через значения η_k ($k = 1, \dots, i$). Полагая в этом выражении

$$B = 0 \quad A_i = 1 \quad i = 1, \dots, N$$

что соответствует отсутствию подпитки реакторов и изменения числа молей в реакции, получим:

$$V_r^{(i)} = C \left(\frac{1}{\eta_i} - 1 \right) \prod_{k=1}^i \eta_k^{1-n_A} \quad (\text{IV}, 181)$$

С учетом формулы (IV, 181) найдем уравнение

$$\mu_{i+1, i} = \frac{V_r^{(i+1)}}{V_r^{(i)}} = \frac{(1 - \eta_{i+1}) \eta_i}{(1 - \eta_i) \eta_{i+1}^{n_A}} \quad (\text{IV}, 182)$$

которое определяет соотношение реакционных объемов соседних аппаратов через величины η_i и η_{i+1} для любого каскада, не обязательно рассчитанного опти-

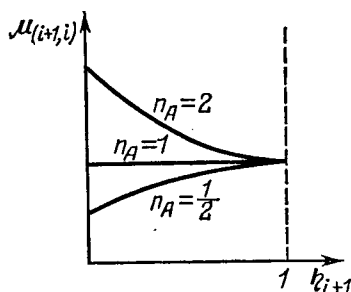


Рис. IV-8. Оптимальное соотношение объемов соседних реакторов каскада для реакций различных порядков.

мально. Чтобы установить это соотношение в оптимальном каскаде, необходимо использовать связь между η_i и η_{i+1} , характеризующую для оптимального случая формулой (IV, 180), которую с этой целью удобнее представить в виде:

$$\eta_i = \frac{n_A \eta_{i+1}^{n_A}}{1 + (n_A - 1) \eta_{i+1}^{n_A}} \quad (\text{IV}, 183)$$

Подставляя в выражение (IV, 182) формулу (IV, 183), получим:

$$\mu_{i+1, i} = \frac{n_A (1 - \eta_{i+1})}{1 - \eta_{i+1}^{n_A}} \quad (\text{IV}, 184)$$

Анализ выражения (IV, 184) позволяет выявить следующие его свойства. Так, при $\eta_{i+1} \rightarrow 0$ величина $\mu_{i+1, i} \rightarrow n_A$, а при $\eta_{i+1} \rightarrow 1$ величина $\mu_{i+1, i} \rightarrow 1$. Кроме того, как видно из выражения (IV, 184), величина $\mu_{i+1, i}$ является монотонной функцией η_{i+1} в интервале ее изменения $[0, 1]$, поскольку производная

$$\frac{d\mu_{i+1, i}}{d\eta_{i+1}} = n_A \frac{n_A \eta_{i+1}^{n_A-1} (1 - \eta_{i+1}) + \eta_{i+1}^{n_A} - 1}{1 - \eta_{i+1}^{n_A}}$$

сохраняет постоянный знак в этом интервале. Графическое изображение зависимости $\mu_{i+1, i}(\eta_{i+1})$ для нескольких значений n_A представлено на рис. IV-8.

Как следует из рис. IV-8, для оптимального каскада, в котором проводится реакция с порядком больше единицы, оптимальное соотношение реакционных

объемов соседних реакторов $\mu_{i+1,i} > 1$. Следовательно, в изотермическом каскаде объемы отдельных аппаратов должны возрастать с увеличением номера реактора. Напротив, для реакции, порядок которой меньше единицы, справедлива обратная зависимость, т. е. объемы аппаратов в оптимальном изотермическом каскаде должны уменьшаться с увеличением номера реактора.

В связи с этим представляет интерес рассмотреть, как изменяется доля непрореагировавшего реагента A с изменением номера реактора. Из рис. IV-6 следует, что при $n_A > 1$ величина $\eta_{i+1} > \eta_i$ и, таким образом, значение η_i возрастает с увеличением i , т. е. для последующих реакторов доля не вступившего в реакцию вещества A возрастает. Наоборот, при $n_A < 1$ величина $\eta_{i+1} < \eta_i$; это означает, что доля непрореагировавшего вещества A в последующих аппаратах оптимально рассчитанного каскада снижается для реакции, порядок которой меньше единицы.

Пример IV-9. Для реакции, приведенной в предыдущем примере, сравнить величины суммарных реакционных объемов оптимально рассчитанного каскада и каскада, состоящего из реакторов равного объема и рассчитанного на ту же степень превращения исходного реагента A .

Решение. Предварительно рассмотрим методику расчета каскада реакторов равного объема, в котором проводится реакция произвольного порядка n_A , при условии, что степень превращения исходного реагента A в каскаде задана.

Необходимые соотношения можно получить из выражения (IV, 182), которое, как уже отмечалось, справедливо для любого каскада, необязательно оптимального, и может быть использовано для расчета каскада аппаратов равного объема, для чего в нем нужно положить $\mu_{i+1,i} = 1$. В результате получим формулу

$$\eta_i = \frac{\eta_{i+1}^{n_A}}{1 - \eta_{i+1} + \eta_{i+1}^{n_A}} \quad (\text{IV, 185})$$

которую можно считать рекуррентным соотношением между значениями η_{i+1} и η_i для каскада реакторов равного объема.

Порядок применения формулы (IV, 185) для расчета каскада аппаратов равного объема тот же, что при расчетах оптимального каскада с помощью рекуррентных соотношений (IV, 161) или (IV, 180). Другими словами, значения η_i ($i = 1, \dots, N$), связанные рекуррентным соотношением (IV, 185), выбирают с учетом соблюдения условия (IV, 130).

Результаты выполнения численных расчетов по формулам (IV, 180) и (IV, 185) для реакции второго порядка ($n_A = 2$) представлены в табл. 4 и 5. В табл. 4 сравнение проведено для каскада из двух реакторов, а табл. 5 — из трех.

Результаты, приведенные в табл. 4 и табл. 5, показывают, что выигрыш в суммарном объеме оптимально рассчитанного каскада по сравнению с каскадом реакторов равного объема, рассчитанного на ту же степень превращения, не очень велик и достигает заметной величины лишь при высоких степенях превращения. Разумеется, что полученный вывод не является общим и справедлив лишь для рассмотренной реакции.

В заключение раздела отметим еще одну возможную постановку оптимальной задачи для каскада реакторов идеального смешения. При этом речь пойдет о тех случаях, когда задача оптимизации формулируется как требование достижения максимальной степени превращения в каскаде N аппаратов при условии, что суммарный объем имеет определенное заданное значение V_{rN} .

ТАБЛИЦА 4

Сравнение одиночного реактора с оптимальным каскадом и каскадом реакторов равного объема для различных степеней превращения исходного реагента А в случае реакции второго порядка ($N = 2$)

Степень превращения x_A		0,90	0,95	0,99
Одиночный реактор V_{r1}		90	380	9900
Оптимальный каскад	$V_r^{(1)}$	11,0	30,0	281,0
	$V_r^{(2)}$	15,9	46,4	480,0
	$\sum_{i=1}^N V_r^{(i)}$	26,9	76,4	761,0
Неоптимальный каскад	$V_r^{(i)}$	13,6	38,9	392,0
	$\sum_{i=1}^N V_r^{(i)}$	27,2	77,8	784,0

Примечание. Величина $V_r^{(i)}$ выражена в единицах $v^{(0)}/k^{(0)}$.

Покажем, что решение этой задачи эквивалентно решению задачи минимизации общего объема каскада, рассчитываемого на заданную конечную степень превращения.

Для задачи максимизации общей степени превращения в каскаде или, что то же самое, минимизации доли непрореагировавшего реагента η [см. уравнение (IV, 129)] критерием оптимальности каскада служит выражение

$$R = \prod_{i=1}^N \eta_i \quad (\text{IV, 186})$$

При этом ограничением для выбора оптимальных значений η_i является соотношение

$$\sum_{i=1}^N V_r^{(i)} - V_{rN} = 0 \quad (\text{IV, 187})$$

в котором V_{rN} — заданная величина.

Функцию Лагранжа для этого случая можно записать в виде

$$\Phi' = \prod_{i=1}^N \eta_i - \lambda' \left(\sum_{i=1}^N V_r^{(i)} - V_{rN} \right) \quad (\text{IV, 188})$$

ТАБЛИЦА 5

Сравнение одиночного реактора с оптимальным каскадом реакторов и каскадом реакторов равного объема для различных степеней превращения исходного реагента А в случае реакции второго порядка ($N = 3$)

Степень превращения x_A		0,90	0,95	0,99
Одиночный реактор V_r		90	380	9900
Оптимальный каскад	$V_r^{(1)}$	4,50	10,70	71,6
	$V_r^{(2)}$	6,10	15,45	115,3
	$V_r^{(3)}$	7,85	20,38	169,4
	$\sum_{i=1}^N V_r^{(i)}$	18,45	46,53	356,3
Неоптимальный каскад	$V_r^{(i)}$	6,26	16,60	125,6
	$\sum_{i=1}^N V_r^{(i)}$	18,78	49,80	376,8

Примечание. Величина $V_r^{(i)}$ выражена в единицах $v^{(i)}/k^{(0)}$.

а система уравнений, определяющая оптимальное решение, представляется как

$$\frac{\partial \Phi'}{\partial \eta_i} = \frac{1}{\eta_i} \prod_{i=1}^N \eta_i - \lambda^i \sum_{i=1}^N \frac{\partial V_r^{(i)}}{\partial \eta_i} = 0 \quad (\text{IV}, 189)$$

Для задачи минимизации общего объема каскада при заданной степени превращения в нем критерий оптимальности имеет вид

$$R = \sum_{i=1}^N V_r^{(i)} \quad (\text{IV}, 186a)$$

а ограничивающим условием будет:

$$\prod_{i=1}^N \eta_i - \eta = 0 \quad (\text{IV}, 187a)$$

причем η — заданная величина.

При этом функция Лагранжа может быть записана как

$$\Phi^{II} = \sum_{i=1}^N V_r^{(i)} - \lambda^{II} \left(\prod_{i=1}^N \eta_i - \eta \right) \quad (\text{IV}, 188a)$$

откуда находится система уравнений, характеризующая оптимальное решение

$$\frac{\partial \Phi^{II}}{\partial \eta_i} = \sum_{i=1}^N \frac{\partial V_r^{(i)}}{\partial \eta_i} - \lambda^{II} \frac{1}{\eta_i} \prod_{i=1}^N \eta_i = 0 \quad (\text{IV}, 189a)$$

Из сравнения систем уравнений (IV, 189) и (IV, 189a) видно, что они совершенно идентичны, если принять $\lambda^I = 1/\lambda^{II}$, и, следовательно, определяют одно и то же решение, откуда и вытекает эквивалентность обеих постановок оптимальных задач.

Эта эквивалентность может быть показана и простым рассуждением. Пусть, например, решена оптимальная задача максимизации степени превращения в каскаде и найдено оптимальное распределение заданной величины суммарного объема каскада V_{rN} по всем реакторам. Тогда естественно, что вычисленной степени превращения уже не может соответствовать меньшее значение общего объема каскада, если, конечно, задача имеет однозначное решение.

4. ОПТИМИЗАЦИЯ ПРОЦЕССОВ С РАСПРЕДЕЛЕННЫМИ ПАРАМЕТРАМИ

Вывод основных соотношений

Методику использования уравнений математического описания в качестве ограничивающих условий при составлении функции Лагранжа (см. стр. 163) без особого труда можно распространить и на объекты с распределенными параметрами, которые в составе математического описания имеют системы дифференциальных уравнений.

Предположим, что процесс описывается системой дифференциальных уравнений

$$\frac{dx_i}{dt} = \varphi_i(x_1, x_2, \dots, x_m, u_1, u_2, \dots, u_r) \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{IV}, 190)$$

которая при использовании векторных обозначений может быть также представлена как

$$\frac{dx}{dt} = \varphi(x, u) \quad (\text{IV}, 191)$$

причем через x обозначен вектор переменных состояния процесса, а через u — вектор управляющих воздействий. Правая часть век-

торного уравнения (IV, 191) при этом рассматривается как вектор-функция.

Размерность вектора переменных состояния m , вообще говоря, не равна размерности r вектора управляющих воздействий.

Пусть критерий R задачи оптимизации процесса, характеризующего системой уравнений (IV, 190), задан функцией только начальных $(x_i^{(0)})$ и конечных $(x_i^{(k)})$ значений переменных состояния x_i , т. е.

$$R = R(x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \dots, x_m^{(0)}, x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_m^{(k)}) \quad (\text{IV, 192})$$

Покажем, что к рассматриваемой задаче с критерием вида (IV, 192) можно свести и любую другую постановку оптимальной задачи с критерием произвольного типа. Для этого приведем следующие случаи, которые могут представиться при решении различных задач оптимизации:

1. Переменная t явным образом входит в правые части уравнений системы (IV, 190), т. е. изменение переменных состояния x_i для данного случая описывается системой:

$$\frac{dx}{dt} = \varphi(x, u, t) \quad (\text{IV, 193})$$

Система уравнений (IV, 193) может быть легко представлена в виде (IV, 190) введением новой переменной состояния x_{m+1} , определяемой соотношением

$$x_{m+1} = t \quad (\text{IV, 194})$$

и для которой к системе уравнений (IV, 190) добавится еще одно уравнение:

$$\frac{dx_{m+1}}{dt} = \varphi_{m+1} \equiv 1 \quad (\text{IV, 195})$$

В результате математическое описание процесса (IV, 193) будет сведено к виду (IV, 190).

2. Критерий оптимальности процесса зависит не только от начальных и конечных значений переменных состояния, но также и от конечного значения независимой переменной $t^{(k)}$, т. е.

$$R = R(x^{(0)}, x^{(k)}, t^{(k)}) \quad (\text{IV, 196})$$

Если воспользоваться приемом, рассмотренным в предыдущем случае, т. е. ввести дополнительную переменную x_{m+1} , характеризующую соотношением (IV, 194), то критерий оптимальности (IV, 196) можно свести к виду (IV, 192).

3. Критерий оптимальности процесса зависит не только от начальных и конечных значений переменных состояния x_i , но также и от значений переменных состояния $x_i(t)$ и управляющих воздействий $u_i(t)$, которые они принимают при изменении независимой

переменной в интервале $[t^{(0)}, t^{(k)}]$, т. е. критерий оптимальности процесса задан некоторым функционалом (см. главу V):

$$R = \int_{t^{(0)}}^{t^{(k)}} \varphi_0 [x(t), u(t)] dt \quad (\text{IV}, 197)$$

причем $\varphi_0(x, u)$ — заданная функция значений переменных x_i и u_i .

Для того чтобы свести задачу с критерием оптимальности (IV, 197) к оптимальной задаче с критерием вида (IV, 192), введем дополнительную переменную состояния x_0 , которую определим соотношением

$$x_0(t) = \int_{t^{(0)}}^t \varphi_0 [x(t), u(t)] dt \quad (\text{IV}, 198)$$

где интеграл в правой части представляет собой интеграл в выражении функционала (IV, 197), записанный с переменным верхним пределом.

Для дополнительной переменной $x_0(t)$ из соотношения (IV, 198) следует дифференциальное уравнение

$$\frac{dx_0}{dt} = \varphi_0(x, u) \quad (\text{IV}, 199)$$

с граничным условием

$$x_0(t^{(0)}) = 0 \quad (\text{IV}, 200)$$

Поскольку значение переменной $x_0(t)$ при $t = t^{(h)}$ совпадает с выражением функционала (IV, 197), то тем самым задача оптимизации с критерием в виде этого функционала сведена к задаче с критерием, заданным как функция конечного значения переменной $x_0^{(k)}$, что и требовалось доказать.

Таким образом в дальнейшем будем предполагать, что математическое описание оптимизируемого процесса задано системой $m + 2$ дифференциальных уравнений

$$\frac{dx_i}{dt} = \varphi_i(x, u) \quad i = 0, 1, \dots, m + 1 \quad (\text{IV}, 201)$$

в которой x представляет собой векторное обозначение совокупности переменных:

$$x = (x_0, x_1, \dots, x_{m+1}) \quad (\text{IV}, 202)$$

Для системы уравнений (IV, 201) некоторые начальные и конечные значения переменных состояния x_i можно задать условиями задачи оптимизации. Естественно, что заданные значения переменных состояния не изменяют величины критерия оптимальности, т. е., другими словами, если они и включены в выражение критерия оптимальности, то только как числовые константы.

Не нарушая общности изложения, примем, что граничные условия для системы уравнений (IV, 201) заданы в следующем виде

$$x_i(t^{(0)}) = x_i^{(0)} \quad i = 0, \dots, m_0 \quad m_0 \leq m + 1 \quad (\text{IV, 203})$$

$$x_i(t^{(k)}) = x_i^{(k)} \quad i = 0, \dots, m_k \quad m_k \leq m + 1 \quad (\text{IV, 204})$$

и что критерий оптимальности представлен как функция граничных значений переменных x_i , не включенных в совокупности (IV, 203) и (IV, 204), т. е.

$$R = R(x_{m_0+1}^{(0)}, \dots, x_m^{(0)}, x_{m+1}^{(0)}, x_{m_{k+1}+1}^{(0)}, \dots, x_m^{(k)}, x_{m+1}^{(k)}) \quad (\text{IV, 205})$$

Далее для сокращения используем также запись выражения (IV, 205) в виде

$$R = R(\tilde{x}^{(0)}, \tilde{x}^{(k)}) \quad (\text{IV, 206})$$

однако при этом всегда будем предполагать, что соответствующие условиям (IV, 203) и (IV, 204) компоненты векторов $x^{(0)}$ и $x^{(k)}$ заданы и не могут изменяться в процессе решения оптимальной задачи.

Очевидно, что число заданных граничных значений переменных x_i в условиях (IV, 203) и (IV, 204) не может превышать $2(m + 2)$, поскольку в критерий оптимальности (IV, 205) должны входить варьируемые переменные. В противном случае критерий оптимальности будет константой. Таким образом, всегда

$$m_0 + m_k < 2(m + 2) \quad (\text{IV, 207})$$

Представим теперь систему уравнений (IV, 201) в конечно-разностной форме

$$x_i^{(n)} - x_i^{(n-1)} = \varphi_i(x^{(n-1)}, u^{(n-1)}) \Delta t \quad (\text{IV, 208})$$

$$i = 0, 1, \dots, m + 1 \quad n = 1, \dots, N$$

где

$$\Delta t = \frac{1}{N} (t^{(k)} - t^{(0)})$$

т. е. рассмотрим систему уравнений (IV, 208) как приближенную аппроксимацию процесса с распределенными параметрами дискретным многостадийным процессом, которую можно сделать сколь угодно точной, выбирая достаточно большое значение N . Тогда при решении оптимальной задачи с критерием (IV, 206) для системы (IV, 208) может быть использован математический аппарат, рассмотренный выше (см. стр. 163). При этом функция Лагранжа оптимальной задачи записывается как

$$\Phi = R(\tilde{x}^{(0)}, \tilde{x}^{(N)}) + \sum_{i=0}^{m+1} \sum_{n=1}^N \lambda_i^{(n)} [\varphi_i(\tilde{x}^{(n-1)}, u^{(n-1)}) \Delta t - (x_i^{(n)} - x_i^{(n-1)})] \quad (\text{IV, 209})$$

При переходе от конечно-разностного представления математического описания (IV, 208) к непрерывному (IV, 201), т. е. при

$N \rightarrow \infty$, сумму по n в выражении (IV, 209) можно заменить на интеграл и функция Φ примет вид:

$$\Phi = R(\tilde{x}^{(0)}, \tilde{x}^{(k)}) + \sum_{i=0}^{m+1} \int_{t^{(0)}}^{t^{(k)}} \lambda_i [\varphi_i(\tilde{x}, u) dt - dx_i] \quad (\text{IV, 210})$$

В уравнении (IV, 210) величины λ_i , стоящие под знаком интеграла, необходимо считать функциями переменной t .

Прежде чем приступить к выводу основных уравнений, решение которых выражает оптимальные условия для процесса с распределенными параметрами, характеризуемого системой уравнений (IV, 201), преобразуем интеграл в функции (IV, 210) с помощью формулы интегрирования по частям:

$$\int_{t^{(0)}}^{t^{(k)}} \lambda_i dx_i = \lambda_i x_i \Big|_{t^{(0)}}^{t^{(k)}} - \int_{t^{(0)}}^{t^{(k)}} x_i d\lambda_i = \lambda_i^{(k)} x_i^{(k)} - \lambda_i^{(0)} x_i^{(0)} - \int_{t^{(0)}}^{t^{(k)}} x_i d\lambda_i \quad (\text{IV, 211})$$

С учетом соотношения (IV, 211) выражение для функции Φ теперь запишется в виде:

$$\Phi = R(\tilde{x}^{(0)}, \tilde{x}^{(k)}) + \sum_{i=0}^{m+1} (\lambda_i^{(0)} x_i^{(0)} - \lambda_i^{(k)} x_i^{(k)}) + \sum_{i=0}^{m+1} \int_{t^{(0)}}^{t^{(k)}} \left[\lambda_i \varphi_i(\tilde{x}, u) + x_i \frac{d\lambda_i}{dt} \right] dt \quad (\text{IV, 212})$$

Искомые переменными оптимальной задачи являются величины $x_i(t)$ ($i = 0, 1, \dots, m+1$) и $u_l(t)$ ($l = 1, \dots, r$), рассматриваемые как функции переменной t . Кроме того, в процессе решения определению подлежат и вспомогательные переменные $\lambda_i(t)$ ($i = 0, 1, \dots, m+1$). Таким образом, для отыскания оптимального решения нужно иметь всего $2(m+2) + r$ соотношений, которые могут быть получены дифференцированием функции Φ по всем искомым переменным, т. е. по λ_i , x_i ($i = 0, 1, \dots, m+1$) и u_l ($l = 1, \dots, r$), и приравниванием нулю производных.

Нетрудно проверить, что в результате дифференцирования выражения для функции Φ (IV, 212) по переменным λ_i можно вывести исходные уравнения математического описания оптимизируемого процесса (IV, 201), как это было сделано и при использовании неопределенных множителей для оптимизации дискретных процессов (см. стр. 151).

Полагая равными нулю производные от функции Φ по переменным x_p , найдем систему соотношений

$$\frac{\partial \Phi}{\partial x_p} = \int_{t^{(0)}}^{t^{(k)}} \left[\sum_{i=0}^{m+1} \lambda_i \frac{\partial \varphi_i(\tilde{x}, u)}{\partial x_p} + \frac{d\lambda_p}{dt} \right] dt = 0 \quad p = 0, 1, \dots, m+1 \quad (\text{IV, 213})$$

которые, очевидно, будут выполнены, если подынтегральные выражения равны нулю. Заменяя для единообразия формы систем уравнений индексы i и p , получим:

$$\frac{d\lambda_l}{dt} = - \sum_{p=0}^{m+1} \lambda_p \frac{\partial \varphi_p(\tilde{x}, u)}{\partial x_l} \quad l = 0, 1, \dots, m+1 \quad (\text{IV}, 214)$$

Выполняя дифференцирование функции Φ по u_l , найдем условия

$$\frac{\partial \Phi}{\partial u_l} = \int_{t^{(0)}}^{t^{(k)}} \sum_{i=0}^{m+1} \lambda_i \frac{\partial \varphi_i(\tilde{x}, u)}{\partial u_l} dt = 0 \quad l = 1, \dots, r \quad (\text{IV}, 215)$$

которые также будут выполнены, если подынтегральные выражения в соотношениях (IV, 215) тождественно равны нулю:

$$\sum_{i=0}^{m+1} \lambda_i \frac{\partial \varphi_i(\tilde{x}, u)}{\partial u_l} = 0 \quad l = 1, \dots, r \quad (\text{IV}, 216)$$

Решение исходной оптимальной задачи удовлетворяет системам дифференциальных уравнений (IV, 201) и (IV, 214), которые необходимо интегрировать совместно. Оптимальные значения управляющих воздействий $u_l(t)$ ($l = 1, \dots, r$) при этом определяются из условий (IV, 216) как функции переменных $x_i(t)$ и $\lambda_i(t)$ ($i = 0, 1, \dots, m+1$) для любого значения независимой переменной t .

Совместное интегрирование систем уравнений (IV, 201) и (IV, 214) можно выполнить только при условии, что для уравнений, входящих в эти системы, заданы в точности $2(m+2)$ граничных условий для переменных $x_i(t)$ и $\lambda_i(t)$ в соответствии с числом интегрируемых уравнений [2].

Однако до сих пор речь шла только о граничных условиях для системы уравнений (IV, 201), число которых [см. условие (IV, 207)] меньше $2(m+2)$. Недостающие граничные условия должны быть заданы для переменных $\lambda_i(t)$ и могут быть получены дифференцированием функции Φ , характеризуемой выражением (IV, 212), по тем значениям $x_i^{(0)}$ и $x_i^{(k)}$, которые не зафиксированы условиями оптимальной задачи (IV, 203) и (IV, 204). Таким образом, можно найти:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial x_i^{(0)}} = \frac{\partial R(\tilde{x}^{(0)}, \tilde{x}^{(k)})}{\partial x_i^{(0)}} + \lambda_i^{(0)} = 0 \quad i = m_0 + 1, \dots, m+1 \quad (\text{IV}, 217)$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial x_i^{(k)}} = \frac{\partial R(\tilde{x}^{(0)}, \tilde{x}^{(k)})}{\partial x_i^{(k)}} - \lambda_i^{(k)} = 0 \quad i = m_k + 1, \dots, m \quad (\text{IV}, 218)$$

Исключение составляет лишь производная $\partial \Phi / \partial x_{m+1}^{(k)}$, которая должна быть включена в систему соотношений (IV, 218). При ее

вычислении нужно принимать во внимание определение переменной x_{m+1} согласно уравнению (IV, 194), что приводит к необходимости дифференцирования интегралов в выражении (IV, 212) по верхнему пределу интегрирования. В результате получим:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial x_{m+1}^{(k)}} = \frac{\partial R(\tilde{x}^{(0)}, \tilde{x}^{(k)})}{\partial x_{m+1}^{(k)}} - \lambda_{m+1}^{(k)} + \sum_{p=0}^{m+1} \lambda_p^{(k)} \varphi_p(\tilde{x}^{(k)}, u^{(k)}) = 0 \quad (\text{IV, 218a})$$

Таким образом, общее число граничных условий для систем уравнений (IV, 201) и (IV, 214) с учетом соотношений (IV, 203), (IV, 204) и (IV, 217) — (IV, 218a) в точности равно числу уравнений $2(m+2)$. Следовательно, система (IV, 201) и (IV, 214) в принципе может быть проинтегрирована для любого закона изменения управляющих воздействий $u_i(t)$, в том числе и для такого, который удовлетворяет условиям (IV, 216). В последнем случае можно утверждать, что найдены управления, соответствующие экстремальному значению критерия (IV, 205).

Для того чтобы проверить, действительно ли полученные управляющие воздействия $u_i(t)$ отвечают искомому оптимуму, нужно провести дополнительные исследования найденного решения. Существенную помощь при этом иногда может оказать четкое представление физического смысла решаемой задачи. Однако в общем случае проверка оптимальности получаемых решений — чрезвычайно трудоемкая задача, требующая не только изобретательности и интуиции от исследователя, но и выполнения большого объема вычислений.

Именно в этом и состоят наиболее слабые стороны метода неопределенных множителей Лагранжа при его использовании для решения оптимальных задач, так как этот метод всегда дает лишь необходимые, но еще не достаточные условия оптимальности. Более того, как показано ниже (см. главу VII), для целого ряда задач оптимальные условия вообще нельзя найти при применении выражений (IV, 216).

Рассмотрим еще некоторые свойства полученных выше соотношений, которые могут представить интерес при решении оптимальных задач. Остановимся вначале на последнем из найденных граничных условий — соотношении (IV, 218a).

Принимая во внимание определение функции φ_{m+1} , соответствующей переменной x_{m+1} [см. уравнение (IV, 195)], заметим, что поскольку $\varphi_{m+1} \equiv 1$, величину λ_{m+1} можно исключить из выражения (IV, 218a), в результате чего оно принимает вид:

$$\sum_{p=0}^m \lambda_p^{(k)} \varphi_p(\tilde{x}^{(k)}, u^{(k)}) = - \frac{\partial R(\tilde{x}^{(0)}, \tilde{x}^{(k)})}{\partial x_{m+1}^{(k)}} \quad (\text{IV, 218б})$$

Если же еще и критерий оптимальности R (IV, 192) не зависит от конечного значения переменной $t^{(k)} = x_{m+1}^{(k)}$, то уравнение

(IV, 218б) может быть также записано в форме:

$$\sum_{p=0}^m \lambda_p^{(k)} \varphi_p(\tilde{x}^{(k)}, u^{(k)}) = 0 \quad (\text{IV, 219})$$

К этой же форме, т. е. к виду соотношения (IV, 219), можно привести уравнение (IV, 218а) и в общем случае. Значение $\lambda_{m+1}^{(k)}$ фактически не связывается условием (IV, 218а), а переменная $\lambda_{m+1}(t)$ на самом деле даже не входит в систему уравнений (IV, 214) для переменных λ_i ($i = 0, 1, \dots, m+1$), так как $d\varphi_{m+1}/dx_{m+1} = 0$.

Поэтому значение $\lambda_{m+1}^{(k)}$ может быть выбрано произвольно, в частности формально по аналогии с уравнениями (IV, 218) можно принять:

$$\frac{\partial R(\tilde{x}^{(0)}, \tilde{x}^{(k)})}{\partial x_{m+1}^{(k)}} - \lambda_{m+1}^{(k)} = 0 \quad (\text{IV, 220})$$

Тогда из соотношений (IV, 218а) с учетом условия (IV, 220) следует, что

$$\sum_{p=0}^{m+1} \lambda_p^{(k)} \varphi_p(\tilde{x}^{(k)}, u^{(k)}) = 0 \quad (\text{IV, 221})$$

Другими словами, если для оптимизируемого процесса найдена совокупность переменных состояния x_i ($i = 0, 1, \dots, m+1$), то при выборе оптимального управления наряду с условиями (IV, 216) должно выполняться также условие (IV, 221) для граничных значений переменных x_i и λ_i ($i = 0, 1, \dots, m+1$), определяемых решением систем уравнений (IV, 201) и (IV, 214).

Для дальнейшего исследования свойств оптимальных решений умножим каждое уравнение системы (IV, 214) на дифференциал dx_i , а каждое из условий (IV, 216) — на дифференциал du_i , и сложим все полученные выражения. В результате найдем:

$$\sum_{i=0}^{m+1} \frac{d\lambda_i}{dt} dx_i + \sum_{i=0}^{m+1} \sum_{p=0}^{m+1} \lambda_p \frac{d\varphi_p(\tilde{x}, u)}{dx_i} dx_i + \sum_{l=1}^r \sum_{i=0}^{m+1} \lambda_i \frac{\partial \varphi_i(\tilde{x}, u)}{\partial u_l} du_l = 0 \quad (\text{IV, 222})$$

или после преобразований:

$$\sum_{i=0}^{m+1} \frac{d\lambda_i}{dt} dx_i + \sum_{i=0}^{m+1} \lambda_i \left(\sum_{p=0}^{m+1} \frac{\partial \varphi_i(\tilde{x}, u)}{\partial x_p} dx_p + \sum_{l=1}^r \frac{\partial \varphi_i(\tilde{x}, u)}{\partial u_l} du_l \right) = 0 \quad (\text{IV, 223})$$

Заметим, что выражения, стоящие в круглых скобках, являются полными дифференциалами функций $\varphi_i(\tilde{x}, u)$, т. е.

$$\sum_{p=0}^{m+1} \frac{\partial \varphi_i(\tilde{x}, u)}{\partial x_p} dx_p + \sum_{l=1}^r \frac{\partial \varphi_i(\tilde{x}, u)}{\partial u_l} du_l = d\varphi_i(\tilde{x}, u) \quad (\text{IV, 224})$$

и следовательно, соотношение (IV, 223) можно также представить в виде:

$$\sum_{i=0}^{m+1} \frac{d\lambda_i}{dt} dx_i + \sum_{i=0}^{m+1} \lambda_i d\varphi_i(\tilde{x}, u) = 0 \quad (\text{IV, 225})$$

Подставим теперь в выражение (IV, 225) значения дифференциалов dx_i из системы уравнений (IV, 201). Тогда это выражение запишется как

$$\sum_{i=0}^{m+1} [\varphi_i(\tilde{x}, u) d\lambda_i + \lambda_i d\varphi_i(\tilde{x}, u)] = 0 \quad (\text{IV, 226})$$

откуда

$$d \left[\sum_{i=0}^{m+1} \lambda_i \varphi_i(\tilde{x}, u) \right] = 0 \quad (\text{IV, 227})$$

Полученное соотношение означает, что величина выражения, стоящего под знаком дифференциала в формуле (IV, 227), постоянна и не зависит от переменной t при ее изменении в интервале $[t^{(0)}, t^{(k)}]$. Принимая во внимание условие (IV, 221), которое в данном случае может рассматриваться как граничное для функции $\tilde{H}$, описываемой выражением

$$\tilde{H} = \sum_{i=0}^{m+1} \lambda_i \varphi_i(\tilde{x}, u) \quad (\text{IV, 228})$$

найдем, что для любого значения независимой переменной t при применении оптимального управления выполняется условие:

$$\tilde{H} = \sum_{i=0}^{m+1} \lambda_{i, \text{ опт}} \varphi_i(\tilde{x}_{\text{ опт}}, u_{\text{ опт}}) = 0 \quad (\text{IV, 229})$$

Здесь величины $\lambda_{i, \text{ опт}}$ и $x_{i, \text{ опт}}$ ($i = 0, 1, \dots, m+1$) определяются в результате совместного интегрирования систем уравнений (IV, 201) и (IV, 214) с граничными условиями (IV, 203), (IV, 204), (IV, 217), (IV, 218) и (IV, 220).

Когда критерий оптимальности задан функцией от конечных значений переменных (не в виде функционала), включая также конечное значение независимой переменной t , соотношение (IV, 229) может быть, кроме того, представлено как

$$\sum_{i=1}^m \lambda_{i, \text{ опт}} \varphi_i(x_{\text{ опт}}, u_{\text{ опт}}) = - \frac{\partial R(x^{(0)}, x^{(k)}, t^{(k)})}{\partial t^{(k)}} \quad (\text{IV, 230})$$

Если к тому же $dR/dt^{(k)} = 0$, то

$$H = \sum_{i=1}^m \lambda_{i, \text{ опт}} \varphi_i(x_{\text{ опт}}, u_{\text{ опт}}) \quad (\text{IV, 231})$$

где величина H отличается от $\tilde{H}$ меньшим числом слагаемых.

При использовании величины $\bar{H}$ [характеризуемой выражением (IV, 228)], которую можно считать функцией переменных $x_i(t)$, $\lambda_i(t)$ ($i = 0, 1, \dots, m+1$) и u_l ($l = 1, \dots, r$), т. е. $\bar{H} = \bar{H}[\tilde{\lambda}(t), \tilde{x}(t), u]$, условие оптимальности (IV, 216) может быть записано также в виде:

$$\frac{\partial \bar{H}[\tilde{\lambda}(t), \tilde{x}(t), u]}{\partial u_l} = 0 \quad l = 1, \dots, r \quad (\text{IV, 232})$$

В сочетании с условием (IV, 229) последнее выражение означает, что функция

$$\bar{H} = \bar{H}[\tilde{\lambda}_{\text{опт}}(t), \tilde{x}_{\text{опт}}(t), u_{\text{опт}}(t)] \quad (\text{IV, 233})$$

для любого значения независимой переменной t при оптимальном управлении имеет экстремальное значение, равное нулю.

Реакторы идеального вытеснения

Рассмотрим несколько частных примеров [3], когда с помощью найденных выше общих соотношений можно получить более конкретные оценки оптимальных режимов в реакторах идеального вытеснения.

Пример IV-10. Пусть дан реактор идеального вытеснения, математическое описание которого представляется системой уравнений

$$\frac{dx_1}{d\tau} = w_1(x_1, x_2, T) \quad (\text{IV, 234})$$

$$\frac{dx_2}{d\tau} = w_2(x_1, x_2, T) \quad (\text{IV, 235})$$

с граничными условиями

$$\begin{aligned} x_1(t^{(0)}) &= x_1^{(0)} \\ x_2(t^{(0)}) &= x_2^{(0)} \end{aligned} \quad (\text{IV, 236})$$

При этом скорости образования реагентов в химической реакции w_1 и w_2 являются линейными функциями концентраций x_1 и x_2 , т. е.

$$w_i = \sum_{p=1}^m x_p \frac{\partial w_i}{\partial x_p} \quad i = 1, \dots, m \quad m = 2 \quad (\text{IV, 237})$$

Требуется определить оптимальный температурный профиль в реакторе $T(\tau)$, при котором критерий оптимальности

$$R = R(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \tau^{(k)}) \quad (\text{IV, 238})$$

имеет экстремальное значение.

Решение. Система уравнений (IV, 214) для вспомогательных переменных λ_1 и λ_2 запишется в виде:

$$\frac{d\lambda_i}{d\tau} = - \sum_{p=1}^m \lambda_p \frac{\partial w_p}{\partial x_i} \quad i = 1, \dots, m \quad m = 2 \quad (\text{IV, 239})$$

Граничные условия для переменных λ_1 и λ_2 определяются выражениями:

$$\begin{aligned}\lambda_1^{(k)} &= \frac{\partial R(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \tau^{(k)})}{\partial x_1^{(k)}} \\ \lambda_2^{(k)} &= \frac{\partial R(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \tau^{(k)})}{\partial x_2^{(k)}}\end{aligned}\quad (\text{IV}, 240)$$

Оптимальный температурный профиль в реакторе может быть найден интегрированием системы уравнений (IV, 234), (IV, 235) и (IV, 239) с учетом условия (IV, 216), которое при этом представляется как

$$\lambda_1 \frac{\partial w_1}{\partial T} + \lambda_2 \frac{\partial w_2}{\partial T} = 0 \quad (\text{IV}, 241)$$

Поскольку размеры реактора, т. е. величина $\tau^{(k)}$, не заданы, при интегрировании уравнений необходимо принимать во внимание также условие (IV, 230), которое и определяет оптимальное значение $\tau^{(k)}$:

$$\lambda_1 w_1 + \lambda_2 w_2 = - \frac{\partial R}{\partial \tau^{(k)}} \quad (\text{IV}, 242)$$

Принципиально путь решения сформулированной оптимальной задачи уже намечен, однако в рассматриваемом случае свойство правых частей уравнений (IV, 237) позволяет уменьшить порядок системы дифференциальных уравнений, подлежащей интегрированию, вследствие исключения вспомогательных переменных λ_1 и λ_2 .

Для этого умножим каждое из уравнений системы (IV, 239) на величины x_i ($i = 1, \dots, m$) и сложим полученные выражения. В результате найдем:

$$\sum_{i=1}^m x_i \frac{d\lambda_i}{d\tau} + \sum_{i=1}^m \sum_{p=1}^m \lambda_p x_i \frac{\partial w_p}{\partial x_i} = 0 \quad m=2 \quad (\text{IV}, 243)$$

Прибавим к левой части уравнения (IV, 243) и вычтем из нее сумму $\sum_{i=1}^m \lambda_i dx_i/d\tau$. Тогда это выражение можно записать в виде:

$$\sum_{i=1}^m \left(x_i \frac{d\lambda_i}{d\tau} + \lambda_i \frac{dx_i}{d\tau} \right) + \sum_{i=1}^m \sum_{p=1}^m \lambda_p x_i \frac{\partial w_p}{\partial x_i} - \sum_{i=1}^m \lambda_i \frac{dx_i}{d\tau} = 0 \quad m=2 \quad (\text{IV}, 244)$$

Подставляя теперь вместо величин $dx_i/d\tau$ в последней сумме выражения (IV, 244) их значения из уравнений (IV, 234) и (IV, 235), получим:

$$\sum_{i=1}^m \left(x_i \frac{d\lambda_i}{d\tau} + \lambda_i \frac{dx_i}{d\tau} \right) + \sum_{p=1}^m \lambda_p \left(\sum_{i=1}^m x_i \frac{\partial w_p}{\partial x_i} - w_p \right) = 0 \quad m=2 \quad (\text{IV}, 245)$$

Нетрудно видеть, что все слагаемые второй суммы в выражении (IV, 245) в соответствии с условием (IV, 237) тождественно равны нулю. Кроме того, слагаемыми первой суммы являются производные по τ от произведения $\lambda_i x_i$, и, следовательно, выражение (IV, 245) может быть представлено как

$$\frac{d}{d\tau} \sum_{i=1}^m \lambda_i x_i = 0 \quad m=2 \quad (\text{IV}, 246)$$

Другими словами, если ввести обозначение

$$\Psi = \sum_{i=1}^m \lambda_i x_i \quad (\text{IV, 247})$$

то оказывается, что величина Ψ при оптимальном режиме имеет постоянное значение для любого значения параметра длины реактора τ .

Значение Ψ может быть найдено, если известны граничные значения переменных $\lambda_i^{(k)}$ и $x_i^{(k)}$, т. е.

$$\Psi = \sum_{i=1}^m \lambda_i x_i = \sum_{i=1}^m \lambda_i^{(k)} x_i^{(k)} \quad m=2 \quad (\text{IV, 248})$$

Наконец, воспользовавшись граничными условиями для переменных (IV, 240), выражение (IV, 248) можно также записать в виде:

$$\lambda_1 x_1 + \lambda_2 x_2 = x_1^{(k)} \frac{\partial R}{\partial x_1^{(k)}} + x_2^{(k)} \frac{\partial R}{\partial x_2^{(k)}} \quad (\text{IV, 249})$$

Рассматривая теперь условия (IV, 241) и (IV, 249) как систему линейных уравнений относительно переменных λ_1 и λ_2 , нетрудно найти:

$$\lambda_1 = \frac{\partial w_2}{\partial T} \cdot \frac{x_1^{(k)} \frac{\partial R}{\partial x_1^{(k)}} + x_2^{(k)} \frac{\partial R}{\partial x_2^{(k)}}}{x_1 \frac{\partial w_2}{\partial T} - x_2 \frac{\partial w_1}{\partial T}} \quad (\text{IV, 250})$$

$$\lambda_2 = - \frac{\partial w_1}{\partial T} \cdot \frac{x_1^{(k)} \frac{\partial R}{\partial x_1^{(k)}} - x_2^{(k)} \frac{\partial R}{\partial x_2^{(k)}}}{x_1 \frac{\partial w_2}{\partial T} - x_2 \frac{\partial w_1}{\partial T}} \quad (\text{IV, 251})$$

После подстановки вычисленных значений λ_1 и λ_2 в условие (IV, 242) окончательно получим:

$$\frac{w_1 \frac{\partial w_2}{\partial T} - w_2 \frac{\partial w_1}{\partial T}}{x_1 \frac{\partial w_2}{\partial T} - x_2 \frac{\partial w_1}{\partial T}} = - \frac{\frac{\partial R}{\partial \tau^{(k)}}}{x_1^{(k)} \frac{\partial R}{\partial x_1^{(k)}} - x_2^{(k)} \frac{\partial R}{\partial x_2^{(k)}}} \quad (\text{IV, 252})$$

Соотношение (IV, 252) определяет температуру в каждой точке реактора идеального вытеснения как функцию значений x_1 и x_2 в этой точке и значений $x_1^{(k)}$, $x_2^{(k)}$ и $\tau^{(k)}$, от которых зависит правая часть выражения (IV, 252). Для расчета оптимального температурного профиля теперь достаточно проинтегрировать только систему уравнений (IV, 234) и (IV, 235), определяя температуру в каждой точке аппарата из соотношения (IV, 252). Значение $\tau^{(k)}$ при этом подбирается таким, чтобы при $\tau = \tau^{(k)}$ выполнялось условие

$$w_1(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \tau^{(k)}) \frac{\partial R}{\partial x_1^{(k)}} + w_2(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \tau^{(k)}) \frac{\partial R}{\partial x_2^{(k)}} = - \frac{\partial R}{\partial \tau^{(k)}} \quad (\text{IV, 253})$$

для чего может быть использован любой итеративный метод численного решения одного уравнения с одной неизвестной.

В частном случае, когда величина $\tau^{(k)}$ для реактора задана и, следовательно, $\partial R / \partial \tau^{(k)} = 0$, соотношение (IV, 252) упрощается и может быть записано в виде:

$$w_1 \frac{\partial w_2}{\partial T} - w_2 \frac{\partial w_1}{\partial T} = 0 \quad (\text{IV, 254})$$

Отсюда следует, что при оптимальном температурном профиле для любой точки реактора должно соблюдаться условие:

$$\frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{w_2}{w_1} \right) = 0 \quad (\text{IV, 255})$$

Если w_1 представляет собой скорость расходования исходного реагента при химическом превращении, а w_2 — скорость образования продукта реакции, то условие (IV, 255) можно истолковать как требование максимизации в каждой точке реактора селективности процесса, характеризуемой выражением [см. уравнение (III, 215)]:

$$\sigma_2 = \frac{n_1 w_2}{n_2 |w_1|} \quad (\text{IV, 256})$$

Пример IV-11. Пусть в реакторе идеального вытеснения проводится химическая реакция



причем скорости образования продуктов составляют:

$$w_P = k_1 x_A \quad w_S = k_2 x_A \quad w_Q = k_3 x_A \quad (\text{IV, 258})$$

Требуется определить оптимальный температурный профиль в аппарате, если критерий оптимальности задан в виде себестоимости продукта реакции P и, кроме того, предполагается, что после реактора существует система выделения непроореагировавшего исходного вещества A с возвратом его на реакцию.

Критерий оптимальности для этого случая может быть записан как

$$R = \frac{1}{x_p^{(k)}} [s_\tau + s_a \tau^{(k)} + s_c (x_A^{(0)} - x_N^{(k)})] \quad (\text{IV, 259})$$

где s_τ — переменные расходы, отнесенные к единице нагрузки на реактор; s_a — амортизационные отчисления, отнесенные к единице объема реактора; s_c — стоимость единицы исходного сырья A .

Решение. Для решения поставленной задачи воспользуемся результатами, полученными в предыдущем примере IV-10.

Математическое описание реактора можно представить системой уравнений (IV, 234) и (IV, 235), если положить:

$$x_1 = x_A \quad w_1 = -(k_1 + k_2 + k_3) x_1 \quad (\text{IV, 260})$$

$$x_2 = x_P \quad w_2 = k_1 x_1 \quad (\text{IV, 261})$$

Это возможно, поскольку продукты реакции S и Q не входят в выражение критерия оптимальности (IV, 259), а для описания изменения по длине реактора веществ A и P достаточно иметь только два уравнения.

С учетом новых обозначений (IV, 260) и (IV, 261) для концентраций критерий оптимальности (IV, 259) переписывается в виде:

$$R = \frac{1}{x_2^{(k)}} [s_\tau + s_a \tau^{(k)} + s_c (x_1^{(0)} - x_1^{(k)})] \quad (\text{IV, 262})$$

Для решения задачи определим форму соотношения (IV, 252), которую оно принимает в рассматриваемом случае. С этой целью вначале вычислим производные от критерия оптимальности в правой части данного соотношения. Дифференцируя выражение (IV, 262), находим:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial R}{\partial \tau^{(k)}} &= \frac{s_a}{x_2^{(k)}} & \frac{\partial R}{\partial x_1^{(k)}} &= -\frac{s_c}{x_2^{(k)}} \\ \frac{\partial R}{\partial x_2^{(k)}} &= -\frac{1}{(x_2^{(k)})^2} [s_\tau + s_a \tau^{(k)} + s_c (x_1^{(0)} - x_1^{(k)})] \end{aligned} \right\} \quad (\text{IV, 263})$$

Подставляя формулы (IV, 263) в правую часть соотношения (IV, 252) и обозначая ее через γ , после несложных преобразований получим:

$$\gamma = \frac{s_a}{s_\tau + s_a \tau^{(k)} + s_c x_1^{(0)}} \quad (\text{IV, 264})$$

Принимая во внимание выражения для скоростей образования ω_1 (IV, 260) и ω_2 (IV, 261), левую часть соотношения (IV, 252) представим в виде:

$$\frac{\omega_1 \frac{\partial \omega_2}{\partial T} - \omega_2 \frac{\partial \omega_1}{\partial T}}{x_1 \frac{\partial \omega_2}{\partial T} - x_2 \frac{\partial \omega_1}{\partial T}} = \frac{k_1 \frac{d(k_1 + k_2 + k_3)}{dT} - (k_1 + k_2 + k_3) \frac{dk_1}{dT}}{\frac{x_2}{x_1} \cdot \frac{d(k_1 + k_2 + k_3)}{dT} - \frac{dk_1}{dT}} \quad (\text{IV, 265})$$

С учетом выражений (IV, 264) и (IV, 265) соотношение (IV, 252) запишется как

$$\frac{k_1 \frac{d(k_1 + k_2 + k_3)}{dT} - (k_1 + k_2 + k_3) \frac{dk_1}{dT}}{\frac{x_2}{x_1} \cdot \frac{d(k_1 + k_2 + k_3)}{dT} - \frac{dk_1}{dT}} = \gamma \quad (\text{IV, 266})$$

или после преобразований:

$$k_1 - (k_1 + k_2 + k_3 - \gamma) \frac{dk_1}{d(k_1 + k_2 + k_3)} = \frac{x_2}{x_1} \gamma \quad (\text{IV, 267})$$

В соотношении (IV, 267) производная $dk_1/d(k_1 + k_2 + k_3)$ вычисляется по формуле

$$\frac{dk_1}{d(k_1 + k_2 + k_3)} = \frac{E_1 k_1}{E_1 k_1 + E_2 k_2 + E_3 k_3} \quad (\text{IV, 268})$$

с учетом которой соотношение (IV, 267) можно также представить в виде:

$$k_1 \frac{(E_2 - E_1) k_2 + (E_3 - E_1) k_3 - E_1 \gamma}{E_1 k_1 + E_2 k_2 + E_3 k_3} = \frac{x_2}{x_1} \gamma \quad (\text{IV, 269})$$

Проанализируем характер оптимального температурного профиля при различных соотношениях между энергиями активации основной и побочных реакций.

а) Пусть $E_1 > E_2$ и $E_1 > E_3$. Из выражения (IV, 264) следует, что величина γ всегда положительна. Поэтому уравнение (IV, 269) не может быть удовлетворено никаким значением температуры, поскольку левая часть всегда остается отрицательной величиной.

На основании физической природы процесса оптимальным температурным профилем в данном случае является изотермический с максимально допустимой технологическими ограничениями температурой, так как при этом скорость полезной реакции наивысшая по отношению к скоростям побочных реакций.

б) Пусть теперь $E_1 < E_2$ и $E_1 < E_3$. Нетрудно видеть, что для малых значений γ , т. е. при малых размерах амортизационных отчислений s_a или при высокой стоимости исходного сырья s_c и высоких эксплуатационных затратах s_t , наилучшим температурным режимом будет также изотермический, но уже при минимальном значении температуры, допустимом технологическим регламентом производства. Это обстоятельство также следует из физического смысла данного процесса, поскольку уравнение (IV, 269) при малых значениях γ не имеет решения.

в) Пусть, наконец, $E_1 > E_2$, $E_1 < E_3$ или $E_1 < E_2$ и $E_1 > E_3$. Рассмотрим сначала случай, когда значение γ мало или даже равно нулю, например при малых амортизационных отчислениях или при высокой стоимости исходного сырья.

Полагая в выражении (IV, 269) $\gamma = 0$, находим относительно просто решаемое уравнение:

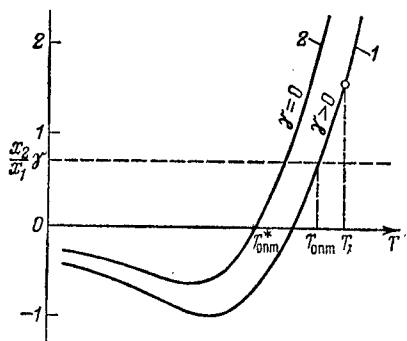
$$(E_2 - E_1)k_2 + (E_3 - E_1)k_3 = 0 \quad (\text{IV, 270})$$

Далее с учетом зависимости констант скорости реакции от температуры в форме уравнения Аррениуса получим:

$$T_{\text{опт}} = \frac{E_2 - E_3}{R \ln \frac{k_{2, \infty}(E_2 - E_1)}{k_{3, \infty}(E_1 - E_3)}} \quad (\text{IV, 271})$$

т. е. оптимальным температурным режимом будет изотермический с температурой, определяемой формулой (IV, 271), так как найденное значение температуры не зависит от концентрации реагентов в аппарате.

Рис. IV-9. Графическое изображение зависимости левой части уравнения (IV, 269) от температуры.



Для того чтобы исследовать характер температурного профиля при конечном (не малом) значении γ , проанализируем графическое изображение зависимости левой части уравнения (IV, 269) от температуры, представленное на рис. IV-9 для двух значений γ ($\gamma = 0$ и $\gamma > 0$).

Оптимальное значение температуры в каждой точке реактора можно определить как абсциссу точки пересечения указанной зависимости с прямой, параллельной оси абсцисс, имеющей ординату $\gamma x_2/x_1$. Поскольку в данном случае концентрация x_1 исходного реагента A только убывает по длине аппарата, а концентрация x_2 продукта реакции P возрастает, очевидно, что величина $\gamma x_2/x_1$ будет возрастать по длине реактора и, следовательно, температура при оптимальном режиме аппарата должна монотонно повышаться.

Рассмотренные в настоящей главе примеры использования метода множителей Лагранжа для решения задач оптимизации с ограничениями типа равенств или задач, сводимых к этому классу, показывают, что данный метод представляет собой достаточно удобный математический аппарат, позволяющий ставить и решать довольно сложные оптимальные задачи для процессов с сосредоточенными и распределенными параметрами. Как отмечено ниже (см. главу VII), метод множителей Лагранжа при отсутствии ограничений на переменные процесса типа неравенств приводит к уравнениям, которые иногда совпадают с основными уравнениями методов, специально созданных для решения широкого класса задач оптимизации, таких, например, как принцип максимума.

Без существенных усложнений метод множителей Лагранжа можно применить для оптимизации процессов со сложной топологической структурой, т. е. не только многостадийных, а также распространить на процессы, математические описания которых, наряду с конечными уравнениями, содержат и дифференциальные. Разумеется, что во всех перечисленных случаях метод множителей Лагранжа дает лишь самые общие соотношения оптимальности, и наиболее трудной частью решения задачи становится решение получаемых конечных и дифференциальных уравнений для переменных процесса и вспомогательных переменных. Однако сейчас уже разработаны в достаточной мере удобные приемы и алгоритмы решения [4], позволяющие, как правило, получать конечные результаты на вычислительных машинах для процессов высокой степени сложности.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Смирнов В. И.* Курс высшей математики. Т. 1. М., Физматгиз, 1958. 478 с.
2. *Степанов В. В.* Курс дифференциальных уравнений. М., Гостехтеоретиздат, 1960. 468 с.
3. *Крамерс Х., Вестерген К.* Химические реакторы. Расчет и управление ими. М., «Химия», 1967. 284 с.
4. *Островский Г. М., Волин Ю. М.* Методы оптимизации химических реакторов. М., «Химия», 1967. 248 с.

Методы исследования функций классического анализа, рассмотренные в предыдущих главах, за исключением лишь некоторых случаев, наиболее эффективно применяются для оптимизации процессов с сосредоточенными параметрами. Лишь в ряде случаев, используя особенности математического описания конкретных процессов, указанными методами удастся решить некоторые задачи оптимизации процессов с распределенными параметрами. Для этих процессов решение характеризуется не совокупностью значений конечного числа независимых переменных, а соответствующей функцией независимой переменной (как, например, при решении задачи выбора оптимального температурного профиля в реакторе вытеснения).

Оптимальные задачи, когда решение представляется не как совокупность значений конечного числа переменных, а как совокупность функций, вид которых заранее не известен, и составляют предмет изучения специального раздела математики — вариационного исчисления.

1. ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ

Аналогично тому, как в обычном анализе характеризуется функция одной переменной

$$x = x(t) \quad (V, 1)$$

в вариационном исчислении дается определение понятия *функционала* как правила, по которому сопоставляются функция $x(t)$ и некоторая скалярная величина

$$I = I[x(t)] \quad (V, 2)$$

Решением задачи отыскания экстремума функции $x(t)$ является одно или несколько значений независимой переменной t , при которых функция $x(t)$ имеет экстремальное значение.

Решением же задачи отыскания экстремума функционала I служат одна или несколько функций $x^{(j)}(t)$ ($j = 1, \dots, q$), при подстановке которых в выражение функционала (V, 2) его величина принимает экстремальное значение.

Функции $x^{(j)}(t)$ в этом случае называются *экстремалами* функционала $I(x)$. Причем, в зависимости от того, придает функ-

ция $x^{(j)}(t)$ функционалу $I(x)$ максимальное или минимальное значение, она называется максималью или минималью.

Понятие функционала обобщается также и на случай нескольких функций, т. е.

$$\tilde{I} = \tilde{I}[x_1(t), x_2(t), \dots, x_m(t)] \quad (V, 3)$$

или с использованием векторной формы записи

$$\tilde{I} = \tilde{I}[x(t)] \quad (V, 4)$$

где

$$\tilde{x}(t) = [x_1(t), x_2(t), \dots, x_m(t)] \quad (V, 5)$$

Кроме того, сами функции $x_i(t)$, от которых зависит значение функционала I , в свою очередь могут являться функциями нескольких независимых переменных t_i ($i = 1, \dots, p$).

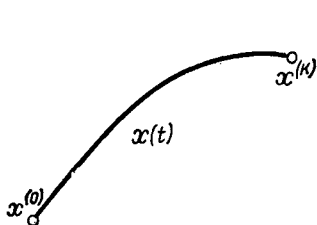


Рис. V-1. Траектория процесса в фазовом пространстве.

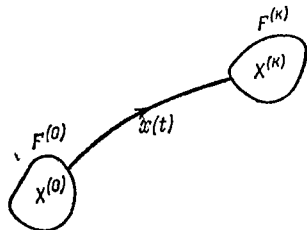


Рис. V-2. Задание в фазовом пространстве областей начальных и конечных состояний.

Функционалу I (V, 3) может быть придан наглядный геометрический смысл. Так, например, если представить совокупность функций

$$x_i(t) \quad i = 1, \dots, m \quad (V, 6)$$

как параметрическое задание некоторой кривой в m -мерном пространстве переменных x_i , то величину функционала I можно рассматривать как определенную оценку непрерывной кривой (V, 6), соединяющей две точки этого пространства с координатами $x^{(0)}$ и $x^{(h)}$ (рис. V-1). Поскольку величины x_i могут являться переменными состояниями некоторого процесса, кривая (V, 6) может интерпретироваться как траектория в фазовом пространстве переменных x_i , определяющая промежуточные состояния процесса при его переходе из начального состояния $x^{(0)}$ в конечное $x^{(h)}$.

В общем случае начальное состояние может описываться не точкой m -мерного пространства, а некоторой областью $X^{(0)}$, ограниченной заданной поверхностью $F^{(0)}$ в указанном пространстве. В равной мере это относится и к конечному состоянию, которое может также определяться заданной областью $X^{(h)}$, ограниченной поверхностью $F^{(h)}$ (рис. V-2).

Траектория в фазовом пространстве, характеризующая промежуточные состояния процесса при его переходе из начального состояния в конечное, обычно называется траекторией процесса в данном пространстве.

Обычным выражением функционала служит интегральная зависимость, которую для одной функции $x(t)$ можно, например, представить как

$$I(x) = \int_{t^{(0)}}^{t^{(k)}} \varphi(t, x) dt \quad (V, 7)$$

причем $\varphi(t, x)$ — заданная функция переменных t и x , а x , в свою очередь, является функцией независимой переменной t .

Пределы интегрирования в соотношении (V, 7) могут быть известными конечными числами, но возможны также случаи, когда один или оба предела бесконечны. Кроме того, целый ряд задач вариационного исчисления сводится к рассмотрению функционалов, у которых пределы интегрирования неизвестны.

Легко записать выражение для функционала типа (V, 7), когда функция x зависит от нескольких переменных. Например, для функции $x(t_1, t_2)$ можно привести следующий функционал:

$$I(x) = \int_{t_1^{(0)}}^{t_1^{(k)}} \int_{t_2^{(0)}}^{t_2^{(k)}} \varphi[t_1, t_2, x(t_1, t_2)] dt_1 dt_2 \quad (V, 8)$$

Также легко обобщается запись функционала (V, 7) на случай нескольких функций. Например, для двух функций $x_1(t)$ и $x_2(t)$ имеем:

$$I(x_1, x_2) = \int_{t^{(0)}}^{t^{(k)}} \varphi(t, x_1, x_2) dt \quad (V, 9)$$

Очевидно, что возможны и другие формы аналитического выражения функционала, например когда функционал I представляется некоторой известной функцией от соотношений типа (V, 7) — (V, 9).

Основная задача вариационного исчисления заключается в отыскании таких непрерывных функций $x(t)$, которые придают заданному функционалу максимальное или минимальное значение. При этом, как и в обычном анализе, на неизвестные функции, подлежащие определению, могут быть наложены различные ограничивающие условия.

Одними из важнейших условий, часто встречающихся в практических приложениях вариационного исчисления, являются ограничения, заданные в форме дифференциальных уравнений. Напри-

мер, для функционала типа (V, 9) подобное ограничение может иметь вид уравнения

$$\frac{dx_1}{dt} = x_2 \quad (\text{V}, 10)$$

с учетом которого выражение для функционала (V, 9) можно представить как

$$I(x) = \int_{t^{(0)}}^{t^{(k)}} \Phi(t, x, x') dt \quad (\text{V}, 11)$$

где значение производной dx/dt обозначено через x' .

Для функционала от нескольких функций вида (V, 3)

$$I(x_1, x_2, \dots, x_{2m}) = \int_{t^{(0)}}^{t^{(k)}} \Phi(t, x_1, x_2, \dots, x_{2m}) dt \quad (\text{V}, 12)$$

при наличии ограничений в форме системы дифференциальных уравнений

$$\frac{dx_i}{dt} = x_{m+i} \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{V}, 13)$$

выражение для функционала может быть также записано в виде (V, 11), т. е.

$$I(x_1, x_2, \dots, x_m) = \int_{t^{(0)}}^{t^{(k)}} \Phi(t, x_1, \dots, x_m, x'_1, \dots, x'_m) dt \quad (\text{V}, 14)$$

Подробнее вариационные задачи с ограничениями рассмотрены ниже (стр. 220), а сейчас остановимся еще на одном важном условии правильной постановки оптимальной задачи в терминах вариационного исчисления — задании граничных условий для искомых функций.

В простейшем случае, когда начальное и конечное состояния траектории процесса фиксированы, задание граничных условий сводится к заданию значений всех неизвестных функций при значениях независимой переменной $t^{(0)}$ и $t^{(k)}$, соответствующих началу и концу траектории, т. е. задается совокупность значений:

$$x_i(t^{(0)}) = x_i^{(0)} \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{V}, 15)$$

$$x_i(t^{(k)}) = x_i^{(k)} \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{V}, 16)$$

В более общем случае, когда задаются лишь области $X^{(0)}$ и $X^{(k)}$ возможных начальных и конечных значений искомых функций, граничные условия задаются в виде уравнений поверхности $F^{(0)}$ и $F^{(k)}$, ограничивающих эти области:

$$F^{(0)}(x_1, x_2, \dots, x_m) = 0 \quad (\text{V}, 17)$$

$$F^{(k)}(x_1, x_2, \dots, x_m) = 0 \quad (\text{V}, 18)$$

Если начальное и конечное значения независимой переменной t не заданы, то вид ограничивающих поверхностей $F^{(0)}$ и $F^{(k)}$, определяемых уравнениями (V,17) и (V,18), может зависеть и от значения независимой переменной t , т. е.

$$F^{(0)}(t, x_1, x_2, \dots, x_m) = 0 \quad (V, 17a)$$

$$F^{(k)}(t, x_1, x_2, \dots, x_m) = 0 \quad (V, 18a)$$

В этом случае переменную t целесообразно включить в число переменных фазового пространства, в результате чего траектория процесса будет изображаться уже в расширенном фазовом пространстве, имеющем размерность $m + 1$.

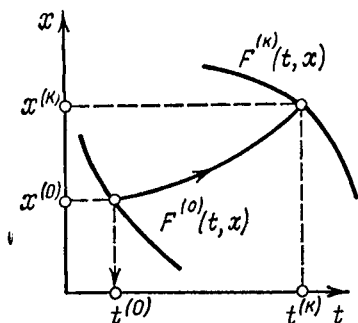


Рис. V-3. Задание начальных и конечных состояний на фазовой плоскости.

Для процесса, состояние которого определяется, например, значением только одной переменной состояния $x(t)$, расширенное фазовое пространство представляется в виде фазовой плоскости переменных x и t (рис. V-3).

Пусть области начальных и конечных значений переменной x характеризуются уравнениями

$$F^{(0)}(t, x) = 0 \quad (V, 19)$$

$$F^{(k)}(t, x) = 0 \quad (V, 20)$$

которые на фазовой плоскости $t-x$ изображаются линиями. Тогда решение оптимальной задачи с функционалом (V,11) сводится к выбору такой траектории, соединяющей на фазовой плоскости линии, определяемые уравнениями (V,19) и (V,20), вдоль которой функционал (V,11) имеет экстремальное значение. При этом находятся и точки начального и конечного состояний процесса.

Выше уже отмечалось, что решением задачи отыскания экстремали функционала является некоторая функция (или совокупность функций) одной или нескольких независимых переменных. Следовательно, математический аппарат вариационного исчисления может быть использован для оптимизации процессов, в которых переменные состояния изменяются непрерывным образом. К числу таких процессов прежде всего можно отнести процессы

перехода управляемых объектов из одного состояния (начального) в другое (конечное) с изменяющимися во времени переменными состояниями, т. е. *нестационарные процессы*. Другим, не менее важным классом процессов, в которых переменные состояния изменяются непрерывным образом, являются *процессы с распределенными параметрами*, где переменные состояния изменяются в зависимости от пространственных координат.

Таким образом, эти два класса процессов — нестационарные и с распределенными параметрами — и составляют область применения методов вариационного исчисления в химической технологии.

Пример V-1. Математическое описание нестационарного режима периодически действующего реактора идеального смешения представляется системой уравнений

$$\frac{dx_A}{d\tau} = w_A(x_A, x_P, T) \quad (V, 21)$$

$$\frac{dx_P}{d\tau} = w_P(x_A, x_P, T) \quad (V, 22)$$

с граничными условиями

$$x_A(0) = x_A^{(0)} \quad x_P(0) = 0 \quad (V, 23)$$

где x_A — концентрация исходного реагента; x_P — концентрация продукта реакции.

Предполагается, что между концентрациями реагентов A и P в любой момент времени выполняется соотношение

$$x_A + x_P = x_A^{(0)} \quad (V, 24)$$

означающее, что, кроме продукта P , никаких других продуктов в ходе реакции не образуется.

Требуется записать функционал, значение которого определяет выход продукта реакции P для заданных времени пребывания реагентов $\tau^{(k)}$ и программы изменения температуры в реакторе $T(\tau)$ ($0 \leq \tau \leq \tau^{(k)}$).

Решение. Из уравнения (V, 22) можно получить функционал

$$x_P^{(k)} = \int_0^{\tau^{(k)}} w_P(x_A, x_P, T) dt \quad (V, 25)$$

который необходимо анализировать с учетом ограничивающих условий (V, 21) и (V, 24). Эти условия, рассматриваемые как система уравнений относительно величин T и x_P , позволяют найти зависимости

$$\begin{aligned} T &= T(x_A, x'_A) \\ x_P &= x_P(x_A, x'_A) \end{aligned} \quad (V, 26)$$

подставляя которые в выражение функционала (V, 25), можно записать его в виде:

$$x_P^{(k)} = \int_0^{\tau^{(k)}} w_P[x_A, x_P(x_A, x'_A), T(x_A, x'_A)] d\tau \quad (V, 27)$$

Если ввести обозначения

$$\begin{aligned} w_P [x_A, x_P (x_A, x'_A), T (x_A, x'_A)] &= \Phi (x, x') \\ x_A &= x & x_P^{(k)} &= I(x) \end{aligned} \quad (V, 28)$$

то функционал (V, 27) можно также представить в форме:

$$I(x) = \int_0^{\tau^{(k)}} \Phi (x, x') d\tau \quad (V, 29)$$

отличающейся от формы записи функционала (V, 11) лишь тем, что в подынтегральном выражении (V, 29) отсутствует в явном виде независимая переменная τ .

Таким образом, задача максимизации выхода продукта реакции P в периодическом реакторе идеального смешения может быть сведена к задаче максимизации функционала (V, 29). В результате ее решения можно найти оптимальную программу изменения температуры в реакторе $T(\tau)$, максимизирующую выход продукта P для заданного времени пребывания реагентов в аппарате.

Пример V-2. Реактор идеального вытеснения используется для проведения реакции



с целью получения продукта P . Реакция (V, 30) имеет первый порядок по исходному реагенту A , вследствие чего математическое описание реактора может быть представлено уравнениями

$$\frac{dx_A}{d\tau} = -(k_1 + k_2) x_A \quad (V, 31)$$

$$\frac{dx_P}{d\tau} = k_1 x_A \quad (V, 32)$$

с граничными условиями

$$x_A(0) = x_A^{(0)} \quad x_P(0) = x_P^{(0)} = 0 \quad (V, 33)$$

Здесь константы скоростей стадий реакций k_1 и k_2 являются функциями температуры T , изменяющейся в свою очередь по длине реактора, т. е. в зависимости от τ .

Требуется записать функционал, значение которого определяет размеры реактора (величину $\tau^{(k)}$) для заданных значений концентрации продукта P на выходе аппарата $x_P^{(k)}$ и температурного профиля $T(\tau)$ в реакторе.

Решение. Необходимое время пребывания реагентов в аппарате $\tau^{(k)}$, при котором на выходе реактора достигается заданное значение концентрации $x_P^{(k)}$, может быть найдено из уравнения (V, 32), если его представить в интегральной форме. В результате получим следующий функционал

$$\tau^{(k)} = \int_0^{x_P^{(k)}} \frac{dx_P}{k_1(T) x_A} \quad (V, 34)$$

где в подынтегральном выражении в качестве независимой переменной принимается величина x_P .

В подынтегральном выражении функционала (V, 34) величины T и x_A должны рассматриваться как функции переменной интегрирования x_P . Поскольку

характер изменения температуры по длине реактора задан как функция величины τ , для расчета значения функционала (V, 34) нужно предварительно определить вид функций $T(x_P)$ и $x_A(x_P)$ при помощи уравнений (V, 31) и (V, 32).

Интегрированием уравнения (V, 31) для заданной зависимости $T(\tau)$ находим функцию $x_A(\tau)$, после чего из уравнения (V, 32) определяем зависимость $x_P = x_P(\tau)$. Представляя последнюю в виде $\tau = \tau(x_P)$, получим выражения

$$T = T(x_P) \quad x_A = x_A(x_P) \quad (\text{V, 35})$$

которые и могут быть использованы для вычисления значения функционала (V, 34).

При решении задачи выбора оптимального температурного профиля в реакторе с использованием функционала (V, 34) не обязательно стремиться сразу найти вид оптимальной зависимости $T(\tau)$. В данном случае несколько проще вначале получить оптимальную зависимость $x_A(x_P)$ и лишь потом уже от нее перейти к зависимости $T(\tau)$.

Если ставить задачей определение зависимости $x_A(x_P)$, то выражение функционала (V, 34) с учетом ограничений в форме уравнений (V, 31) и (V, 32) несложными преобразованиями можно представить в виде функционала (V, 29).

Для этого разделим почленно уравнение (V, 31) на уравнение (V, 32):

$$\frac{dx_A}{dx_P} = - \left(1 + \frac{k_2}{k_1} \right) \quad (\text{V, 36})$$

Введем теперь величину z , которую определим соотношением:

$$z = \exp \left[\frac{E_1}{R_T} \left(\frac{1}{T_0} - \frac{1}{T} \right) \right] \quad (\text{V, 37})$$

Применяя эту величину, константы скорости стадий реакции k_1 и k_2 можно записать в виде:

$$k_1 = k_0 z \quad (\text{V, 38})$$

$$k_2 = k_0 z^{E_2/E_1} \quad (\text{V, 39})$$

где k_0 — постоянная величина, равная значению констант скорости реакции k_1 и k_2 при температуре T_0 , для которой выполняется условие:

$$k_1(T_0) = k_2(T_0) = k_0 \quad (\text{V, 40})$$

С учетом выражений (V, 37) — (V, 40) уравнение (V, 36) может быть представлено как

$$x'_A = - \left[1 + z^{\frac{E_2}{E_1} - 1} \right] \quad (\text{V, 41})$$

где через x'_A обозначено значение производной dx_A/dx_P .

Определяя из уравнения (V, 41) значение z через x'_A , получим формулу:

$$z = (-x'_A - 1)^{\frac{E_1}{E_2 - E_1}} \quad (\text{V, 42})$$

Теперь с учетом соотношений (V, 38) и (V, 42) выражение для функционала (V, 34) запишется в виде

$$\tau^{(k)} = \frac{1}{k_0} \int_0^{x_P^k} \frac{dx_P}{x_A (-x'_A - 1)^{\frac{E_1}{E_2 - E_1}}} \quad (\text{V, 43})$$

или после замены обозначений

$$I = \int_{t(0)}^{t(k)} \frac{dt}{x(x'-1)^m} \quad (V, 44)$$

где

$$m = \frac{E_1}{E_2 - E_1} \quad (V, 45)$$

$$x = -x_A \quad t = x_P \quad (V, 46)$$

$$I = -k_0 \tau^{(k)} \quad (V, 47)$$

Используя функционал (V, 44), задачу отыскания оптимального температурного профиля в реакторе идеального вытеснения для данного случая можно сформулировать как задачу отыскания экстремали функционала (V, 44), максимизирующей его значение. В результате может быть получена функция $x(t)$ или с учетом исходных обозначений — зависимость $x_A(x_P)$, применяя которую нетрудно определить вид функции $T(\tau)$. При этом из уравнения (V, 41) вначале находится функция $T(x_A)$, а затем с ее помощью из уравнения (V, 31) — функция $x_A(\tau)$, которая и позволяет определить искомую зависимость $T(\tau)$. Более подробно процедура нахождения оптимального температурного профиля для описываемой реакции обсуждается ниже.

2. МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АППАРАТ ВАРИАЦИОННОГО ИСЧИСЛЕНИЯ

Уравнение Эйлера

Предположим, что задача оптимизации сведена к задаче отыскания экстремума функционала:

$$I = \int_{t(0)}^{t(k)} \Phi(t, x, x') dt \quad (V, 48)$$

Дальнейшие выкладки имеют целью получить уравнение, которому должна удовлетворять неизвестная функция $x(t)$ для того, чтобы она могла быть экстремалью функционала (V, 48). Допустим, что эта экстремаль известна и задана в виде уравнения:

$$x = x(t) \quad (V, 49)$$

Введем такую дифференцируемую произвольную функцию $w(t)$, чтобы она обращалась в нуль на концах интервала интегрирования в соотношении (V, 48), т. е.

$$w(t^{(0)}) = w(t^{(k)}) = 0 \quad (V, 50)$$

Образует теперь новую функцию:

$$y(t, \varepsilon) = x(t) + \varepsilon w(t) \quad (V, 51)$$

в которой ε является малым численным параметром.

Подставим функцию y в выражение функционала (V, 48), в результате чего для заданной функции $w(t)$ величину функ-

ционала I можно считать функцией параметра ε :

$$I(\varepsilon) = \int_{t^{(0)}}^{t^{(k)}} \varphi(t, x + \varepsilon w, x' + \varepsilon w') dt \quad (V, 52)$$

Поскольку $x(t)$ является экстремалью функционала I , величина $I(\varepsilon)$, определяемая соотношением (V, 52), должна иметь экстремум при $\varepsilon = 0$ и, следовательно, ее производная $dI(\varepsilon)/d\varepsilon$ при $\varepsilon = 0$ должна обращаться в нуль как производная функции одной переменной в точке экстремума.

Для того чтобы найти значение производной $\left[\frac{dI(\varepsilon)}{d\varepsilon} \right]_{\varepsilon=0}$, полным дифференцированием под знаком интеграла I в соотношении (V, 52):

$$I'(\varepsilon) = \left(\frac{dI(\varepsilon)}{d\varepsilon} \right)_{\varepsilon=0} = \int_{t^{(0)}}^{t^{(k)}} \left[\frac{\partial \varphi(t, x, x')}{\partial x} w + \frac{\partial \varphi(t, x, x')}{\partial x'} w' \right] dt \quad (V, 53)$$

и преобразуем второй член в подынтегральном выражении с помощью интегрирования по частям:

$$\int_{t^{(0)}}^{t^{(k)}} \frac{\partial \varphi}{\partial x'} w' dt = \frac{\partial \varphi}{\partial x'} w \Big|_{t^{(0)}}^{t^{(k)}} - \int_{t^{(0)}}^{t^{(k)}} w \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x'} \right) dt \quad (V, 54)$$

Тогда уравнение (V, 53) перепишется в виде:

$$I'(\varepsilon) = \frac{\partial \varphi}{\partial x'} w \Big|_{t^{(0)}}^{t^{(k)}} + \int_{t^{(0)}}^{t^{(k)}} w \left[\frac{\partial \varphi}{\partial x} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x'} \right) \right] dt \quad (V, 55)$$

В последнем соотношении величина $\frac{\partial \varphi}{\partial x'} w \Big|_{t^{(0)}}^{t^{(k)}} = 0$ на основании условия (V, 50), которому удовлетворяет функция $w(t)$; следовательно:

$$I'(\varepsilon) = \int_{t^{(0)}}^{t^{(k)}} w \left[\frac{\partial \varphi}{\partial x} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x'} \right) \right] dt \quad (V, 56)$$

В соответствии со сказанным выше, производная $I'(\varepsilon)$ должна быть равна нулю, что требует равенства нулю интеграла в правой части уравнения (V, 56), т. е.

$$\int_{t^{(0)}}^{t^{(k)}} w \left[\frac{\partial \varphi}{\partial x} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x'} \right) \right] dt = 0 \quad (V, 57)$$

Поскольку функция $w(t)$ произвольна, для обращения в нуль интеграла в выражении (V, 57) достаточно равенства нулю во

всем интервале интегрирования соотношения, стоящего в квадратных скобках. Отсюда следует, что если $x(t)$ является экстремалью функционала (V, 48), то она должна удовлетворять уравнению

$$\frac{\partial \Phi(t, x, x')}{\partial x} - \frac{d}{dt} \left[\frac{\partial \Phi(t, x, x')}{\partial x'} \right] = 0 \quad (\text{V, 58})$$

которое обычно называется *уравнением Эйлера*.

В дальнейшем для сокращения записи уравнение Эйлера (V, 58) часто будет представляться в форме

$$\Phi_x - \frac{d}{dt} \Phi_{x'} = 0 \quad (\text{V, 59})$$

где для частных производных использованы обозначения:

$$\Phi_x = \frac{\partial \Phi(t, x, x')}{\partial x} \quad \Phi_{x'} = \frac{\partial \Phi(t, x, x')}{\partial x'} \quad (\text{V, 60})$$

Уравнение (V, 59) является обыкновенным дифференциальным уравнением второго порядка относительно функции $x(t)$. Для того чтобы показать это, раскроем полную производную по t . Тогда уравнение (V, 59) может быть записано в виде:

$$\Phi_{x'x'} x'' + \Phi_{x'x} x' + \Phi_{x't} - \Phi_x = 0 \quad (\text{V, 61})$$

где через $\Phi_{x'x'}$, $\Phi_{x'x}$, $\Phi_{x't}$ обозначены частные производные второго порядка от известной функции Φ .

Решение дифференциального уравнения (V, 61) или, что то же самое, уравнения (V, 59) содержит две произвольные постоянные [2], которые должны быть определены из двух граничных условий, например:

$$x(t^{(0)}) = x^{(0)} \quad x(t^{(k)}) = x^{(k)} \quad (\text{V, 62})$$

Величина δI , равная произведению $I'(0)\varepsilon$, представляет собой дифференциал функции $I(\varepsilon)$ при $\varepsilon = 0$, который в вариационном исчислении называют первой вариацией функционала I . Поскольку можно положить

$$\varepsilon w(t) = \delta(x) \quad (\text{V, 63})$$

то, умножая соотношение (V, 55) на ε , получим следующее выражение для первой вариации:

$$\delta I = I'(0)\varepsilon = \Phi_{x'} \delta x \Big|_{t^{(0)}}^{t^{(k)}} + \int_{t^{(0)}}^{t^{(k)}} \left(\Phi_x - \frac{d}{dt} \Phi_{x'} \right) \delta x dt \quad (\text{V, 64})$$

в котором δx является вариацией функции $x(t)$.

Теперь условие того, что функция $x(t)$ есть экстремаль функционала I , может быть сформулировано как требование равенства нулю первой вариации функционала δI (V, 64), откуда также следует найденное выше уравнение Эйлера.

Понятие вариации функционала в вариационном исчислении аналогично понятию дифференциала в обычном анализе. Подобно тому, как в анализе дифференциал функции dx характеризует приращение функции $x(t)$ при изменении независимой переменной t на бесконечно малую величину dt , первая вариация функционала δI определяет приращение функционала I при бесконечно малом варьировании функции $x(t)$.

Уравнение Эйлера (V, 59) получено для случая, когда функционал I выражается только через одну функцию. Если функционал зависит от нескольких функций одной переменной и описывается выражением вида (V, 14), то, проводя аналогичные рассуждения, можно найти систему уравнений Эйлера, которой должны удовлетворять эти функции для того, чтобы функционал (V, 14) имел экстремальное значение:

$$\varphi_{x_i} - \frac{d}{dt} \varphi_{x_i'} = 0 \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{V, 65})$$

Таким образом, в вариационном исчислении задача отыскания неизвестных функций сводится к решению дифференциальных уравнений. Аналогично тому, как в анализе условие равенства нулю дифференциала dx функции $x(t)$ является только необходимым условием экстремума функции $x(t)$, *уравнения Эйлера обеспечивают также лишь необходимые условия экстремума функционала.*

Другими словами, возможны случаи, когда решение уравнений Эйлера дает не экстремаль, а линию иной природы, что можно сравнить с решением уравнения $dx/dt = 0$, определяющего не только экстремальные точки функции x , но также и точки перегиба, в которых производная обращается в нуль.

Следовательно, после того как найдено решение уравнений Эйлера, предстоит еще убедиться, что функционал при этом принимает экстремальное значение и что оно нужного типа. Лишь после подобной проверки можно считать, что оптимальная задача решена до конца.

В общем случае функционала (V, 14), экстремаль которого характеризуется решением системы уравнений (V, 65), довольно сложно сформулировать условия, позволяющие определить тип экстремали. Лишь когда искомой является только одна функция, т. е. решается задача отыскания экстремали функционала (V, 48), проверка типа экстремали может быть выполнена относительно просто. Так, когда экстремаль функционала (V, 48) является минималью, для любой ее точки должно соблюдаться условие:

$$\varphi_{x'x'}(t, x, x') \geq 0 \quad (\text{V, 66})$$

Если же экстремаль функционала есть максимальь, то:

$$\varphi_{x'x'}(t, x, x') \leq 0 \quad (\text{V, 67})$$

Соотношения (V, 66) и (V, 67), называемые обычно условиями Лежандра, соответствуют обычным условиям на вторую производную, используемым в анализе.

Граничные условия

При выводе уравнения Эйлера (V, 59) отмечалось, что его решение содержит две произвольные постоянные интегрирования, значения которых должны определяться из граничных условий.

Простейшим видом граничных условий являются приведенные выше условия (V, 62), которые соответствуют случаю отыскания экстремали, соединяющей две заданные точки фазового пространства переменных (см. рис. V-1), отвечающих начальному и конечному состояниям процесса.

Ограничимся пока рассмотрением вариационной задачи, которая сводится к решению одного уравнения типа (V, 59). Общий интеграл уравнения (V, 59) может быть записан в виде [2]

$$f(x, t, C_1, C_2) = 0 \quad (V, 68)$$

причем величины C_1 и C_2 представляют собой постоянные интегрирования.

Если граничные условия для уравнения (V, 59) заданы в форме

$$x(t^{(0)}) = x^{(0)}, \quad x(t^{(k)}) = x^{(k)} \quad (V, 69)$$

то, подставляя их в выражение общего интеграла (V, 68), получим систему уравнений:

$$f(x^{(0)}, t^{(0)}, C_1, C_2) = 0 \quad f(x^{(k)}, t^{(k)}, C_1, C_2) = 0 \quad (V, 70)$$

откуда и находятся значения постоянных интегрирования C_1 и C_2 .

Для более общего случая граничных условий, когда начальная и конечная точки траектории (или какая-нибудь одна из них) не фиксированы и граничные условия заданы в виде уравнений

$$F^{(0)}(t, x) = 0 \quad (V, 19)$$

$$F^{(k)}(t, x) = 0 \quad (V, 20)$$

кроме постоянных интегрирования C_1 и C_2 , неизвестными являются также значения переменных x и t , соответствующие началу и концу траектории. Однако с учетом выражения общего интеграла (V, 68) всего можно записать лишь четыре соотношения

$$\begin{aligned} f(x^{(0)}, t^{(0)}, C_1, C_2) = 0 & \quad F^{(0)}(t^{(0)}, x^{(0)}) = 0 \\ f(x^{(k)}, t^{(k)}, C_1, C_2) = 0 & \quad F^{(k)}(t^{(k)}, x^{(k)}) = 0 \end{aligned} \quad (V, 71)$$

тогда как определению подлежат шесть значений: C_1 , C_2 , $t^{(0)}$, $t^{(k)}$, $x^{(0)}$ и $x^{(k)}$.

Подобный случай может, например, представиться при постановке оптимальной задачи с функционалом (V, 44), рассмотренным в примере V-2, для реактора

идеального вытеснения. Граничные условия для функционала (V, 44) при этом могут быть записаны в виде:

$$x_A|_{x_P=x_P^{(0)}}=x_A^{(0)} \quad \text{или} \quad x(t^{(0)})+x_A^{(0)}=0 \quad (\text{V, 72})$$

$$x_P(\tau^{(k)})=x_P^{(k)} \quad \text{или} \quad t^{(k)}-x_P^{(k)}=0 \quad (\text{V, 73})$$

Условие (V, 73) для выхода реактора представляет собой частный случай более общего условия (V, 20) для незакрепленного конца траектории, когда уравнение (V, 73) определяет на фазовой плоскости прямую линию (рис. V-4), показывающую, что на выходе аппарата концентрация исходного продукта реакции A может быть любой.

Таким образом, для нахождения всех значений неизвестных величин (C_1 , C_2 , $t^{(0)}$, $t^{(k)}$, $x^{(0)}$ и $x^{(k)}$) в дополнение к уравнениям (V, 71) необходимо иметь еще два соотношения, получаемые из условия экстремума функционала (V, 48).

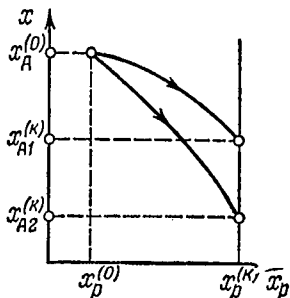


Рис. V-4. Фазовая плоскость реактора идеального вытеснения, для которого концентрация исходного продукта P на выходе не определена.

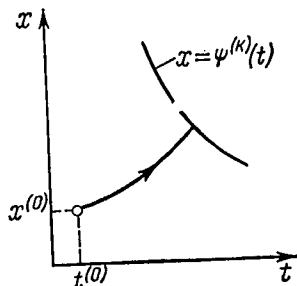


Рис. V-5. К выводу граничных условий на незакрепленном конце траектории.

Для вывода дополнительных соотношений предположим, что граничные условия заданы в виде

$$x(t^{(0)})=x^{(0)} \quad (\text{V, 74})$$

$$F^{(k)}(t, x)=0 \quad \text{или} \quad x=\psi^{(k)}(t) \quad (\text{V, 75})$$

т. е. начало экстремали закреплено условием (V, 74), а конец должен располагаться на линии (V, 75) (рис. V-5).

Найдем теперь для функционала (V, 48) первую вариацию δI , которая должна обращаться в нуль, если функция $x(t)$ является экстремалью функционала.

Согласно определению первой вариации (V, 64):

$$\delta I = I'(0) \varepsilon \quad (\text{V, 76})$$

При вычислении производной $I'(0)$ в выражении для первой вариации полагается, что функция $y(t, \varepsilon)$ произвольным образом зависит от малого параметра ε . При выводе уравнения Эйлера эта зависимость принималась в виде соотношения (V, 51), где

в качестве $w(t)$ принималась произвольная функция, удовлетворяющая условиям (V, 50).

Очевидно, что если представить зависимость функции y от малого параметра в общем виде:

$$y = y(t, \varepsilon) \quad (V, 77)$$

то для функции w из выражения (V, 77) получим:

$$w = \frac{\partial y}{\partial \varepsilon} + 0(\varepsilon) \quad (V, 78)$$

причем $0(\varepsilon) \rightarrow 0$ при $\varepsilon \rightarrow 0$.

Допустим, что при $\varepsilon = 0$ уравнение (V, 77) определяет экстремаль функционала (V, 48), т. е.

$$y(t, 0) = x(t) \quad (V, 79)$$

Поскольку в данном случае конец экстремали не закреплен (см. рис. V-5), верхний предел в интеграле функционала (V, 48) должен рассматриваться как функция параметра ε . Поэтому для значения функционала (V, 48) при ε , отличном от нуля, можно записать выражение:

$$I(\varepsilon) = \int_{t^{(0)}}^{t^{(k)}(\varepsilon)} \Phi[t, y(t, \varepsilon), y_t(t, \varepsilon)] dt \quad (V, 80)$$

Вычисляя производную $dI(\varepsilon)/d\varepsilon$ в соответствии с правилами дифференцирования интегралов, зависящих от параметра, находим

$$\begin{aligned} \frac{dI(\varepsilon)}{d\varepsilon} = & \Phi\{t^{(k)}(\varepsilon), y[t^{(k)}(\varepsilon), \varepsilon], y_t[t^{(k)}(\varepsilon), \varepsilon]\} \frac{dt^{(k)}(\varepsilon)}{d\varepsilon} + \\ & + \int_{t^{(0)}}^{t^{(k)}(\varepsilon)} \left[\Phi_x \frac{\partial y(t, \varepsilon)}{\partial \varepsilon} + \Phi_{x'} \frac{\partial y_t(t, \varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right] dt \quad (V, 81) \end{aligned}$$

Производя интегрирование по частям второго слагаемого в подынтегральном выражении, с учетом соотношения (V, 76) нетрудно получить следующую формулу, характеризующую значение первой вариации

$$\delta I = \Phi^{(k)} \delta t^{(k)} + \Phi_{x'}^{(k)} \delta x^{(k)} + \int_{t^{(0)}}^{t^{(k)}} \left(\Phi_x - \frac{d}{dt} \Phi_{x'} \right) \delta x dt \quad (V, 82)$$

где

$$\Phi^{(k)} = \Phi[t^{(k)}, x^{(k)}, (x^{(k)})'] \quad (V, 83)$$

$$\delta t^{(k)} = \left[\frac{dt^{(k)}(\varepsilon)}{d\varepsilon} \right]_{\varepsilon=0} \varepsilon \quad \delta x = \left[\frac{\partial y(t, \varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right]_{\varepsilon=0} \varepsilon \quad (V, 84)$$

Вариацию ординаты конца экстремали $\delta x^{(k)}$ нужно рассчитывать с учетом того, что этот конец может перемещаться по линии, определяемой уравнением (V, 75). Из рис. V-6 нетрудно заметить, что величина $\delta x^{(k)}$ может быть найдена по формуле:

$$\delta x^{(k)} = \left[\frac{d\psi(t)}{dt} \right]_{t=t^{(k)}} \delta t^{(k)} - \left[\frac{dx(t)}{dt} \right]_{t=t^{(k)}} \delta t^{(k)} \quad (\text{V, 85})$$

или

$$\delta x^{(k)} = [(\psi^{(k)})' - (x^{(k)})'] \delta t^{(k)} \quad (\text{V, 86})$$

Если теперь $x(t)$ является экстремалью функционала (V, 48), то его первая вариация (V, 82) должна обращаться в нуль. При этом интеграл в выражении для вариации обращается в нуль вследствие того, что экстремаль $x(t)$ удовлетворяет уравнению Эйлера и, следовательно, обращает в нуль подынтегральное выражение.

Таким образом, приравнявая нулю первую вариацию (V, 82) и принимая во внимание соотношение (V, 86), после сокращения на $\delta t^{(k)}$ получим следующее условие, которое должно выполняться на незакрепленном конце экстремали:

$$\varphi^{(k)} + [(\psi^{(k)})' - (x^{(k)})'] \varphi_{x'}^{(k)} = 0 \quad (\text{V, 87})$$

В соотношениях (V, 86) и (V, 87) через $(\psi^{(k)})'$ обозначено выражение для тангенса угла наклона касательной линии в точке пересечения экстремали к линии, определяемой выражением (V, 75).

В том случае, когда уравнение линии (V, 75) нельзя представить в явном виде относительно величины x , выражение для $(\psi^{(k)})'$ можно определить по формуле для производной от неявно заданной функции:

$$(\psi^{(k)})' = - \frac{\frac{\partial F^{(k)}(t, x)}{dt}}{\frac{\partial F^{(k)}(t, x)}{dx}} = - \frac{F_t^{(k)}}{F_x^{(k)}} \quad (\text{V, 88})$$

При этом соотношение (V, 87) может быть представлено как

$$\frac{\varphi^{(k)} - (x^{(k)})' \varphi_{x'}^{(k)}}{F_t^{(k)}} = \frac{\varphi_{x'}^{(k)}}{F_x^{(k)}} \quad (\text{V, 89})$$

Полученное условие (V, 89) обычно называется *условием трансверсальности*. Оно устанавливает связь между угловыми коэффициентами касательных к экстремали $x(t)$ и линии $x = \psi(t)$. Если теперь рассмотреть задачу с обоими незакрепленными

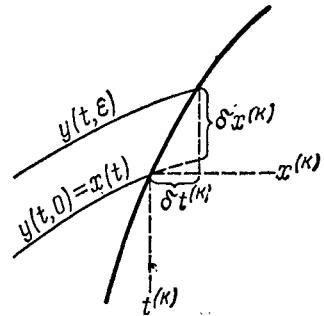


Рис. V-6. Определение вариации незакрепленного конца траектории.

концами траектории, то и на другом конце можно получить условие, аналогичное соотношению (V, 89).

Возвращаясь снова к задаче нахождения постоянных интегрирования в общем интеграле уравнения Эйлера (V, 68) при граничных условиях (V, 19) и (V, 20), заметим, что условия трансверсальности, записанные для обоих концов экстремали, дают как раз недостающие два соотношения, которые совместно с системой уравнений (V, 71) и позволяют определить совокупность шести неизвестных величин: C_1 , C_2 , $t^{(0)}$, $t^{(k)}$, $x^{(0)}$ и $x^{(k)}$.

Пусть теперь функционал зависит от нескольких функций (V, 14) и граничное условие для одного из концов экстремали задано в виде соотношения

$$F(t, x_1, x_2, \dots, x_m) = 0 \quad (V, 90)$$

что означает наличие возможности перемещения конца траектории по некоторой гиперповерхности в расширенном фазовом про-

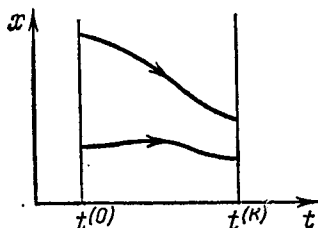


Рис. V-7. Частный случай условий трансверсальности.

странстве переменных $t, x_1, x_2, \dots, x_m$, характеризуемой уравнением (V, 90). Тогда для этого конца экстремали могут быть также записаны условия трансверсальности

$$\frac{\varphi - \sum_{i=1}^m x'_i \varphi'_{x'_i}}{F_t} = \frac{\varphi'_{x_1}}{F_{x_1}} = \dots = \frac{\varphi'_{x_m}}{F_{x_m}} \quad (V, 91)$$

представляющие собой систему m уравнений.

Следует отметить один частный случай условий трансверсальности, когда пределы интегрирования в функционале (V, 48) заданы, т. е. задан интервал изменения независимой переменной t , а начальное ($x^{(0)}$) и конечное ($x^{(k)}$) значения экстремали не определены. Легко увидеть, что этот случай соответствует заданию граничных условий (V, 19) и (V, 20) в виде соотношений:

$$\begin{aligned} F^{(0)}(t, x) = t - t^{(0)} &= 0 \\ F^{(k)}(t, x) = t - t^{(k)} &= 0 \end{aligned} \quad (V, 92)$$

и графически может быть изображен на фазовой плоскости, как показано на рис. V-7.

Вычисляя производные от выражений (V, 92), получим:

$$F_t^{(0)} = F_t^{(k)} = 1 \quad F_x^{(0)} = F_x^{(k)} = 0 \quad (V, 93)$$

Подставляя теперь значения производных (V, 93) в условия трансверсальности (V, 89), найдем, что на незакрепленных концах экстремали должны выполняться соотношения

$$\begin{aligned}\varphi_{x'}^{(0)} &= \varphi_{x'}[t^{(0)}, x(t^{(0)}), x'(t^{(0)})] = 0 \\ \varphi_{x'}^{(k)} &= \varphi_{x'}[t^{(k)}, x(t^{(k)}), x'(t^{(k)})] = 0\end{aligned}\quad (\text{V}, 94)$$

которые обычно называют *естественными граничными условиями*.

В случае функционала от нескольких функций (V, 14) эти условия для незакрепленного конца экстремали также имеют вид:

$$\varphi_{x'_i} = 0 \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{V}, 95)$$

Пример V-3. Для функционала (V, 44), рассмотренного в примере V-2 [дан реактор идеального вытеснения, где проводится параллельная реакция первого порядка (V, 30)], записать уравнение Эйлера с граничными условиями, определяющее экстремаль функционала $x(t)$. Эта экстремаль представляет в исходных обозначениях оптимальное соотношение между концентрацией исходного вещества A и продукта реакции $x_A = x_A(x_P)$, при котором заданный выход продукта P достигается в реакторе с минимальным временем пребывания реагентов.

Решение. Для функционала (V, 44) подынтегральная функция

$$\varphi(x, x') = \frac{1}{x(x' - 1)^m} \quad (\text{V}, 96)$$

Дифференцируя выражение (V, 96) по x и x' , соответственно получим:

$$\varphi_x(x, x') = -\frac{1}{x^2(x' - 1)^m} \quad (\text{V}, 97)$$

$$\varphi_{x'}(x, x') = -\frac{m}{x(x' - 1)^{m+1}} \quad (\text{V}, 98)$$

Определяя полную производную по t для выражения (V, 98), находим:

$$\frac{d}{dt} \varphi_{x'}(x, x') = \frac{m(m+1)}{x(x' - 1)^{m+2}} x'' + \frac{m}{x^2(x' - 1)^{m+1}} x' \quad (\text{V}, 99)$$

После подстановки полученных выражений производных (V, 97) и (V, 99) в общее соотношение для уравнения Эйлера (V, 59), окончательно найдем:

$$\frac{1}{x^2(x' - 1)^m} \left[\frac{m(m+1)x}{(x' - 1)^2} x'' + \frac{m}{x' - 1} x' + 1 \right] = 0 \quad (\text{V}, 100)$$

Отличительной особенностью функционала (V, 44) является то, что в его подынтегральное выражение явным образом не входит независимая переменная t , что, как показано ниже (стр. 225), позволяет даже в общем случае найти первый интеграл [2] уравнения Эйлера и тем самым свести задачу к интегрированию дифференциального уравнения первого порядка.

Граничные условия реактора идеального вытеснения для данной оптимальной задачи имеют следующий вид:

$$x_A|_{\tau=0} = x_A^{(0)} \quad x_P|_{\tau=0} = x_P^{(0)} = 0 \quad (\text{V}, 101)$$

$$x_P|_{\tau=\tau^{(k)}} = x_P^{(k)} \quad (\text{V}, 102)$$

Условия (V, 101) определяют заданные значения концентраций реагентов A и P на входе аппарата, а условие (V, 102) — заданное значение концентрации продукта P на выходе из него. Концентрация исходного вещества A на выходе реактора при этом остается неопределенной.

В терминах функционала (V, 44) с учетом обозначений для переменных (V, 46) граничные условия (V, 101) и (V, 102) означают, что начальная точка экстремали фиксирована, а в конечной задано лишь значение независимой переменной t . Поэтому при решении уравнения (V, 100) граничное условие для начальной точки экстремали представляется как

$$x(t^{(0)}) = x^{(0)} = -x_A^{(0)} \quad t^{(0)} = x_P^{(0)} = 0 \quad (V, 103)$$

Для конечной точки экстремали необходимо воспользоваться естественным граничным условием типа соотношений (V, 94), которое может быть найдено с учетом выражения для производной φ_x (V, 98):

$$\left. \begin{aligned} \varphi_{x'}[x^{(k)}, (x^{(k)})'] &= -\frac{m}{x^{(k)} [(x^{(k)})' - 1]^{m+1}} = 0 \\ t^{(k)} &= x_P^{(k)} \end{aligned} \right\} \quad (V, 104)$$

Вариационные задачи с ограничениями

Аналогично тому, как в обычном анализе ставятся задачи с ограничениями типа равенств, в вариационном исчислении также возможны задачи, в которых требуется найти экстремум некоторого функционала при условии, что искомая функция (или несколько функций) удовлетворяет дополнительным соотношениям.

Изопериметрические задачи. В этих задачах в качестве дополнительных ограничивающих условий применяются интегральные соотношения такого же типа, как и функционал. Например, для функционала

$$I(x) = \int_{t^{(0)}}^{t^{(k)}} \varphi_0(t, x, x') dt \quad (V, 105)$$

дополнительные условия могут быть записаны в виде

$$\int_{t^{(0)}}^{t^{(k)}} \varphi_i(t, x, x') dt = \mu_i \quad i = 1, \dots, n \quad (V, 106)$$

причем μ_i рассматриваются как заданные числовые значения интегралов, а $\varphi_i(t, x, x')$ являются заданными функциями переменных t, x и x' .

Пример V-4. В реакторе идеального вытеснения проводится параллельная реакция первого порядка (V, 30). Сформулировать оптимальную задачу как задачу отыскания температурного профиля, обеспечивающего при заданном времени пребывания реагентов в реакторе $\tau^{(k)}$ и заданных значениях концентраций исходного реагента A на его входе и выходе максимальный выход продукта реакции P .

Решение. Математическое описание реактора в данном случае имеет вид системы уравнений (V, 31) и (V, 32), для которой граничные условия в соответствии с постановкой задачи записываются как

$$x_A(0) = x_A^{(0)} \quad x_P(0) = x_P^{(0)} = 0 \quad (\text{V}, 107)$$

$$x_A(\tau^{(k)}) = x_A^{(k)} \quad (\text{V}, 108)$$

Из уравнения (V, 32) значение концентрации продукта P на выходе реактора может быть определено выражением

$$x_P^{(k)} = \int_0^{\tau^{(k)}} k_1(T) x_A d\tau \quad (\text{V}, 109)$$

Концентрация продукта A на выходе аппарата вычисляется из уравнения (V, 31):

$$x_A^{(k)} = x_A^{(0)} - \int_0^{\tau^{(k)}} [k_1(T) + k_2(T)] x_A d\tau \quad (\text{V}, 110)$$

Кроме того, из уравнения (V, 31) в принципе можно найти зависимость

$$T = T(x_A, x_A') \quad (\text{V}, 111)$$

где производная $dx_A/d\tau$ обозначена как x_A' .

Подставляя соотношение (V, 111) в выражения (V, 109) и (V, 110), соответственно получим уравнения

$$I = \int_{t^{(0)}}^{t^{(k)}} \Phi_0(x, x') dt \quad (\text{V}, 112)$$

$$\int_{t^{(0)}}^{t^{(k)}} \Phi_1(x, x') dt = \mu_1 \quad (\text{V}, 113)$$

где введены обозначения:

$$\tau = t \quad x_A = x \quad I = x_P^{(k)} \quad \mu_1 = x_A^{(0)} - x_A^{(k)} \quad (\text{V}, 114)$$

$$\Phi_0(x, x') = k_1[T(x_A, x_A')] x_A \quad (\text{V}, 115)$$

$$\Phi_1(x, x') = \{k_1[T(x_A, x_A')] + k_2[T(x_A, x_A')]\} x_A \quad (\text{V}, 116)$$

Таким образом, рассматриваемая задача оптимизации реактора идеального вытеснения сведена к вариационной задаче отыскания экстремума функционала (V, 112) при дополнительном условии (V, 113), т. е. к изопериметрической задаче.

В общем случае зависимости функционала от нескольких неизвестных функций

$$I(x_1, \dots, x_m) = \int_{t^{(0)}}^{t^{(k)}} \Phi_0(t, x_1, \dots, x_m, x'_1, \dots, x'_m) \quad (\text{V}, 117)$$

ограничения, накладываемые на функции $x_i(t)$ в изопериметрической задаче, могут иметь вид:

$$\int_{t^{(0)}}^{t^{(k)}} \varphi_i(t, x_1, \dots, x_m, x'_1, \dots, x'_m) dt = \mu_i \quad i = 1, \dots, n \quad (V, 118)$$

Заметим, что в отличие от задач на условный экстремум в обычном анализе, где число ограничений типа равенств не может превышать число независимых переменных или быть равным ему, в изопериметрических задачах вариационного исчисления число дополнительных условий n типа (V, 118) может быть произвольным и в частности большим, чем число искомых функций m .

Можно показать [3], что, как и в обычном анализе, введением множителей Лагранжа изопериметрическая задача сводится к задаче отыскания безусловного экстремума некоторого нового функционала

$$I^* = \int_{t^{(0)}}^{t^{(k)}} \Phi^* dt \quad (V, 119)$$

подынтегральное выражение которого представляется как

$$\Phi^* = \Phi_0 + \sum_{i=1}^n \lambda_i \varphi_i \quad (V, 120)$$

причем λ_i — постоянные величины.

Условный экстремум функционала. Рассмотрим теперь задачи отыскания экстремума функционала, в которых ограничения на неизвестные функции отличаются от соотношений (V, 118). Простейшие примеры таких задач с ограничениями в форме системы дифференциальных уравнений уже были приведены выше (см. стр. 204). В более общем случае для функционала (V, 117) эти ограничения могут иметь вид дифференциальных уравнений

$$F_k(t, x_1, \dots, x_m, x'_1, \dots, x'_m) = 0 \quad k = 1, \dots, n \quad (V, 121)$$

или конечных соотношений

$$F_k(t, x_1, \dots, x_m) = 0 \quad k = 1, \dots, n \quad (V, 122)$$

Условия (V, 122), не содержащие производных от функций x_i , в вариационном исчислении называют *голономными связями*, в отличие от условий (V, 121), которые называются *неголономными*.

Существенным при этом является то, что число связей (V, 121) или (V, 122) должно быть строго меньше числа искомых функций.

Пример V-5. Для реактора идеального вытеснения, в котором проводится реакция



и математическое описание которого представляется системой уравнений

$$\frac{dx_A}{d\tau} = -(k_1 + k_2) x_A \quad (б)$$

$$\frac{dx_B}{d\tau} = k_1 x_A - (k_3 + k_4) x_B \quad (в)$$

$$\frac{dx_P}{d\tau} = k_3 x_B \quad (г)$$

сформулировать задачу отыскания оптимального температурного профиля, обеспечивающего максимальный выход продукта реакции P для заданного времени пребывания реагентов в аппарате $\tau^{(k)}$.

Решение. Концентрация продукта P на выходе реактора может быть найдена из уравнения (г):

$$x_P^{(k)} = x_P^{(0)} + \int_0^{\tau^{(k)}} k_3(T) x_B d\tau \quad (д)$$

Определяя по уравнению (б) зависимость

$$T = T(x_A, x'_A) \quad (е)$$

и подставляя ее в соотношение (д) и уравнение (в), получим выражения

$$I = \int_{t^{(0)}}^{t^{(k)}} \Phi(x_1, x_2, x'_1) dt \quad (ж)$$

$$F(x_1, x_2, x'_1, x'_2) = 0 \quad (и)$$

где использованы обозначения:

$$\tau = t \quad x_A = x_1 \quad x_B = x_2 \quad I = x_P^{(k)} - x_P^{(0)} \quad (к)$$

$$\Phi_0(x_1, x_2, x'_1) = k_3[T(x_A, x'_A)] x_B \quad (л)$$

$$F(x_1, x_2, x'_1, x'_2) = x'_B - k_1[T(x_A, x'_A)] x_A - \{k_3[T(x_A, x'_A)] + k_4[T(x_A, x'_A)]\} x_B \quad (м)$$

Таким образом, поставленная оптимальная задача сведена к вариационной задаче с функционалом (ж) и с ограничением (и) неголономного типа.

При наличии неголономных связей задача отыскания экстремума функционала (V, 117) сводится к решению системы дифференциальных уравнений Эйлера:

$$\Phi_{x_1}^* - \frac{d}{dt} \Phi_{x'_1}^* = 0 \quad (V, 123)$$

в которой

$$\Phi^* = \Phi_0 + \sum_{k=1}^n \lambda_k(t) F_k \quad (V, 124)$$

т. е. неопределенные множители λ_k рассматриваются уже как известные функции независимой переменной.

Поэтому система дифференциальных уравнений (V, 123) для голономных связей (V, 122)

$$\varphi_{0x_i} - \frac{d}{dt} \varphi_{0x'_i} + \sum_{k=1}^n \lambda_k F_{kx_i} = 0 \quad (\text{V, 125})$$

существенно отличается от системы (V, 123) для вариационной задачи с неголономными связями (V, 121):

$$\varphi_{0x_i} - \frac{d}{dt} \varphi_{0x'_i} + \sum_{k=1}^n \left[\lambda_k \left(F_{kx_i} - \frac{d}{dt} F_{kx'_i} \right) - F_{kx'_i} \frac{d\lambda_k}{dt} \right] = 0 \quad (\text{V, 126})$$

Таким образом, в отличие от системы уравнений (V, 125) для вариационной задачи с голономными связями система дифференциальных уравнений (V, 126) для задачи с неголономными связями включает также и производные $d\lambda_k/dt$.

При интегрировании системы уравнений (V, 125) переменные λ_k можно рассматривать как некоторые функции независимой переменной t , которые подлежат исключению с помощью условий (V, 122). При этом постоянные интегрирования в решении системы дифференциальных уравнений (V, 125) определяются граничными условиями или условиями трансверсальности для функций $x_i(t)$ ($i = 1, \dots, m$).

Система уравнений (V, 126) для неголономных связей, наоборот, должна интегрироваться совместно с условиями (V, 121) как с системой дифференциальных уравнений первого порядка. В результате получается система $m+n$ дифференциальных уравнений, включающая m уравнений второго порядка относительно неизвестных функций $x_i(t)$ и n уравнений первого порядка относительно функций $\lambda_k(t)$. Общий интеграл этой системы содержит $2m+n$ произвольных постоянных интегрирования, для нахождения которых могут быть использованы только $2m$ соотношений, задаваемых граничными условиями или условиями трансверсальности для функций $x_i(t)$ ($i = 1, \dots, m$).

Выход из этого положения можно найти, если ввести в рассмотрение функции $y_i(t)$, определяемые соотношениями:

$$y_i(t) = x'_i(t) \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{V, 127})$$

Тогда условия (V, 121) превратятся в систему голономных связей относительно $2m$ функций x_i и y_i ($i = 1, \dots, m$), из которой любые n функций могут быть выражены через $2m-n$ остальных. Предположим для определенности, что удастся выразить функции

$$x_l = x_l(x_1, \dots, x_{m-n}, y_1, \dots, y_m) \quad l = m-n+1, \dots, m \quad (\text{V, 128})$$

Подставляя теперь найденные выражения для функций x_l ($l = m-n+1, \dots, m$) из системы (V, 128) в систему дифферен-

циальных уравнений (V, 126) и (V, 127), получим систему $2m$ дифференциальных уравнений первого порядка, неизвестными в которой являются функции x_l ($l = 1, \dots, m - n$), y_i ($i = 1, \dots, m$) и λ_k ($k = 1, \dots, n$), т. е. всего $2m$ функций.

В результате интегрирования этой системы уравнений может быть найдено следующее решение

$$x_l = x_l(t, C_1, C_2, \dots, C_{2m}) \quad l = 1, \dots, m - n \quad (\text{V, 129})$$

$$y_i = y_i(t, C_1, C_2, \dots, C_{2m}) \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{V, 130})$$

$$\lambda_k = \lambda_k(t, C_1, C_2, \dots, C_{2m}) \quad k = 1, \dots, n \quad (\text{V, 131})$$

куда входят только $2m$ произвольных постоянных интегрирования. Подставляя теперь выражения функций y_i (V, 130) и λ_k (V, 131) в соотношения (V, 128) с учетом соотношений (V, 129), получим решение исходной вариационной задачи

$$x_i = x_i(t, C_1, C_2, \dots, C_{2m}) \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{V, 132})$$

постоянные интегрирования в котором можно найти из граничных условий для функций x_i .

Вычислительные аспекты вариационного исчисления

Во всех приведенных выше рассуждениях молчаливо предполагалось, что существует возможность получения аналитического решения уравнений Эйлера. В действительности дело обстоит иначе. Ниже обсуждаются вычислительные аспекты, относящиеся к решению уравнения Эйлера

$$\Phi_x(t, x, x') - \frac{d}{dt} \Phi_{x'}(t, x, x') = 0 \quad (\text{V, 133})$$

для функционала от одной функции x . Более общие случаи для функционалов от нескольких функций приведены в литературе [3, 4].

Уравнение (V, 133), которому удовлетворяют экстремали функционала (V, 48), обычно оказывается нелинейным дифференциальным. Поэтому его решение в аналитическом виде можно получить лишь в сравнительно редких случаях. Как правило, для решения уравнения Эйлера необходимо использовать численные методы несмотря на все трудности, возникающие при их применении к решению краевых задач с граничными условиями, которые заданы на обоих концах интервала интегрирования.

Частные случаи решения уравнения Эйлера. Представляет интерес рассмотреть ряд случаев, когда решение уравнения (V, 133) существенно упрощается вследствие специфического вида подынтегрального выражения функционала, т. е. функции Φ .

1. *Функция Φ не содержит в явном виде величины x' .* Уравнение (V, 133) для этого варианта представляется как

$$\Phi_x(t, x) = 0 \quad (\text{V, 134})$$

т. е. получается не дифференциальное, а конечное уравнение, которое в неявной форме определяет функциональную зависимость между x и t и в которую не входят постоянные интегрирования. Естественно, что при этом, вообще говоря, невозможно удовлетворить граничным условиям, заданным даже в простейшем виде:

$$x(t^{(0)}) = x^{(0)} \quad x(t^{(k)}) = x^{(k)} \quad (V, 135)$$

и, следовательно, экстремали функционала в общем случае не существует.

2. Функция φ не содержит в явном виде величины x . При этом уравнение (V, 133) записывается как

$$\frac{d}{dt} \varphi_{x'} \quad (t, x') = 0 \quad (V, 136)$$

что сразу позволяет найти его первый интеграл

$$\varphi_{x'}(t, x') = C_1 \quad (V, 137)$$

который, в свою очередь, является обыкновенным дифференциальным уравнением первого порядка.

Решением уравнения (V, 137) будет выражение

$$x = x(t, C_1, C_2) \quad (V, 138)$$

где постоянные интегрирования C_1 и C_2 определяются из граничных условий (V, 135), а при их отсутствии — из условий трансверсальности типа соотношений (V, 89).

3. Функция φ не содержит в явном виде величины t . Уравнение (V, 133) имеет вид:

$$\varphi_{x'x'}(x, x') x'' + \varphi_{x'x}(x, x') x' - \varphi_x(x, x') = 0 \quad (V, 139)$$

Можно показать, что для уравнения (V, 139) в общем случае также находится первый интеграл, который записывается в форме:

$$\varphi(x, x') - x' \varphi_{x'}(x, x') = C_1 \quad (V, 140)$$

Для того чтобы убедиться в том, что выражение (V, 140) в действительности является первым интегралом уравнения (V, 139), достаточно проверить равенство

$$\frac{d}{dt} (\varphi - x' \varphi_{x'}) = 0 \quad (V, 141)$$

Выполняя дифференцирование в соотношении (V, 141), получим:

$$\frac{d}{dt} (\varphi - x' \varphi_{x'}) = \varphi_{xx'} x' + \varphi_{x'x''} - \varphi_{x'x''} - \varphi_{x'x} x' - \varphi_{x'x'} x' x''.$$

или

$$\frac{d}{dt} (\varphi - x' \varphi_{x'}) = -x' (\varphi_{x'x'} x'' + \varphi_{x'x} x' - \varphi_x)$$

Коэффициент при $-x'$ в последнем выражении представляет собой уравнение (V, 139), что и доказывает справедливость соотношения (V, 141).

Как и в предыдущем случае, первый интеграл (V, 140) есть дифференциальное уравнение первого порядка, решение которого может быть записано в форме (V, 138).

4. *Функция φ имеет вид:*

$$\varphi(t, x, x') = P(t, x) + Q(t, x) x' \quad (\text{V, 142})$$

причем

$$\frac{\partial P}{\partial x} = \frac{\partial Q}{\partial t} \quad (\text{V, 143})$$

В данном случае простой проверкой можно убедиться, что уравнение (V, 133) превращается в тождество. Это означает, что любая функция $x(t)$, удовлетворяющая граничным условиям задачи, является экстремалью функционала (V, 48).

Действительно, функционал (V, 48) для этого варианта может быть записан как

$$I = \int_{t(0)}^{t(k)} P dt + Q dx \quad (\text{V, 144})$$

На основании условия (V, 143) выражение, стоящее под знаком интеграла, есть полный дифференциал, т. е. величина интеграла не зависит от пути интегрирования [5] или, другими словами, величина функционала не зависит от вида функции $x(t)$.

Численное интегрирование уравнения Эйлера. Как уже отмечалось выше, уравнение Эйлера (V, 133) обычно представляет собой нелинейное дифференциальное уравнение, аналитическое решение которого чаще всего найти нельзя. Кроме того, весьма существенным является то, что решение уравнения (V, 133) должно удовлетворять граничным условиям в двух точках экстремали, которые в простейшем случае имеют вид соотношений (V, 135).

Именно это обстоятельство, т. е. необходимость выполнения граничных условий, заданных в различных точках экстремали, зачастую и осложняет получение численного решения. Для того чтобы понять, какие при этом возникают трудности, рассмотрим простейший метод численного интегрирования дифференциальных уравнений, используемый для выполнения расчетов на вычислительных машинах.

Вначале остановимся на методе интегрирования одного дифференциального уравнения первого порядка

$$x' = f(t, x) \quad (\text{V, 145})$$

с заданным начальным условием:

$$x(t^{(0)}) = x^{(0)} \quad (\text{V, 146})$$

Обычный метод интегрирования дифференциального уравнения на вычислительной машине состоит в замене производной

в равенстве (V, 145) конечно-разностным отношением

$$x'(t) \approx \frac{x(t + \Delta t) - x(t)}{\Delta t} \quad (\text{V, 147})$$

которое, естественно, справедливо лишь с определенной степенью точности.

С учетом выражения (V, 147) дифференциальное уравнение (V, 145) теперь может быть заменено следующим разностным уравнением:

$$x(t + \Delta t) = x(t) + f[t, x(t)] \Delta t \quad (\text{V, 148})$$

Соотношение (V, 148) позволяет найти значение $x(t + \Delta t)$, если известна величина $x(t)$. Таким образом, оно может быть использовано как рекуррентное соотношение для расчета значений функции $x(t)$ при последовательных значениях независимой переменной, равных $t^{(0)} + \Delta t$, $t^{(0)} + 2\Delta t$, $t^{(0)} + 3\Delta t$ и т. д., поскольку при $t = t^{(0)}$ значение $x(t^{(0)})$ известно в соответствии с начальным условием (V, 146).

Существенный момент применения рассмотренного метода — выбор величины шага интегрирования Δt . С одной стороны, чем меньше принятое значение Δt , тем точнее аппроксимация (V, 147) и, следовательно, меньше ошибка интегрирования. С другой стороны, время, необходимое для определения решения в заданном интервале $[t^{(0)}, t^{(k)}]$ изменения независимой переменной t , возрастает с уменьшением величины шага интегрирования пропорционально $1/\Delta t$. По этой причине разработан целый ряд методов [6], основанный на замене дифференциального уравнения (V, 145) более точным разностным уравнением, чем уравнение (V, 148).

Общим недостатком, присущим различным методам интегрирования уравнений лишь в большей или меньшей степени, является возможность появления неустойчивости решения, т. е. увеличения погрешности получаемого решения, обусловленной аналитическим видом интегрируемого уравнения и вычислительными трудностями, важнейшая из которых — конечная точность представления чисел в процессе выполнения расчетов.

Для того чтобы рассмотреть причины указанной неустойчивости, проанализируем решение дифференциального уравнения (V, 145) с использованием конечно-разностного соотношения (V, 148).

Как известно из теории ошибок [6], абсолютная ошибка $\delta\psi$, возникающая при вычислении функции $\psi(x)$, связана с абсолютной ошибкой в задании значения аргумента δx следующим уравнением:

$$\delta\psi = \frac{d\psi}{dx} \delta x \quad (\text{V, 149})$$

Если в выражении (V, 149) перейти к относительной ошибке ϵ как оценке точности расчетов, то оно может быть также записано в виде:

$$\epsilon_{\psi} = \frac{x}{\psi} \frac{d\psi}{dx} \epsilon_x \quad (\text{V, 150})$$

причем через ϵ_x обозначена относительная ошибка в задании значения аргумента, а через ϵ_{ψ} — относительная ошибка в определении значения функции.

Воспользуемся соотношением (V, 150) для анализа разностного уравнения (V, 148), для чего найдем, как изменяется относительная ошибка в нахождении величины $x(t)$ с возрастанием значения t . С учетом выражения (V, 150) нетрудно показать, что относительные ошибки в определении значений $x(t)$ и $x(t + \Delta t)$ связаны соотношением

$$\epsilon_{x(t+\Delta t)} = \frac{x(t) \left\{ 1 + \frac{\partial f[t, x(t)]}{\partial x} \Delta t \right\}}{x(t) + f[t, x(t)] \Delta t} \epsilon_{x(t)}$$

которое с точностью до членов первого порядка малости по Δt можно представить в виде:

$$\epsilon_{x(t+\Delta t)} = \left\{ 1 + \left[\frac{\partial f[t, x(t)]}{\partial x} - \frac{f[t, x(t)]}{x(t)} \right] \Delta t \right\} \epsilon_{x(t)} \quad (\text{V, 151})$$

Из выражения (V, 151) следует, что в зависимости от того, больше или меньше единицы величина выражения, стоящего в фигурных скобках, ошибка в определении величины $x(t)$ может либо увеличиваться, либо уменьшаться с возрастанием значения t .

Введем обозначение

$$\omega(t) = \frac{\partial f[t, x(t)]}{\partial x} - \frac{f[t, x(t)]}{x(t)} = x(t) \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{f[t, x(t)]}{x(t)} \right\} \quad (\text{V, 152})$$

с учетом которого правило для оценки погрешности решения можно сформулировать следующим образом. *В тех интервалах изменения независимой переменной t , где выполняется условие*

$$\omega(t) < 0 \quad (\text{V, 153})$$

относительная ошибка в нахождении $x(t)$ уменьшается с увеличением значения t и, наоборот, в тех интервалах изменения независимой переменной t , где

$$\omega(t) > 0 \quad (\text{V, 154})$$

относительная ошибка в определении $x(t)$ возрастает с увеличением значения t .

Обозначая длины интервалов, где выполняются условия (V, 153) и (V, 154), соответственно через $l^{(-)}$ и $l^{(+)}$ и полагая в интервале $l^{(+)}$ величину $\omega(t)$ равной некоторому среднему значению $\bar{\omega}$, можно получить приближенную формулу для оценки

погрешности решения $e_{x(t+l^{(+)})}$, накопленной в этом интервале интегрирования:

$$e_{x(t+l^{(+)})} = (1 + \bar{\omega} \Delta t)^{\frac{l^{(+)}}{\Delta t}} e_{x(t)} \quad (V, 155)$$

Если в последнем выражении (V, 155) перейти к пределу при $\Delta t \rightarrow 0$, то в результате будем иметь формулу

$$e_{x(t+l^{(+)})} = e_{x(t)} \exp(\bar{\omega} l^{(+)}) \quad (V, 156)$$

из которой следует, что относительная ошибка, накопленная на интервале длины $l^{(+)}$ при достаточно малом значении шага интегрирования Δt , изменяется в показательной зависимости от произведения $\omega l^{(+)}$.

Пример V-6. Оценить ошибку, возникающую при численном интегрировании уравнения

$$\frac{dx}{dt} = x \ln x \quad (V, 157)$$

с начальным условием:

$$x(0) = e = 2.718 \quad (V, 157a)$$

Решение. Вычислим значение $\omega(t)$ в соответствии с формулой (V, 152):

$$\omega = x \frac{d}{dx} (\ln x) = 1 \quad (V, 157b)$$

С учетом того, что значение ω постоянно и равно единице, формула для оценки погрешности интегрирования (V, 156) принимает вид:

$$e_{x(t)} = e_{x(0)} \exp t \quad (V, 157b)$$

Таким образом, для любой сколь угодно малой ошибки в задании начального условия, даже при условии абсолютной точности последующих вычислений, погрешность в определении значений $x(t)$ с использованием численного метода интегрирования возрастает в показательной зависимости от длины интервала интегрирования.

Для того чтобы убедиться в этом, можно воспользоваться аналитическим решением уравнения (V, 157):

$$x(t) = \exp(C \exp t) \quad (V, 157r)$$

Из начального условия (V, 157a) можно найти:

$$e = \exp C, \text{ откуда } C = 1 \quad (V, 157d)$$

Поскольку при применении численного метода интегрирования уравнения (V, 157) начальное условие может быть задано лишь с конечной точностью, это равносильно тому, что постоянная интегрирования в аналитическом решении (V, 157r) определяется с конечной точностью δC . В результате вместо точного решения

$$x(t) = \exp(\exp t) \quad (V, 157e)$$

получим:

$$x^*(t) = \exp[(1 + \delta C) \exp t] = \exp(\exp t) \exp(\delta C \exp t) \quad (V, 157ж)$$

Относительную ошибку в нахождении значения $\omega(t)$ при численном интегрировании в данном случае можно рассчитать по формуле:

$$e_{x(t)} = \frac{x^*(t) - x(t)}{x(t)} = \exp(\delta C \exp t) - 1 \quad (V, 157з)$$

Абсолютная ошибка в значении постоянного интегрирования δC , как трудно показать из выражения (V, 157г), связана с относительной ошибкой в задании начального условия $e_x(0)$ соотношением

$$\delta C = \ln(1 + e_{x(0)}) \quad (V, 157и)$$

подставляя которое в формулу (V, 157и), находим:

$$e_{x(t)} = \exp[\ln(1 + e_{x(0)}) \exp t] - 1 \approx e_{x(0)} \exp t \quad (V, 157к)$$

Таким образом, с точностью до членов первого порядка малости по $e_{x(0)}$ получена формула (V, 157в).

Рассмотренная неустойчивость решения является серьезным препятствием при решении дифференциальных уравнений численными методами, когда невольно приходится ограничиваться конечной точностью представления чисел, в результате чего погрешность решения может достигать значительной величины. Следует отметить, что если при решении одного дифференциального уравнения первого порядка еще можно предусмотреть некоторые методы устранения неустойчивости, то при интегрировании систем дифференциальных уравнений задача обеспечения устойчивости решения становится весьма серьезной и иногда даже непреодолимой на пути получения решения оптимальной задачи.

При численном интегрировании уравнения Эйлера, представляющего собой нелинейное дифференциальное уравнение второго порядка

$$x'' = f(t, x, x') \quad (V, 158)$$

где вид функции $f(t, x, x')$ в общем случае может быть найден из уравнения (V, 61):

$$f(t, x, x') = \frac{\varphi_x - \varphi_{x't} - \varphi_{x'x}x'}{\varphi_{x'x'}} \quad (V, 159)$$

используется конечно-разностное представление для производных первого и второго порядков. Принимая во внимание формулу (V, 147), для аппроксимации второй производной x'' получим уравнение

$$x''(t) = \frac{x'(t + \Delta t) - x'(t)}{\Delta t} = \frac{1}{(\Delta t)^2} [x(t + 2\Delta t) - 2x(t + \Delta t) + x(t)] \quad (V, 160)$$

с учетом которого находится конечно-разностное выражение уравнения (V, 158):

$$x(t + 2\Delta t) = 2x(t + \Delta t) - x(t) + f\left\{t, x(t), \frac{1}{\Delta t} [x(t + \Delta t) - x(t)]\right\} (\Delta t)^2 \quad (V, 161)$$

Чтобы можно было воспользоваться соотношением (V, 161) для численного интегрирования уравнения (V, 158), необходимо в начале процесса интегрирования знать значения $x(t^{(0)})$ и $x(t^{(0)} + \Delta t)$. Поскольку для уравнения Эйлера (V, 133) граничные условия могут быть заданы в различных точках интервала интегрирования (V, 135), величина $x(t^{(0)} + \Delta t)$ должна быть задана для начала интегрирования в известной мере произвольно, после чего становится возможным применение формулы (V, 161) для определения значения на другом конце интервала интегрирования, т. е. величины $x(t^{(k)})$. Результат сравнения найденного значения $x(t^{(k)})$ с заданным условиями (V, 135) служит для коррекции первоначально принятого значения $x(t^{(0)} + \Delta t)$. Эта процедура повторяется до тех пор, пока не будет достигнуто удовлетворительное соответствие между рассчитанным $x(t^{(k)})$ и заданным $x^{(k)}$ значениями $x(t)$ на конце интервала интегрирования.

Для нелинейных уравнений трудно указать какие-либо эффективные методы поиска значения $x(t^{(0)} + \Delta t)$, за исключением самого общего, который заключается в решении задачи минимизации рассогласования рассчитанного и заданного значений $x(t^{(k)})$. На конце интервала интегрирования с этой целью формируется определенный критерий рассогласования. На практике поиск значения $x(t^{(0)} + \Delta t)$ иногда, кроме того, осложняется еще неустойчивостью решения, приводящей к значительным колебаниям рассчитанного значения $x(t^{(k)})$ при относительно малых изменениях величины $x(t^{(0)} + \Delta t)$.

Рассмотренные выше вычислительные затруднения в получении окончательного решения при отыскании экстремалей функционала (V, 48) в значительной степени возрастают при решении вариационных задач с функционалами от нескольких функций (V, 117), особенно при наличии ограничений (V, 118) или (V, 121), когда решение задачи сводится к интегрированию системы нелинейных дифференциальных уравнений с краевыми условиями.

Таким образом, несмотря на относительную простоту формального математического аппарата вариационного исчисления, использование его для решения практических задач связано с преодолением значительных вычислительных трудностей, обусловленных, в основном, необходимостью решения краевых задач для нелинейных дифференциальных уравнений. Попыткой избежать этих трудностей и являются прямые методы решения вариационных задач, некоторые из которых приведены ниже.

Метод Ритца. Основная идея этого метода заключается в том, что решение вариационной задачи с функционалом

$$I(x) = \int_{t^{(0)}}^{t^{(k)}} \varphi(t, x, x') dt \quad (V, 162)$$

ищется в виде ряда

$$x(t) = \sum_{j=1}^N a_j \Psi_j(t) \quad (\text{V}, 163)$$

в котором a_j — неизвестные постоянные коэффициенты; $\Psi_j(t)$ — известные функции аргумента t , образующие в совокупности полную систему, т. е. систему функций, позволяющую любую непрерывную функцию записать в виде ряда (V, 163), причем необходимое число членов ряда N определяется заданной точностью представления.

Обычно функции $\Psi_j(t)$ выбирают таким образом, чтобы они удовлетворяли краевым условиям исходной вариационной задачи. Наиболее часто в качестве функций $\Psi_j(t)$ применяют различные полиномы от t . При подстановке ряда (V, 163) в выражение для функционала (V, 162) последний может рассматриваться как обычная функция N переменных $a_j (j = 1, \dots, N)$:

$$I = I(a_1, a_2, \dots, a_N) \quad (\text{V}, 164)$$

Если теперь выбрать величины a_j так, чтобы функция I , описываемая соотношением (V, 164), имела минимум или максимум в зависимости от постановки исходной оптимальной задачи, то тем самым определяется и экстремаль функционала, минимизирующая или максимизирующая его значение.

Таким образом, при использовании метода Ритца задача отыскания экстремали функционала (V, 162) сводится к задаче отыскания экстремума функции N переменных (V, 164), для чего необходимо решение системы уравнений:

$$\frac{\partial I(a_1, a_2, \dots, a_N)}{\partial a_j} = 0 \quad j = 1, \dots, N \quad (\text{V}, 165)$$

Следует отметить, что число уравнений в системе (V, 165) может быть довольно велико, так как от значения N зависит точность получаемого решения, которая увеличивается с возрастанием N .

Метод кусочно-линейной аппроксимации. При применении этого метода искомая экстремаль аппроксимируется кусочно-линейной функцией. Для ее отыскания весь интервал интегрирования в выражении функционала (V, 162) разбивается на N равных частей и оно заменяется приближенно равной ему конечной суммой:

$$I \approx \sum_{i=0}^N \varphi \left(t^{(i)} + j \Delta t, x^{(j)}, \frac{x^{(j+1)} - x^{(j)}}{\Delta t} \right) \Delta t = \sum_{j=0}^N \varphi^{(j)} \Delta t \quad (\text{V}, 166)$$

в которой $\Delta t = \frac{t^{(k)} - t^{(0)}}{N}$.

Величину функционала I теперь можно считать функцией конечного набора значений $x_j (j = 0, 1, \dots, N)$ и ее экстремум

может быть найден решением системы конечных уравнений:

$$\frac{\partial I}{\partial x^{(j)}} = 0 \quad j = 0, 1, \dots, N \quad (V, 167)$$

Если концы экстремали закреплены, например условиями (V, 135), то число уравнений в системе (V, 167) уменьшается на два, так как при этом значения $x^{(0)}$ и $x^{(N)}$ заданы.

Принимая во внимание вид функции $\Phi^{(j)}(t, x, x')$, нетрудно получить общее выражение для производной

$$\frac{\partial I}{\partial x^{(j)}} = \left[\frac{\partial \Phi^{(j)}}{\partial x} - \frac{1}{\Delta t} \left(\frac{\partial \Phi^{(j)}}{\partial x'} - \frac{\partial \Phi^{(j-1)}}{\partial x'} \right) \right] \Delta t \quad (V, 168)$$

из которого следует, что система уравнений (V, 167) по существу представляет собой систему разностных уравнений

$$\frac{\partial \Phi^{(j)}}{\partial x} - \frac{1}{\Delta t} \left(\frac{\partial \Phi^{(j)}}{\partial x'} - \frac{\partial \Phi^{(j-1)}}{\partial x'} \right) = 0 \quad j = 0, \dots, N \quad (V, 169)$$

заменяющую дифференциальное уравнение Эйлера:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial x} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial x'} \right) = 0 \quad (V, 169a)$$

Решение системы уравнений (V, 169) позволяет найти значения экстремали в заданном числе точек и тем самым построить кусочно-линейную функцию, аппроксимирующую экстремаль функционала (V, 162).

3. ОПТИМАЛЬНЫЕ ТЕМПЕРАТУРНЫЕ ПРОФИЛИ В РЕАКТОРАХ ИДЕАЛЬНОГО ВЫТЕСНЕНИЯ ДЛЯ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ РЕАКЦИЙ ПЕРВОГО ПОРЯДКА

В этом разделе рассмотрено решение методами вариационного исчисления задачи расчета оптимального температурного профиля в реакторе идеального вытеснения для параллельных реакций первого порядка:



Задача оптимизации ставится как задача определения такого температурного профиля, при котором заданное значение концентрации продукта P на выходе реактора может быть достигнуто при минимальном времени пребывания реагентов в аппарате.

Кроме того, на примере оптимизации реактора изложен подход к решению реальной вариационной задачи с ограничениями типа неравенств. Решение этих задач представляет собой, вообще говоря, весьма сложную проблему. Однако задачу оптимизации реактора идеального вытеснения в данном случае можно решить, если принять во внимание некоторые свойства оптимизируемого

процесса. К сожалению в общем случае не представляется возможным указать достаточно удобные методы решения вариационных задач с ограничениями типа неравенств. Поэтому для каждого конкретного процесса приходится искать подходящий прием или же решать задачу с помощью других методов, например динамического программирования или принципа максимума, более приспособленных для решения таких задач.

Оптимальный профиль при отсутствии ограничений на температуру процесса

В рассматриваемом случае оптимальная задача может быть сформулирована в терминах вариационного исчисления как задача максимизации функционала (V, 44) (см. пример V-2)

$$I = \int_{t^{(0)}}^{t^{(k)}} \frac{dt}{x(x'-1)^m} \quad (\text{V, 44})$$

для которого граничные условия (см. пример V-3) будут:

$$x(t^{(0)}) = x^{(0)} = -x_A^{(0)} \quad t^{(0)} = x_P^{(0)} = 0 \quad (\text{V, 103})$$

$$\frac{m}{x^{(k)}[(x^{(k)})' - 1]^{m+1}} = 0 \quad t^{(k)} = x_P^{(k)} \quad (\text{V, 104})$$

Отличительной особенностью функционала (V, 44) является то, что его подынтегральное выражение в явном виде не содержит независимой переменной t ; это позволяет сразу записать первый интеграл уравнения Эйлера, соответствующего функционалу (V, 44)

$$\Phi(x, x') - x' \Phi_{x'}(x, x') = \frac{1}{C_1} \quad (\text{V, 140})$$

или с учетом выражений для Φ и $\Phi_{x'}$:

$$\frac{1}{x(x'-1)^m} + x' \frac{m}{x(x'-1)^{m+1}} = \frac{1}{C_1} \quad (\text{V, 171})$$

После преобразований первый интеграл уравнения Эйлера (V, 171) можно записать в виде выражения:

$$\frac{(m+1)x' - 1}{x(x'-1)^{m+1}} = \frac{1}{C_1} \quad (\text{V, 172})$$

представляющего собой обыкновенное дифференциальное уравнение первого порядка, которое при произвольном значении m нельзя разрешить относительно производной x' .

Для интегрирования уравнения (V, 172) введем вспомогательную переменную [2]

$$s = x' \quad (\text{V, 173})$$

и определим величину x как функцию переменной z :

$$x(s) = C_1 \frac{(m+1)s-1}{(s-1)^{m+1}} \quad (V, 174)$$

Дифференцируя теперь соотношение (V, 174) по независимой переменной t , получим уравнение

$$s = C_1 \frac{m(m+1)s}{(s-1)^{m+2}} \frac{ds}{dt} \quad (V, 175)$$

в котором переменные разделяются и которое можно проинтегрировать, в результате чего найдем:

$$t(s) = C_1 \frac{m}{(s-1)^{m+1}} + C_2 \quad (V, 176)$$

Соотношения (V, 174) и (V, 176) в параметрической форме определяют решение дифференциального уравнения (V, 172). Для нахождения постоянных интегрирования C_1 и C_2 необходимо применить граничные условия (V, 103) и (V, 104). Кроме того, расчету подлежат начальное $s^{(0)}$ и конечное $s^{(k)}$ значения параметра s , для чего может быть использовано то обстоятельство, что начальное $t^{(0)}$ и конечное $t^{(k)}$ значения независимой переменной, а также значение $x^{(0)}$ известны.

Подставляя значение переменной x (V, 174), выраженное как функция параметра s , в граничное условие (V, 104) и принимая во внимание соотношение (V, 173), получим следующее условие, которое должно соблюдаться на конце экстремали:

$$\frac{m}{C_1 [(m+1)s^{(k)} - 1]} = 0 \quad (V, 177)$$

Поскольку значение постоянной интегрирования C_1 не может быть равно ∞ , условие (V, 177) выполняется лишь в том случае, если принять, что

$$s^{(k)} = \infty \quad (V, 178)$$

Применяя теперь соотношение (V, 176) и условие (V, 178) и учитывая, что при $s \rightarrow \infty$ величина $t(s) \rightarrow t^{(k)}$, можно определить одну из постоянных интегрирования. При этом необходимо рассмотреть следующие варианты:

$$m+1 > 0 \quad (V, 179)$$

$$m+1 < 0 \quad (V, 180)$$

Легко проверить с помощью соотношения (V, 45), что условие (V, 179) соответствует выполнению неравенства $E_1 < E_2$, а условие (V, 180) — $E_1 > E_2$.

Очевидно, что для случая (V, 180) условие

$$\lim_{s \rightarrow \infty} t(s) = t^{(k)}$$

не выполняется при конечном и отличном от нуля значении постоянной интегрирования C_1 . Последнее означает, что при $E_1 > E_2$ решения уравнения Эйлера для данной оптимальной задачи не существует. Однако при этом затруднений с выбором оптимального температурного режима реактора не возникает, поскольку известно, что когда энергия активации основной реакции E_1 выше энергии активации побочной E_2 , наилучшим режимом является изотермический при максимально возможном значении температуры (см. стр. 111).

Если же $E_1 < E_2$, то подстановка значения $s^{(h)} = \infty$ в выражение (V, 176) позволяет найти:

$$C_2 = t(s^{(k)}) = t^{(k)} = x_P^{(k)} \quad (\text{V, 181})$$

Для того чтобы вычислить значение другой постоянной интегрирования C_1 , необходимо предварительно определить значение параметра $s^{(0)}$, соответствующее начальной точке экстремали, для которой

$$x(s^{(0)}) = C_1 \frac{(m+1)s^{(0)} - 1}{(s^{(0)} - 1)^{m+1}} = x^{(0)} \quad (\text{V, 182})$$

$$t(s^{(0)}) = C_1 \frac{m}{(s^{(0)} - 1)^{m+1}} + t^{(k)} = t^{(0)} \quad (\text{V, 183})$$

причем $x^{(0)}$ и $t^{(0)}$ — известные величины.

Исключая из соотношений (V, 182) и (V, 183) постоянную интегрирования C_1 , находим:

$$s^{(0)} = \frac{1}{m+1} + \frac{m}{m+1} \frac{x^{(0)}}{t^{(0)} - t^{(k)}} \quad (\text{V, 184})$$

или после преобразований с учетом выражения величины m через энергии активаций E_1 и E_2 (V, 45):

$$s^{(0)} = 1 + \frac{E_1}{E_2} \left(\frac{x^{(0)}}{t^{(0)} - t^{(k)}} - 1 \right) = 1 + \frac{E_1}{E_2} \left(\frac{x_A^{(0)}}{x_P^{(k)}} - 1 \right) \quad (\text{V, 185})$$

Поскольку для рассматриваемого случая всегда выполняется условие

$$x_A^{(0)} > x_P^{(k)} \quad (\text{V, 186})$$

из выражения (V, 185) следует, что

$$s^{(0)} > 1 \quad (\text{V, 187})$$

для любых значений энергий активаций E_1 и E_2 .

Воспользовавшись теперь полученным выражением (V, 185) и условием (V, 182), можно найти

$$C_1 = \frac{t^{(0)} - t^{(k)}}{m} \left[\frac{E_1}{E_2} \left(\frac{x^{(0)}}{t^{(0)} - t^{(k)}} - 1 \right) \right]^{m+1} = - \frac{x_P^{(k)}}{m} \left[\frac{E_1}{E_2} \left(\frac{x_A^{(0)}}{x_P^{(k)}} - 1 \right) \right]^{m+1} \quad (\text{V, 188})$$

Подставляя значения постоянных интегрирования C_1 и C_2 из выражений (V, 181) и (V, 188) в соотношения (V, 174) и (V, 176), получим окончательно уравнение искомой экстремали, заданное в параметрической форме:

$$x(s) = -\frac{x_P^{(k)}}{m} \left[\frac{E_1}{E_2} \left(\frac{x_A^{(0)}}{x_P^{(k)}} - 1 \right) \right]^{m+1} \frac{(m+1)s-1}{(s-1)^{m+1}} \quad (\text{V, 189})$$

$$t(s) = x_P^{(k)} \left\{ 1 - \left[\frac{E_1}{E_2} \left(\frac{x_A^{(0)}}{x_P^{(k)}} - 1 \right) \right]^{m+1} \frac{1}{(s-1)^{m+1}} \right\} \quad (\text{V, 190})$$

где параметр s изменяется от значения $s^{(0)}$, определяемого выражением (V, 185), до значения $s^{(k)} = \infty$.

Для того чтобы убедиться, что найденная экстремаль действительно является решением исходной оптимальной задачи, т. е. обеспечивает максимальное значение функционала (V, 44) [или минимальное значение $\tau^{(k)}$, так как на основании уравнения (V, 47) $\tau^{(k)} = -I/k_0$], необходимо проверить выполнение условия Лежандра (V, 67) для всех точек экстремали, описываемой уравнениями (V, 189) и (V, 190).

Вычисляя значение производной $\Phi_{x'x'}$ с учетом вида подынтегрального выражения функционала (V, 44), получим:

$$\Phi_{x'x'} = \frac{m(m+1)}{x(x'-1)^{m+2}} \quad (\text{V, 191})$$

В уравнении (V, 191) числитель дроби всегда положителен. Кроме того, величина $x' - 1$ положительна вдоль всей экстремали, поскольку согласно соотношению (V, 173) $x' = s$, а $s > 1$ вдоль экстремали функционала. Концентрация исходного продукта x_A также есть положительная величина, поэтому с учетом использованной замены переменных (V, 46) значение $x < 0$ для всей экстремали. Следовательно, для всей экстремали выполняется условие (V, 67):

$$\Phi_{x'x'} < 0 \quad (\text{V, 191a})$$

Это означает, что найденная экстремаль является максимальной функционала (V, 44) и, следовательно, решением исходной оптимальной задачи.

Уравнения (V, 189) и (V, 190), характеризующие экстремаль функционала (V, 44), допускают исключение параметра s и запись уравнения экстремали в явном виде. Определяя величину параметра s из уравнения (V, 190):

$$s = 1 + \frac{E_1}{E_2} \left(\frac{x_A^{(0)}}{x_P^{(k)}} - 1 \right) \left(\frac{x_P^{(k)}}{x_P^{(k)} - t} \right)^{\frac{1}{m+1}} \quad (\text{V, 192})$$

и подставляя выражение (V, 192) в уравнение (V, 189), после преобразований получим:

$$x(t) = t - x_P^{(k)} - (x_A^{(0)} - x_P^{(k)}) \left(1 - \frac{t}{x_P^{(k)}}\right)^{\frac{E_1}{E_2}} \quad (\text{V, 193})$$

или, возвращаясь к исходным обозначениям оптимальной задачи (V, 46):

$$x_A = (x_A^{(0)} - x_P^{(k)}) \left(1 - \frac{x_P}{x_P^{(k)}}\right)^{\frac{E_1}{E_2}} + x_P^{(k)} - x_P \quad (\text{V, 194})$$

Уравнение (V, 194) представляет собой соотношение между концентрациями основного продукта реакции P и исходного реагента A , которое должно выполняться в любом сечении реактора идеального вытеснения при использовании оптимального температурного профиля. Этот профиль может быть также найден как функция концентрации x_P , если, принимая во внимание, что $x_A' = -s$, подставить выражение (V, 192) в соотношение (V, 42), имеющее вид:

$$z = (s - 1)^{\frac{E_1}{E_2 - E_1}} \quad (\text{V, 195})$$

В результате получим:

$$z(x_P) = \left[\frac{E_1}{E_2} \left(\frac{x_A^{(0)}}{x_P^{(k)}} - 1 \right) \right]^{\frac{E_1}{E_2 - E_1}} \left(\frac{x_P^{(k)}}{x_P^{(k)} - x_P} \right)^{\frac{E_1}{E_2}} \quad (\text{V, 196})$$

откуда уже легко определить зависимость температуры T в реакторе от концентрации x_P при оптимальном температурном профиле, если учесть зависимость (V, 37).

Из выражения (V, 196) следует, что значения z и T должны увеличиваться с возрастанием концентрации x_P , т. е. при увеличении степени превращения исходного реагента A . На выходе из реактора $x_P = x_P^{(k)}$ и значение $z \rightarrow \infty$, что соответствует бесконечному возрастанию температуры процесса. При этом из выражения (V, 194) одновременно вытекает, что значение $x_A \rightarrow 0$.

Таким образом, при оптимальном температурном режиме температура повышается с увеличением степени превращения исходного реагента, достигая бесконечно большого значения на выходе реактора, причем при таком режиме в аппарате обеспечивается полное превращение вещества A .

Оптимальное значение температуры на входе реактора $T^{(0)}$ может быть найдено из выражения (V, 196), которое при этом записывается в виде:

$$z(0) = \left[\frac{E_1}{E_2} \left(\frac{x_A^{(0)}}{x_P^{(k)}} - 1 \right) \right]^{\frac{E_1}{E_2 - E_1}} \quad (\text{V, 197})$$

Принимая во внимание соотношение (V, 37), получим:

$$T^{(0)} = \frac{T_0}{1 - T_0 \frac{R_r}{E_2 - E_1} \ln \left[\frac{E_1}{E_2} \left(\frac{x_A^{(0)}}{x_P^{(k)}} - 1 \right) \right]} \quad (\text{V, 198})$$

На рис. V-8 представлена зависимость оптимальной температуры на входе реактора $T^{(0)}$ от желаемого выхода $\Psi_P = x_P^{(k)} / x_A^{(0)}$ продукта реакции P . Пунктиром изображен случай, когда побочная реакция обладает более высоким значением энергии активации, чем в случае, изображенном сплошной линией.

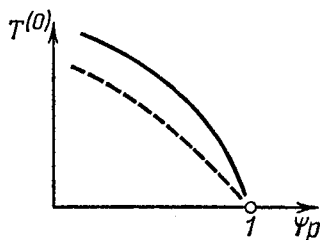


Рис. V-8. Зависимость оптимальной температуры на входе реактора от желаемого выхода продукта P .

До сих пор все результаты проведенного исследования выражались через концентрацию продукта реакции x_P . Для того чтобы перейти к независимой переменной τ , можно воспользоваться записью функционала (V, 44) с переменным верхним пределом:

$$\tau = -\frac{1}{k_0} \int_0^{x_P} \frac{dx_P}{x(x'-1)^m} \quad (\text{V, 199})$$

Поскольку в результате проведенных выше расчетов величина подынтегрального выражения может быть записана как функция независимой переменной x_P , соотношение (V, 199) позволяет определить зависимость

$$x_P = x_P(\tau) \quad (\text{V, 200})$$

с помощью которой все результаты проведенного решения можно представить в виде функции значения τ .

На рис. V-9 приведено сравнение оптимальных температурных профилей для различных значений выхода продукта P . Из рисунка видно, что для реактора, рассчитанного на более высокий выход продукта P (кривая 2), средняя температура по его длине оказывается ниже, вследствие чего средняя скорость реакции также уменьшается и размеры аппарата возрастают.

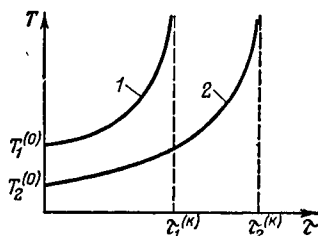
Оптимальный профиль с ограничениями на температуру процесса

Как было найдено выше, при оптимальном температурном профиле в реакторе идеального вытеснения для реакции (V, 170) температура на выходе аппарата должна быть бесконечно большой.

Поэтому, с одной стороны, при практической реализации указанного профиля эту температуру приходится ограничивать технологически допустимым значением T_2 .

С другой стороны, оптимальное значение температуры на входе реактора, определяемое формулой (V, 198), может получиться настолько низким, что размеры реактора из-за малой скорости реакции в его начале могут оказаться весьма значительными (см. рис. V-9). Для того чтобы избежать чрезмерного увеличения размеров аппарата, можно также ограничить значение допустимой в реакторе температуры нижним пределом T_1 .

Рис. V-9. Оптимальные температурные профили в реакторе, соответствующие различным выходам продукта P .

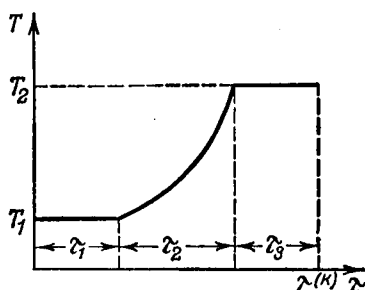


В связи с этим при расчете оптимального температурного профиля уже необходимо принимать во внимание двустороннее ограничение на допустимую величину температуры в аппарате, которое может быть записано в виде:

$$T_1 \leq T \leq T_2 \quad (\text{V, 201})$$

Поскольку при оптимальном температурном профиле и отсутствии ограничений температура в реакторе должна монотонно возрастать с увеличением степени превращения исходного реагента,

Рис. V-10. Оптимальный температурный профиль в реакторе при двусторонних ограничениях на температуру реакции.



можно ожидать, что и при наличии ограничений на температуру типа неравенств (V, 201) общий характер ее изменения сохранится, но в начале и в конце аппарата могут появиться изотермические участки соответственно с минимальной и максимальной температурой (рис. V-10).

Это утверждение, вообще говоря, нетривиальное и требующее особого доказательства, позволяет представить функционал (V, 44)

как сумму трех функционалов

$$I = I_1 + I_2 + I_3 \quad (\text{V}, 202)$$

первый из которых отвечает начальному изотермическому участку температурного профиля (рис. V-10):

$$I_1 = \int_{t^{(0)}}^{t^{(1)}} \frac{dt}{x(x'-1)^m} \quad (\text{V}, 203)$$

второй — участку профиля, где температура изменяется между нижним и верхним пределами ограничений (V, 201):

$$I_2 = \int_{t^{(1)}}^{t^{(2)}} \frac{dt}{x(x'-1)^m} \quad (\text{V}, 204)$$

и третий — конечному изотермическому участку температурного профиля:

$$I_3 = \int_{t^{(2)}}^{t^{(k)}} \frac{dt}{x(x'-1)^m} \quad (\text{V}, 205)$$

Поскольку на изотермических участках на основании ограничений (V, 201) не допускается двустороннее варьирование экстремали, для функционалов I_1 (V, 203) и I_3 (V, 205), вообще говоря, нельзя записать уравнений Эйлера. Однако для функционала (V, 204) можно вывести уравнение Эйлера, причем его общее решение совпадает с решением уравнения Эйлера для функционала (V, 44), которое в параметрической форме представляется в виде уравнений (V, 174) и (V, 176).

Для изотермических участков постоянство температуры, согласно соотношениям (V, 41) и (V, 42) (см. пример V-2), означает, что производная x' на этих участках также постоянна и соответственно равна $x'_{\min}$ и $x'_{\max}$. При этом на неизотермическом участке температурного профиля температура монотонно изменяется от минимальной величины T_1 до максимальной T_2 , а производная x' — от минимального значения

$$x'_{\min} = 1 + z_1^{1/m} = 1 + \frac{k_2(T_1)}{k_1(T_1)} = \frac{1}{\sigma_1} \quad (\text{V}, 206)$$

до максимального

$$x'_{\max} = 1 + z_2^{1/m} = 1 + \frac{k_2(T_2)}{k_1(T_2)} = \frac{1}{\sigma_2} \quad (\text{V}, 207)$$

причем величина σ_i представляет собой селективность реакции, определяемую соотношением:

$$\sigma_i = \frac{k_1(T_i)}{k_1(T_i) + k_2(T_i)} \quad i = 1, 2 \quad (\text{V}, 208)$$

Таким образом, двустороннее ограничение на температуру процесса (V, 201) в обозначениях функционала (V, 44) может быть записано как

$$\frac{1}{\sigma_1} \leq x' \leq \frac{1}{\sigma_2} \quad (\text{V, 209})$$

Для изотермических участков реактора уравнение (V, 36), характеризующее связь между концентрациями исходного реагента A и продукта реакции P , в обозначениях функционала (V, 44) имеет вид

$$\frac{dx}{dt} = \frac{1}{\sigma} \quad (\text{V, 210})$$

и может быть проинтегрировано, так как значение σ для данных участков постоянно.

При этом для начального изотермического участка реактора с минимальной температурой можно получить уравнение

$$x(t) = \frac{t}{\sigma_1} + C_3 \quad (\text{V, 211})$$

в котором постоянная интегрирования C_3 определяется из условия

$$x(t^{(0)}) = x^{(0)} = -x_A^{(0)} \quad (\text{V, 212})$$

и оказывается равной:

$$C_3 = x^{(0)} - \frac{t^{(0)}}{\sigma_1} = -x_A^{(0)} \quad (\text{V, 213})$$

Для изотермического участка с максимальной температурой решение уравнения (V, 210) также дает соотношение, аналогичное уравнению (V, 211):

$$x(t) = \frac{t}{\sigma_2} + C_4 \quad (\text{V, 214})$$

Однако постоянная интегрирования C_4 в уравнении (V, 214) может быть найдена лишь тогда, когда известно не только заданное значение концентрации $x_P^{(k)}$ продукта реакции P на выходе реактора, т. е. конечное значение независимой переменной функционала (V, 44), но также и конечное значение концентрации исходного вещества A на выходе аппарата, которое в данном случае уже нельзя принимать равным нулю, так как максимальная температура реакции ограничена.

Предполагая пока, что концентрация реагента A на выходе реакторе известна, т. е. известно значение

$$x(t^{(k)}) = x^{(k)} = -x_A^{(k)} \quad (\text{V, 215})$$

определим постоянную интегрирования в уравнении (V, 214):

$$C_4 = x^{(k)} - \frac{t^{(k)}}{\sigma_2} = -\left(x_A^{(k)} + \frac{x_A^{(k)}}{\sigma_2}\right) \quad (\text{V, 216})$$

Постоянные интегрирования C_1 и C_2 в параметрических уравнениях экстремали (V, 174) и (V, 176) функционала (V, 204) можно найти из условия непрерывности изменения величин x и t . При этом в начальной точке экстремали функционала (V, 204) значение параметра $s = 1/\sigma_1$, и, кроме того, должно выполняться условие (V, 211), что дает уравнение:

$$C_1 \sigma_1^m \frac{m+1-\sigma_1}{(1-\sigma_1)^{m+1}} = \frac{1}{\sigma_1} \left[C_1 \frac{C_m \sigma_1^{m+1}}{(1-\sigma_1)^{m+1}} + C_2 \right] + C_3 \quad (\text{V, 217})$$

Для конечной точки экстремали функционала (V, 204) $s = \frac{1}{\sigma_2}$ и условие (V, 214) приводит к еще одному уравнению:

$$C_1 \sigma_2^m \frac{m+1-\sigma_2}{(1-\sigma_2)^{m+1}} = \frac{1}{\sigma_2} \left[C_1 \frac{m \sigma_2^{m+1}}{(1-\sigma_2)^{m+1}} + C_2 \right] + C_4 \quad (\text{V, 218})$$

После элементарных преобразований система уравнений (V, 217) и (V, 218) может быть также записана в виде:

$$\frac{\sigma_1^m}{z_1} C_1 - \frac{1}{\sigma_1} C_2 = C_3 \quad (\text{V, 219})$$

$$\frac{\sigma_2^m}{z_2} C_1 - \frac{1}{\sigma_2} C_2 = C_4 \quad (\text{V, 220})$$

Полученная система уравнений (V, 219) и (V, 220) линейна относительно входящих в нее неизвестных величин C_1 и C_2 и ее решением являются соотношения

$$C_1 = \frac{1}{D} (\sigma_1 C_3 - \sigma_2 C_4) \quad (\text{V, 221})$$

$$C_2 = \frac{\sigma_1 \sigma_2}{D} \left(\frac{\sigma_2^m}{z_2} C_3 - \frac{\sigma_1^m}{z_1} C_4 \right) \quad (\text{V, 222})$$

в которых для сокращения записи использовано обозначение

$$D = \frac{\sigma_1^{m+1}}{z_1} - \frac{\sigma_2^{m+1}}{z_2} \quad (\text{V, 223})$$

В выражения (V, 221) и (V, 222) входит величина постоянной интегрирования C_4 из уравнения (V, 214), которую нельзя считать известной, поскольку значение концентрации исходного реагента C_4 на выходе реактора не определено и, следовательно, не определено и значение C_4 . Поэтому постоянные интегрирования C_1 и C_2 зависят от принятого значения $x_A^{(k)}$, а значит и величина функционала (V, 202) является функцией значения $x^{(k)} = -x_A^{(k)}$. Остается найти такое значение $x^{(k)}$, при котором величина функционала (V, 202), рассматриваемая как функция $I = I(x^{(k)})$, будет максимальной, что соответствует минимальному времени пребывания реагентов в аппарате.

Для этого попытаемся оценить величины функционалов I_2 и I_3 . Функционал I_1 , определяемый выражением (V, 203), легко вычисляется с учетом уравнения (V, 211), в результате чего получим:

$$I_1 = -k_0 \tau_1 = \frac{\sigma_1}{z_1} \ln \frac{t^{(1)} + \sigma_1 C_3}{t^{(0)} + \sigma_1 C_3} \quad (\text{V, 224})$$

Аналогично можно найти значение функционала (V, 205) с помощью уравнения (V, 214):

$$I_3 = -k_0 \tau_2 = \frac{\sigma_2}{z_2} \ln \frac{t^{(k)} + \sigma_2 C_4}{t^{(2)} + \sigma_2 C_4} \quad (\text{V, 225})$$

Для оценки величины функционала I_2 , описываемого соотношением (V, 204), произведем замену переменных в подынтегральном выражении, воспользовавшись параметрическими уравнениями экстремали (V, 174) и (V, 176) и приняв в качестве независимой переменной параметр s . В результате получим выражение

$$I_2 = -k_0 \tau_2 = -m(m+1) \int_{1/\sigma_1}^{1/\sigma_2} \frac{ds}{[(m+1)s - 1](s-1)^{m+1}} \quad (\text{V, 226})$$

из которого следует, что величина функционала I_2 не зависит от значения $x^{(k)}$ и определяется только ограничениями (V, 209).

Таким образом, оптимальное значение величины $x^{(k)}$ теперь может быть найдено из уравнения:

$$\frac{dI}{dx^{(k)}} = \frac{dI_1}{dx^{(k)}} + \frac{dI_2}{dx^{(k)}} \quad (\text{V, 227})$$

При дифференцировании выражений (V, 224) и (V, 225) нужно принимать во внимание, что значения $t^{(1)}$ и $t^{(2)}$ являются функциями величины $x^{(k)}$, поскольку постоянные интегрирования C_1 и C_2 зависят от значения C_4 согласно уравнениям (V, 221) и (V, 222).

Опуская промежуточные выкладки, приведем лишь конечную формулу для расчета оптимального значения $x_{\text{опт}}^{(k)}$:

$$x_{\text{опт}}^{(k)} = \frac{z_1}{z_2} \left(\frac{t^{(k)}}{\sigma_1} + x^{(0)} \right) \quad (\text{V, 228})$$

и, следовательно

$$C_4 = \frac{t^{(k)}}{\sigma_2} \left(\frac{\sigma_2 z_1}{\sigma_1 z_2} - 1 \right) + \frac{z_1}{z_2} x^{(0)}$$

Подставляя найденное значение C_4 в формулы для расчета постоянных интегрирования C_1 (V, 221) и C_2 (V, 222), можно найти:

$$C_1 = -z_1 \left(x_A^{(0)} - \frac{x_P^{(k)}}{\sigma_1} \right) \quad (\text{V, 229})$$

$$C_2 = x_P^{(k)} \quad (\text{V, 230})$$

Полученные значения постоянных интегрирования C_1 и C_2 справедливы при любой длине начального изотермического участка, соответствующего минимальной температуре процесса. В частности, они справедливы и в том случае, когда длина данного участка стремится к нулю. Значение независимой переменной t , характеризующей формулой (V, 176), при нулевой длине начального изотермического участка, очевидно, равно величине этой переменной на входе реактора $t^{(0)} = 0$. Подставляя в выражение (V, 176) значения постоянных интегрирования из соотношений (V, 229) и (V, 230), получим уравнение:

$$0 = x_P^{(k)} - \left(x_A^{(0)} - \frac{x_P^{(k)}}{\sigma_0} \right) \frac{m\sigma_0}{(1 - \sigma_0)} \quad (\text{V, 231})$$

Из уравнения (V, 231) можно найти минимальную температуру, при которой для заданного значения $x_P^{(k)}$ размеры начального изотермического участка становятся равными нулю, т. е. этот участок в реакторе отсутствует. В результате получим:

$$z_0 = \left(\frac{1}{\sigma_0} - 1 \right)^m = \left[\frac{E_1}{E_2} \left(\frac{x_A^{(0)}}{x_P^{(k)}} - 1 \right) \right]^{\frac{E_1}{E_2 - E_1}} \quad (\text{V, 232})$$

Формула (V, 232) в точности совпадает с найденным ранее выражением для расчета оптимальной температуры на входе реактора при отсутствии ограничений на температуру процесса [см. уравнение (V, 197)]. Этот результат означает, что независимо от ограничения на максимальное значение допустимой температуры процесса оптимальная температура на входе аппарата определяется выражением (V, 197) или (V, 232), если минимальное допустимое значение температуры T_1 меньше, чем характеризующее этим выражением. С учетом формулы (V, 228) можно также найти размеры изотермических участков при максимальной и минимальной температурах в реакторе.

Определяя постоянную интегрирования в уравнении (V, 214) по формуле (V, 216) и величину $t^{(2)}$ по уравнению (V, 176), в которое подставляются значения постоянных интегрирования C_1 и C_2 из соотношений (V, 229) и (V, 230) и в котором полагается $s = 1/\sigma_2$, при помощи формулы (V, 225) получим:

$$\tau_3 = \frac{\sigma_2}{k_0 z_2} \ln \left(1 + \frac{m}{1 - \sigma_2} \right) \quad (\text{V, 233})$$

Из формулы (V, 233) следует, что при оптимальном температурном профиле время пребывания реагентов τ_3 на изотермическом участке реактора, который соответствует максимальной допустимой температуре T_2 , не зависит от значений концентраций $x_A^{(0)}$ и $x_P^{(k)}$ и определяется только кинетикой реакции и температурой T_2 .

Аналогично можно найти формулу для расчета времени пребывания реагентов τ_1 на изотермическом участке в начале реактора, т. е. при минимальной температуре:

$$\tau_1 = \frac{\sigma_1}{k_0 z_1} \ln \frac{\sigma_1 (1 - \sigma_1) x_A^{(0)}}{(\sigma_1 x_A^{(0)} - x_P^{(k)}) (m + 1 - \sigma_1)} \quad (\text{V, 234})$$

Из формулы (V, 234) следует, что время пребывания τ_1 уже является функцией концентраций $x_A^{(0)}$ и $x_P^{(k)}$ и обращается в нуль при равенстве единице выражения, стоящего под знаком логарифма.

Кроме того, как было отмечено выше (см. стр. 245), размеры неизотермического участка не зависят от заданных значений концентраций. Таким образом, если в реакторе с оптимальным температурным профилем имеются оба изотермических участка при минимальной и максимальной температурах, то изменение значения $x_P^{(k)}$, т. е. изменение желаемого выхода продукта реакции P , сказывается на указанном профиле лишь в области изотермического участка при минимальной температуре T_1 , время пребывания реагентов на которой в данном случае изменяется.

Формула (V, 226) может быть использована также для расчета времени пребывания реагентов на неизотермическом участке и при отсутствии ограничения на минимальное значение температуры, так как пределы интегрирования в выражении (V, 226) определяются только величинами крайних температур этого участка независимо от того, есть начальный изотермический участок или его нет, т. е.

$$\tau_2 = \frac{m(m+1)}{k_0} \int_{1/\sigma_2}^{1/\sigma_0} \frac{ds}{[(m+1)s-1](s-1)^{m+1}} \quad (\text{V, 235})$$

причем через $1/\sigma_0$ обозначена селективность реакции (V, 170) при температуре на входе реактора.

Таким образом, расчет времени пребывания реагентов в реакторе идеального вытеснения с оптимальным температурным профилем для реакции (V, 170) состоит из следующих этапов:

1. По формуле (V, 198) находится оптимальное значение температуры на входе аппарата $T^{(0)}$.

2. Если $T^{(0)} < T_1$, то в реакторе должен быть изотермический участок при температуре T_1 , время пребывания реагентов на котором рассчитывается по формуле (V, 234), и температура на входе аппарата $T^{(0)}$ принимается равной T_1 . При $T^{(0)} > T_1$ изотермический участок отсутствует ($\tau_1 = 0$) и температура на входе реактора определяется значением, рассчитанным по формуле (V, 198).

3. По формуле (V, 235) находится время пребывания реагентов на неизотермическом участке τ_2 .

4. По формуле (V, 233) определяется время пребывания реагентов на изотермическом участке при максимальной температуре τ_3 .

5. Общее время пребывания реагентов в реакторе вычисляется по формуле:

$$\tau^{(k)} = \tau_1 + \tau_2 + \tau_3 \quad (\text{V, 236})$$

При необходимости найти профили концентраций и температуры как функции значения τ следует представить формулы для изотермических участков в виде выражений

$$x_A = x_A(\tau) \quad x_P = x_P(\tau) \quad (\text{V, 237})$$

а для неизотермического участка построить зависимость

$$s = s(\tau) \quad (\text{V, 238})$$

которая может быть получена при вычислении интеграла в формуле (V, 235) с переменным верхним пределом. Далее по известной зависимости (V, 238) с использованием формул (V, 174), (V, 176) и (V, 195) можно определить профили концентраций и температуры для неизотермического участка реактора.

Пример V-7. Для реакции (V, 170), кинетические параметры которой

$$\left. \begin{aligned} k_1(T) &= 0,82 \cdot 10^3 \exp\left(-\frac{2500}{T}\right) \text{ мин}^{-1} \\ k_2(T) &= 0,672 \cdot 10^6 \exp\left(-\frac{5000}{T}\right) \text{ мин}^{-1} \\ \frac{E_2}{E_1} &= 2 \quad m = \frac{E_1}{E_2 - E_1} = 1 \end{aligned} \right\} \quad (\text{V, 239})$$

рассчитать три варианта реактора идеального вытеснения с оптимальным температурным профилем при различных значениях выхода продукта реакции P : а) $x_P^{(k)} = 0,35$; б) $x_P^{(k)} = 0,40$; в) $x_P^{(k)} = 0,45$ и при условии, что $x_A^{(0)} = 1$ и максимальное значение температуры в аппарате ограничено

$$T \leq T_2, \text{ где } T_2 = 417 \text{ К} \quad (\text{V, 240})$$

Решение. По формуле

$$T_0 = \frac{E_2 - E_1}{R_r \ln \frac{k_{2, \infty}}{k_{1, \infty}}} \quad (\text{V, 241})$$

получаемой из условия (V, 40), рассчитываем температуру T_0 , при которой константы скорости $k_1(T)$ и $k_2(T)$ равны между собой. В результате находим:

$$T_0 = \frac{2500}{\ln \frac{0,672 \cdot 10^6}{0,82 \cdot 10^3}} = 373 \text{ К}$$

$$k_0 = k_1(T_0) = 0,82 \cdot 10^3 \cdot \exp\left(-\frac{2500}{373}\right) = 1 \text{ мин}^{-1} \quad (\text{V, 241a})$$

По формуле (V, 198) определяем оптимальное значение температуры на входе реактора (все дальнейшие выкладки проводятся для случая $x_P^{(k)} = 0,40$):

$$T^{(0)} = \frac{373}{1 - \frac{373}{2500} \ln \left[0,5 \left(\frac{1}{0,4} - 1 \right) \right]} = 358 \text{ К} \quad (\text{V, 242})$$

Поскольку ограничение на минимальное значение температуры отсутствует, величина $\tau_1 = 0$. Для расчета значения τ_2 необходимо предварительно определить пределы интегрирования в формуле (V, 235):

$$\left. \begin{aligned} z_0 &= \frac{k_2(T^{(0)})}{k_1(T^{(0)})} = \frac{0,672 \cdot 10^6}{0,82 \cdot 10^3} \exp\left(-\frac{2500}{358}\right) = 0,75 \\ \frac{1}{\sigma_0} &= 1 + z_0^{1/m} = 1,75 \end{aligned} \right\} \quad (\text{V, 243})$$

$$\left. \begin{aligned} z_2 &= \frac{k_2(T_2)}{k_1(T_2)} = \frac{0,672 \cdot 10^6}{0,82 \cdot 10^3} \exp\left(-\frac{2500}{417}\right) = 2 \\ \frac{1}{\sigma_2} &= 1 + z_2^{1/m} = 3 \end{aligned} \right\} \quad (\text{V, 244})$$

Интеграл в формуле (V, 235), записанный как

$$I(p_0, p) = m(m+1) \int_{p_0}^p \frac{ds}{[(m+1)s-1](s-1)^{m+1}} \quad (\text{V, 245})$$

может быть табулирован как функция верхнего предела интегрирования.

В табл. 6 представлены результаты расчета значения интеграла (V, 245) для $p_0 = 1,125$ и трех значений m . Величина интеграла с любыми другими пределами, превышающими p_0 , с помощью табл. 6 находится как разность:

$$I(p_1, p_2) = I(p_0, p_2) - I(p_0, p_1) \quad (\text{V, 246})$$

В рассматриваемом случае

$$p_2 = \frac{1}{\sigma_2} = 3,0; \quad p_1 = \frac{1}{\sigma_0} = 1,75$$

из табл. 6 находим:

$$I(1,75; 3) = 9,4537 - 8,9377 = 0,516$$

Таким образом:

$$\tau_2 = \frac{I(p_1, p_2)}{k_0} = \frac{I(1,75; 3)}{1} = 0,516 \quad (\text{V, 247})$$

Значение времени пребывания τ_3 рассчитываем по формуле (V, 233):

$$\tau_3 = \frac{1}{1 \cdot 2 \cdot 3} \ln\left(1 + \frac{1 \cdot 3}{3-1}\right) = \frac{1}{6} \ln 2,5 = 0,152 \text{ мин} \quad (\text{V, 248})$$

Необходимое общее время пребывания $\tau^{(k)}$ составляет:

$$\tau^{(k)} = \tau_2 + \tau_3 = 0,516 + 0,152 = 0,668 \text{ мин} \quad (\text{V, 249})$$

Для расчета оптимального температурного профиля на неизотермическом участке реактора нужно применить формулу (V, 195), которую удобнее представить в виде

$$T = \frac{T_0}{1 - T_0 \frac{mR_r}{E_1} \ln(s-1)} \quad (\text{V, 250})$$

и в которую следует подставить зависимость $s = s(\tau)$.

ТАБЛИЦА 6

Величина интеграла $I(p_0, p)$
для $p_0 = 1,125$ при различных
значениях m

Значение верхнего предела, p	Величина интеграла		
	$m=1$	$m=2$	$m=3$
1,50	8,3337	69,718	544,56
1,75	8,9377	71,478	548,77
2,00	9,1829	71,990	549,63
3,00	9,4537	72,371	550,07
4,00	9,5111	72,417	550,10

ТАБЛИЦА 7

Изменение температуры
на неизотермическом участке
оптимального температурного
профиля

Расстояние (в единицах времени пребывания)	Тем- пера- тура, К	Расстояние (в единицах времени пребывания)	Тем- пера- тура, К
0	358	0,4	399
0,1	361	0,5	414
0,2	370	0,516	417
0,3	377		

В данном случае для получения зависимости $s = s(\tau)$ воспользуемся аппроксимацией интеграла (V, 245) на интервале интегрирования $1,75 \leq s \leq 3,0$ выражением

$$I(s) = m(m+1) \int_{p_0}^s \frac{ds}{[(m+1)s - 1](s-1)^{m+1}} \approx I(p_0) + 0,462(s - p_0)^{0,5} \quad (\text{V, 250a})$$

которое при переходе к переменной τ принимает вид:

$$s = 1,75 + 4,7\tau^2 \quad (\text{V, 251})$$

Подставляя зависимость (V, 251) в формулу (V, 250), найдем соотношение для расчета оптимального температурного профиля на неизотермическом участке реактора:

$$T = \frac{373}{1 - \frac{373}{2500} \cdot \ln(0,75 + 4,7\tau^2)} = \frac{373}{1 - 0,1492 \ln(0,75 + 4,7\tau^2)} \quad (\text{V, 252})$$

Результаты расчета по формуле (V, 252) представлены в табл. 7.

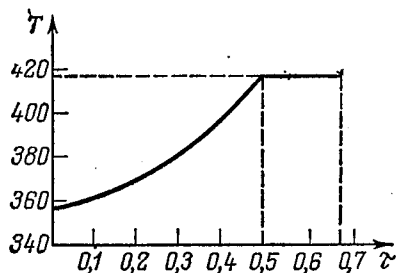


Рис. V-11. Оптимальный температурный
профиль для $x_p^{(k)} = 0,4$.

На рис. V-11 показан полученный для случая $x_p^{(k)} = 0,4$ температурный профиль, при применении которого заданный выход продукта P достигается за минимальное время пребывания реагентов в реакторе.

В табл. 8 приведены результаты расчета минимального времени пребывания для различных значений выхода продукта P , а также оптимальные значения входных температур и соответствующие конечные концентрации исходного вещества A .

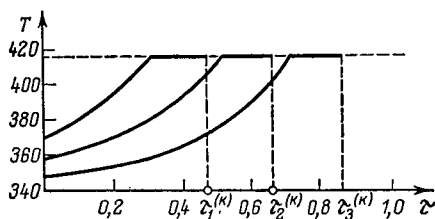
ТАБЛИЦА 8

Сравнение параметров реакторов, рассчитанных на различных выходы продукта P , при отсутствии ограничения на нижний предел температуры

$x_P^{(k)}$	$x_A^{(k)}$	$T^{(0)}$	τ_2	τ_3	$\tau^{(k)}$	$\tau_2/\tau^{(k)}$
0,35	0,1510	369	0,320	0,152	0,472	0,686
0,40	0,1125	358	0,516	0,152	0,668	0,773
0,45	0,0825	347	0,720	0,152	0,872	0,882

На рис. V-12 показаны температурные профили в реакторах, рассчитанных на разные выходы продукта P .

Рис. V-12. Оптимальные температурные профили для различных значений $x_P^{(k)}$, рассчитанные с учетом ограничений на температуру реакции.



Пример V-8. Для реакции, рассмотренной в примере V-7, рассчитать реактор при наличии ограничения на минимальное значение температуры:

$$T_1 \leq T, \quad \text{где } T_1 = 373 \text{ К} \quad (\text{V, 253})$$

Решение. Как и в примере V-7, подробный расчет проведем для значения $x_P^{(k)} = 0,4$.

Поскольку значение $T^{(0)}$, полученное по формуле (V, 242), оказывается ниже допустимой неравенством (V, 253) температуры, в реакторе будет изотермический участок при температуре T_1 . Время пребывания реагентов на этом участке τ_1 можно найти по формуле (V, 234), для чего необходимо предварительно вычислить значения z_1 и σ_1 :

$$\left. \begin{aligned} z_1 &= \frac{k_2(T_1)}{k_1(T_1)} = \frac{0,672 \cdot 10^6}{0,82 \cdot 10^3} \exp\left(-\frac{2500}{373}\right) = 1 \\ \frac{1}{\sigma_1} &= 1 + z_1^{1/m} = 2 \end{aligned} \right\} \quad (\text{V, 254})$$

В результате получим:

$$\tau_1 = \frac{0,5}{1 \cdot 1} \ln \frac{0,5(1 - 0,5) \cdot 1}{(0,5 \cdot 1 - 0,4)(1 + 1 - 0,5)} = 0,5 \ln 1,67 = 0,256 \text{ мин} \quad (\text{V, 255})$$

Время пребывания реагентов на неизотермическом участке реактора τ_2 определяется по формуле (V, 247), в которой следует положить

$$p_1 = \frac{1}{\sigma_1} = 2 \quad p_2 = \frac{1}{\sigma_2} = 3$$

и величину $I(p_1, p_2)$ найти из табл. 6, используя соотношение (V, 246):

$$\tau_2 = \frac{I(p_1, p_2)}{k_0} = \frac{I(2; 3)}{1} = 0,271 \quad (\text{V, 256})$$

ТАБЛИЦА 9

Сравнение параметров реакторов, рассчитанных на различный выход продукта P при наличии ограничений на нижний предел температуры

$x_P^{(k)}$	$x_A^{(k)}$	τ_1	τ_2	τ_3	$\tau^{(k)}$	$\tau_2/\tau^{(k)}$
0,35	0,15	0,048	0,271	0,152	0,471	0,575
0,40	0,10	0,256	0,271	0,152	0,680	0,398
0,45	0,05	0,600	0,271	0,152	1,023	0,265

Время пребывания реагентов на изотермическом участке при максимальной температуре определяется только значением температуры T_2 , поэтому величина τ_3 , как и в предыдущем случае, будет равна:

$$\tau_3 = 0,152 \quad (V, 257)$$

Полное время пребывания реагентов в аппарате составляет:

$$\tau^{(k)} = \tau_1 + \tau_2 + \tau_3 = 0,256 + 0,271 + 0,152 = 0,679 \text{ мин} \quad (V, 258)$$

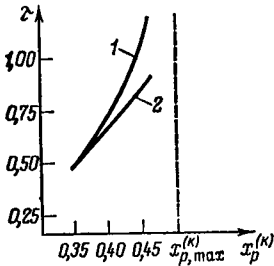


Рис. V-13. Зависимость размеров реактора от величины $x_P^{(k)}$ при наличии (1) и отсутствии (2) ограничений на минимальную температуру реакции.

Результаты подобного расчета реактора для нескольких значений $x_P^{(k)}$ представлены в табл. 9, из которой следует, что возрастание выхода продукта реакции достигается только при увеличении начального изотермического участка аппарата.

Сравнение результатов расчета, приведенных в табл. 8 и 9, показывает, что ограничение на нижнее значение температуры заметно влияет на необходимое время пребывания реагентов в реакторе. В особенности это влияние проявляется при задании величины $x_P^{(k)}$, приближающейся к предельно достижимому значению, которое определяется нижним ограничением температуры:

$$x_{P \max}^{(k)} = \sigma_1 x_A^{(0)} = 0,5 \quad (V, 259)$$

На рис. V-13 изображены зависимости времени пребывания реагентов в реак-

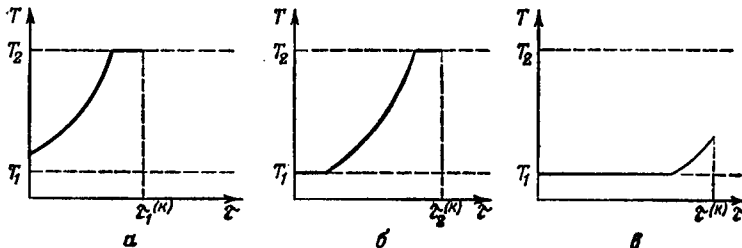


Рис. V-14. Зависимость положения неизотермического участка от величины $x_P^{(k)}$.

торе от заданного значения $x_P^{(k)}$ при наличии (кривая 1) и отсутствии (кривая 2) ограничения на минимальное значение температуры реакции.

На рис. V-14 показана кривая изменения температуры в реакторе при увеличении задаваемого значения $x_p^{(k)}$. Из рисунка видно, что по мере возрастания величины $x_p^{(k)}$ неизотермический участок сдвигается ближе к концу реактора при постоянном характере изменения температуры в пределах этого участка.

Чувствительность оптимума

Поскольку на практике реализация оптимального температурного профиля встречает серьезные технические трудности, представляет интерес рассмотреть возможность приближения к этому профилю секционированием реактора с поддержанием в пределах каждой секции изотермического режима или близкого к нему. Такое сравнение по существу эквивалентно решению задачи исследования чувствительности найденного оптимального температурного режима аппарата и в этой связи имеет еще большее значение.

Для реакции (V, 170) в примере III-10 (см. стр. 127) было показано, что в случае двух изотермических секций в реакторе с температурами T_1 и T_2 минимальное время пребывания в аппарате может быть вычислено по формуле

$$\tau_{II}^{(k)} = \frac{1}{k_0} \left[\frac{\sigma_1}{z_1} \ln \frac{x_A^{(0)}}{x_A^{(1)}} + \frac{\sigma_2}{z_2} \ln \frac{\sigma_2 x_A^{(1)}}{\sigma_1 x_A^{(0)} - (\sigma_1 - \sigma_2) x_A^{(1)} - x_p^{(k)}} \right] \quad (\text{III, 190})$$

в которой оптимальное значение концентрации на выходе первой секции определяется выражением

$$x_A^{(1)} = \frac{z_2 \sigma_1 - z_1 \sigma_2}{(\sigma_1 - \sigma_2) z_2} \left(x_A^{(0)} - \frac{x_p^{(k)}}{\sigma_1} \right) \quad (\text{III, 192})$$

В табл. 10 сопоставлено время пребывания для реакторов с оптимальным температурным профилем $\tau_{\text{опт}}^{(k)}$ и двухсекционных с изотермическими секциями при температурах T_1 и T_2 .

Из таблицы следует, что замена реактора с оптимальным температурным профилем двухсекционным реактором с изотермическими секциями требует при осуществлении рассмотренного случая параллельных реакций первого порядка лишь незначительного увеличения размеров аппарата, так как время пребывания реагентов в реакторе с оптимальным температурным профилем $\tau_{\text{опт}}^{(k)}$ несущественно меньше времени пребывания реагентов в двухсекционном изотермическом аппарате $\tau_{II}^{(k)}$.

Разумеется, что проведенное численное сравнение не может рассматриваться как детальное исследование чувствительности оптимума при отклонении температурного режима реактора от оп-

ТАБЛИЦА 10

Сравнение реактора с оптимальным температурным профилем и двухсекционного изотермического реактора

$x_p^{(k)}$	$\tau_{\text{опт}}^{(k)}$	$\tau_{II}^{(k)}$
0,35	0,471	0,486
0,40	0,680	0,688
0,45	1,023	1,030

тимального. Однако в данном случае можно вполне ограничиться и таким исследованием, чтобы с достаточным основанием рекомендовать для рассмотренных реакций двухсекционный изотермический реактор как наилучший вариант аппаратного оформления процесса.

* *
*

Выше уже были рассмотрены трудности, возникающие при решении краевых задач, к которым приводит математический аппарат вариационного исчисления. Однако этим еще не исчерпываются недостатки классического вариационного исчисления. Гораздо более серьезные препятствия на пути решения оптимальной задачи вариационными методами возникают тогда, когда в данной задаче присутствуют ограничения типа неравенств:

$$x_1 \leq x(t) \leq x_2 \quad (V, 260)$$

или

$$x'_1 \leq x'(t) \leq x'_2 \quad (V, 261)$$

Пример задачи с ограничением вида (V, 261) уже приводился при расчете оптимального температурного профиля в реакторе идеального вытеснения с двусторонним ограничением на температуру процесса (V, 201).

Поскольку решение вариационной задачи связано с получением и решением уравнения Эйлера, которое, в свою очередь, может существовать лишь в том случае, когда отыскиваемая экстремаль допускает свободное двустороннее варьирование, наличие ограничений (V, 260) и (V, 261) может привести к тому, что в некоторых случаях вообще невозможно написать данное уравнение. При этом ограничение типа (V, 260) еще позволяет иногда использовать аппарат вариационного исчисления поиском решения в виде функции, по-разному определенной в ряде интервалов, на которых $x(t) = x_1$, $x(t) = x_2$ или $x_1 < x(t) < x_2$, как это было сделано при расчете оптимального температурного профиля в реакторе. При ограничениях же типа (V, 261) вариационную задачу даже таким способом в общем случае, по-видимому, нельзя решить. Это объясняется тем, что при ограничениях типа (V, 261) экстремаль функционала может проходить не только внутри дозволенной области, но также частично или полностью по ее границе.

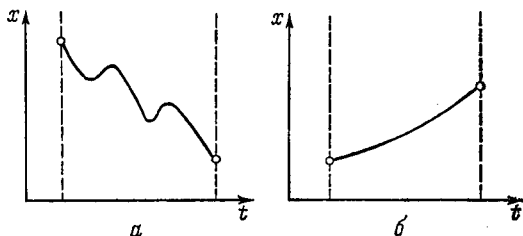
Аналогичное препятствие на пути применения классических методов поиска экстремума отмечалось также и при отыскании экстремума функции $x(t)$ методами классического анализа (см. главу III).

Если для случая, изображенного на рис. V-15, а, решение уравнения $x'(t) = 0$ и имеется, хотя и не включает граничные точки, то для случая, изображенного на рис. V-15, б, решения уравнения $x'(t) = 0$ нет вообще. Последний случай и соответствует невозможности написания уравнения Эйлера, так как не существует

экстремали, на которой первая вариация функционала обращалась бы в нуль.

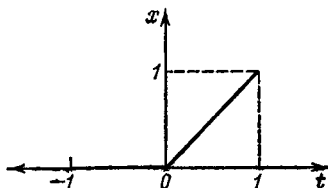
Другое осложнение, с которым можно встретиться при использовании аппарата вариационного исчисления, состоит в том, что решение довольно значительного класса оптимальных задач во-

Рис. V-15. К вопросу о существовании экстремали, допускающей двустороннее варьирование.



обще нельзя представить непрерывными функциями или функциями с непрерывными производными первого порядка. Простейшим примером такой задачи, в которой решение имеет разрывные про-

Рис. V-16. Минималь функционала (V, 262).



изводные первого порядка, является задача минимизации функционала [7]

$$I = \int_{-1}^1 [x(1-x')]^2 dt \quad (\text{V, 262})$$

с граничными условиями для экстремали:

$$x(-1) = 0 \quad x(1) = 1 \quad (\text{V, 263})$$

Минимальное значение подынтегральной функции в выражении (V, 262), равное нулю, достигается на ломаной линии (рис. V-16):

$$x = \begin{cases} 0 & t \leq 0 \\ x & t > 0 \end{cases} \quad (\text{V, 264})$$

Общий же интеграл уравнения Эйлера, соответствующего функционалу (V, 262), определяет семейство гипербол

$$(t - C_1)^2 - x^2 = (C_2)^2 \quad (\text{V, 265})$$

причем C_1 и C_2 — постоянные интегрирования.

Легко проверить, что ни одна из гипербол, описываемых уравнением (V, 265), не удовлетворяет поставленным граничным условиям (V, 263).

Таким образом, даже тогда, когда уравнение Эйлера существует и можно найти его общий интеграл, это еще не означает, что получено решение исходной оптимальной задачи. Лишь относительно узкий класс задач с достаточно «гладкими» решениями и «хорошими» ограничениями позволяет успешно применять методы вариационного исчисления. В остальных же случаях более эффективными оказываются такие методы, как динамическое программирование и принцип максимума.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Смирнов В. И.* Курс высшей математики. Т. 1. М., Физматгиз, 1958. 478 с.
2. *Степанов В. В.* Курс дифференциальных уравнений. М., Гостехтеоретиздат, 1960. 468 с.
3. *Лаврентьев М. А., Люстерник Л. А.* Курс вариационного исчисления. М., Гостехиздат, 1950. 192 с.
4. *Гельфанд И. М., Фомин С. В.* Вариационное исчисление. М., Физматгиз, 1961. 230 с.
5. *Смирнов В. И.* Курс высшей математики. Т. 2. М., Физматгиз, 1958. 628 с.
6. *Березин И. С., Жидков Н. П.* Методы вычислений. Т. 1. М., Физматгиз, 1959. 464 с.
7. *Фельдбаум А. А.* Основы теории оптимальных автоматических систем. М., Физматгиз, 1966. 623 с.

ДИНАМИЧЕСКОЕ ПРОГРАММИРОВАНИЕ

В главе III отмечалось, что решение задач высокой размерности методами классического анализа сопряжено с определенными трудностями, вызванными необходимостью решения систем обычно нелинейных уравнений высокого порядка. Вместе с тем, существуют процессы высокой размерности, свойства которых позволяют так построить алгоритм оптимизации, что размерность процесса уже не служит камнем преткновения при его оптимизации.

К числу таких процессов относятся многостадийные процессы с управлением на каждой стадии, весьма широко распространенные в химической технологии, где принцип последовательной переработки сырья является, по существу, основным.

Именно для решения задач оптимизации многостадийных процессов, а также для процессов, которые могут быть математически описаны как многостадийные, создан и в настоящее время успешно применяется *метод динамического программирования*.

1. ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ

Многостадийные процессы

Важнейшее понятие, которое часто используется в дальнейшем изложении, — *стадия процесса*. В качестве стадии принимается один из элементов, на совокупность которых можно провести разбиение процесса как во времени развития, так и в пространстве изменения его параметров. При этом в первом случае под стадией понимается некоторый заранее выбранный отрезок времени, а во втором — отдельный аппарат в технологической цепи производства, элемент данного аппарата или, наконец, один из этапов проектирования в общем комплексе проектных работ.

Стадии в процессе могут быть однородными и неоднородными. Процесс с однородными стадиями представляет собой последовательное изменение состояния объекта во времени либо состоит из последовательности однотипных аппаратов (например, каскад реакторов), в которой соответствующий поток сырья проходит последовательную переработку.

Примером процесса с неоднородными стадиями является технологический участок химического производства, на котором исходное сырье последовательно перерабатывается в аппаратах различных типов (например, реактор — абсорбер — ректификационная колонна).

Состояние отдельной стадии процесса можно охарактеризовать совокупностью величин, которую назовем выходом или переменными состояния стадии. Если выход стадии служит входом для следующей стадии, то для последней совокупность выходных параметров предыдущей стадии уже определяет состояние входа.

Кроме входных и выходных переменных на каждой стадии необходимо выделять группу управляющих воздействий или управление. При отсутствии управления на стадии выделение ее теряет смысл, поскольку в данном случае выход стадии однозначно характеризуется ее входом и она не может рассматриваться как управляемое звено.

Многие процессы с распределенными параметрами, которые на первый взгляд нельзя представить как многостадийные из-за непрерывности изменения величин, определяющих их состояние и управление (например, реактор вытеснения), могут быть описаны как предельный случай многостадийного процесса, если в качестве отдельной стадии принять достаточно малый элемент, аналогично тому, как при решении дифференциальных уравнений численными методами используется их конечно-разностная форма.

В табл. 11 приведены примеры многостадийных процессов химической технологии, которые явным или неявным образом допускают выделение отдельных управляемых стадий.

ТАБЛИЦА 11

Некоторые процессы химической технологии, которые могут рассматриваться как многостадийные управляемые процессы

Процесс (аппарат)	Стадия	Управление
Периодический	Отрезок времени	Управляемые параметры процесса
Каскад реакторов смешения	Реактор	Управляющие воздействия реактора
Многоступенчатый реактор	Ступень реактора	Температура реагирующей смеси на входе реактора
Реактор вытеснения с секционированным теплообменником	Секция теплообменника	Параметры хладагента
Многоступенчатые теплообменники	Ступень теплообменника	Поверхность теплообмена на ступени
Неадиабатическая ректификация	Тарелка	Внешний теплообмен тарелки
Экстракция с перекрестным током	Ступень экстракции	Количество промывного раствора, подаваемого на ступень

Динамическое программирование, как и все методы, рассмотренные в предыдущих главах, применяется для оптимизации *математически описанных процессов*. Поэтому в дальнейшем для многостадийного процесса (рис. VI-1) предполагается известным математическое описание его каждой стадии, которое представляется в общем виде системой уравнений

$$x_k^{(i)} = \varphi_k^{(i)}(x_1^{(i-1)}, \dots, x_m^{(i-1)}, u_1^{(i)}, \dots, u_r^{(i)}) \quad (\text{VI}, 1)$$

$$k = 1, \dots, m \quad i = 1, \dots, N$$

связывающей выходные параметры i -й стадии $x_k^{(i)}$ с выходными параметрами предыдущей стадии $x_k^{(i-1)}$ и управлением $u_l^{(i)}$ ($l = 1, \dots, r$), используемым на i -й стадии.

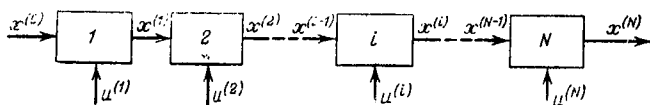


Рис. VI-1. Многостадийный процесс.

Систему уравнений (VI, 1) удобно также представить в векторной форме

$$x^{(i)} = \varphi^{(i)}(x^{(i-1)}, u^{(i)}) \quad (\text{VI}, 2)$$

причем $x^{(i)}$ — вектор совокупности переменных состояния (или выход) i -й стадии:

$$x^{(i)} = (x_1^{(i)}, x_2^{(i)}, \dots, x_m^{(i)}) \quad (\text{VI}, 3)$$

а $u^{(i)}$ — вектор совокупности управляющих воздействий (управление) на i -й стадии:

$$u^{(i)} = (u_1^{(i)}, u_2^{(i)}, \dots, u_r^{(i)}) \quad (\text{VI}, 4)$$

Размерности векторов состояния $x^{(i)}$ и управления $u^{(i)}$ в общем случае могут быть различными для разных стадий процесса. Однако далее, не нарушая общности, можно принять, что размерности m и r векторов состояния и управления для всех стадий процесса одинаковы.

В реальных процессах на значения переменных состояния $x^{(i)}$ и управляющих воздействий $u^{(i)}$ могут быть наложены ограничения, определяющие диапазон изменений или взаимосвязь указанных переменных. Математически это находит выражение в появлении дополнительных условий в виде равенств или неравенств

$$F_j(x^{(1)}, \dots, x^{(N)}, u^{(1)}, \dots, u^{(N)}) \geq 0 \quad j = 1, \dots, J \quad (\text{VI}, 5)$$

которые должны учитываться при решении задачи оптимизации.

В дальнейшем при необходимости выразить, что значения переменных состояния или управляющих воздействий удовлетворяют ограничениям (VI, 5), будет использоваться запись:

$$x^{(i)} \in X, \quad u^{(i)} \in U \quad (\text{VI}, 6)$$

Смысл записи (VI, 6) заключается в том, что значения переменных $x^{(i)}$ и $u^{(i)}$ принадлежат к допустимым областям их изменения X и U , ограниченным соотношениями (VI, 5).

Предполагается, что эффективность каждой стадии процесса оценивается некоторой скалярной величиной

$$r_i = r_i^*(x^{(i)}, u^{(i)}) \quad (\text{VI}, 7)$$

заданной в виде функции от переменных состояния стадии $x^{(i)}$ и принятого на ней управления $u^{(i)}$.

С учетом математического описания стадии (VI, 1) функциональная зависимость (VI, 7) может быть представлена также как

$$r_i = r_i(x^{(i-1)}, u^{(i)}) \quad (\text{VI}, 8)$$

т. е. как функция состояния входа $x^{(i-1)}$ на i -й стадии и используемого на ней управления $u^{(i)}$.

Результирующая оценка эффективности многостадийного процесса в целом определяется как аддитивная функция результатов, получаемых на каждой стадии:

$$R_N = \sum_{i=1}^N r_i(x^{(i-1)}, u^{(i)}) \quad (\text{VI}, 9)$$

Естественно, что значение критерия оптимальности R_N (VI, 9) зависит от совокупности u_N управляющих воздействий на всех стадиях процесса, которая представляет собой набор значений векторов $u^{(i)}$ для всех стадий:

$$u_N = (u^{(1)}, u^{(2)}, \dots, u^{(N)}) \quad (\text{VI}, 10)$$

Совокупность управлений для всех стадий процесса $u^{(N)}$ будем называть в дальнейшем *стратегией управления многостадийным процессом* или просто *стратегией управления*.

Таким образом, задачу оптимизации многостадийного процесса можно сформулировать как задачу отыскания оптимальной стратегии

$$\tilde{u}_{\text{опт}} = (u_{\text{опт}}^{(1)}, u_{\text{опт}}^{(2)}, \dots, u_{\text{опт}}^{(N)}) \quad (\text{VI}, 11)$$

для которой критерий оптимальности R_N (VI, 9) принимает в зависимости от постановки оптимальной задачи максимальное или минимальное значение.

Принцип оптимальности

В основу метода динамического программирования положен принцип оптимальности [1], который в переложении для многостадийного процесса (см. рис. VI-1) может быть сформулирован

следующим образом. Оптимальная стратегия обладает тем свойством, что каковы бы ни были начальное состояние $x^{(0)}$ многостадийного процесса и управление на первой стадии $u^{(1)}$, последующие управления на всех стадиях $u^{(i)}$ ($i = 2, \dots, N$) должны составлять оптимальную стратегию u_{N-1} относительно состояния $x^{(1)}$ первой стадии, определяемого начальным состоянием процесса $x^{(0)}$ и управлением на первой стадии $u^{(1)}$.

В приведенной формулировке принципа оптимальности под оптимальной стратегией u_{N-1} понимается стратегия управления многостадийным процессом, включающим $N - 1$ последних стадий исходного процесса, придающая критерию

$$R_{N-1} = \sum_{i=1}^N r_i(x^{(i-1)}, u^{(i)}) \quad (\text{VI}, 12)$$

оптимальное значение.

Другими словами, оптимальная стратегия u_{N-1} находится для $(N - 1)$ -стадийного процесса, для которого величина является начальным состоянием.

Таким образом, если известна оптимальная стратегия управления u_{N-1} для любого возможного состояния $x^{(1)}$ первой стадии N -стадийного процесса, то уже не составляет труда выбрать оптимальное управление и на первой стадии $u_{\text{опт}}^{(1)}$, поскольку на последующих стадиях оно определяется только состоянием выхода первой стадии:

$$u_{N-1} = u_{N-1}(x^{(1)}) \quad (\text{VI}, 13)$$

Процедура применения принципа оптимальности для оптимизации N -стадийного процесса, очевидно, должна начинаться с последней стадии процесса, для которой не существует последующих стадий, могущих повлиять согласно принципу оптимальности на выбор управления $u_{\text{опт}}^{(N)}$ на этой стадии. После того как оптимальное управление $u_{\text{опт}}^{(N)}$ найдено для всех возможных состояний входа последней стадии $x^{(N-1)} \in X$, можно приступить к определению оптимального управления для предыдущей $(N - 1)$ -стадии, для которой оптимальная стратегия управления на последующих стадиях (т. е. на последней N -й стадии) известна, и т. д.

В результате может быть найдена оптимальная стратегия управления для всего многостадийного процесса, являющаяся функцией начального состояния процесса $u_N(x^{(0)})$. Если начальное состояние $x^{(0)}$ известно (задано или выбрано из условия оптимума критерия R), то его значение определяет оптимальные управления для всех стадий процесса.

Решение комбинаторных задач

Наиболее наглядно метод динамического программирования можно демонстрировать при решении комбинаторных задач, которые могут быть представлены как многостадийные процессы

принятия решений, т. е. выбора управления на каждой стадии из некоторого дискретного и конечного набора возможных управлений (решений).

Простейшим примером такой задачи является задача о путешественнике, которому предстоит из пункта A попасть в пункт B , соединяющийся с пунктом A разветвленной сетью дорог. Двигаясь, путешественник на каждом перекрестке (стадии) должен принимать решение, по какой дороге двигаться дальше, чтобы как можно быстрее попасть в конечный пункт B . Рассматриваемую ниже комбинаторную задачу можно также интерпретировать как задачу о путешественнике.

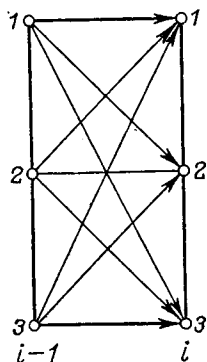


Рис. VI-2. Схематическое изображение многостадийного процесса с фиксированным набором состояний на каждой стадии.

Предположим, что существует N -стадийный процесс, на каждой стадии которого возможны n фиксированных состояний, и пусть из каждого состояния $(i-1)$ -й стадии процесса можно попасть в любое из n состояний следующей i -й стадии. На рис. VI-2 показано схематическое изображение двух стадий указанного процесса для случая $n = 3$.

Допустим, что результат перехода из p -го состояния $(i-1)$ -й стадии в q -е состояние i -й стадии оценивается величиной r_i , которая может считаться функцией целых чисел p и q , т. е.

$$r_i = r_i(p, q) = r_{p, q}^N \quad (\text{VI, 14})$$

Задача состоит в выборе такой последовательности решений на каждой стадии, т. е. последовательности чисел

$$q_i \quad i = 1, \dots, N \quad (\text{VI, 15})$$

характеризующих переход с $(i-1)$ -й стадии в определенное состояние следующей i -й стадии, чтобы суммарное значение результата

$$R_N = \sum_{i=1}^N r_i(q_{i-1}, q_i) \quad (\text{VI, 16})$$

имело максимальное значение.

Примем, что исходное состояние процесса задано. Тогда переход из него в любое из n возможных состояний 1-й стадии, очевидно, связан с возможностью выбора одного из n вариантов перехода. Число возможных вариантов перехода из исходного состояния на вторую стадию будет равно уже n^2 , и, наконец, для всего N -стадийного процесса число возможных вариантов перехода из исходного состояния на N -ю стадию составит n^N .

Не нужно быть искушенным в математике, чтобы понять, насколько велико может быть число n^N и как быстро оно возрастает с увеличением значений n и N . Например, для $n = 3$ и $N = 10$, т. е.

для процесса, включающего 10 стадий, на каждой из которых возможны 3 состояния, величина $n^N = 3^{10}$. Если оптимальное решение определяется методом прямого перебора всех возможных вариантов и для оценки каждого варианта требуется 1 сек, то для решения задачи с $n = 3$ и $N = 10$ нужно 3^{10} с ≈ 16 ч. Если же число стадий в процессе в 2 раза больше, т. е. $N = 20$, то время, необходимое для решения задачи этим методом, составит величину, примерно равную 960 тыс. ч (!). Очевидно, что даже при применении современной вычислительной машины среднего класса, которая может уменьшить время оценки одного варианта, предположим в 10 000 раз, требуемое время решения задачи (96 ч) все же останется довольно значительным.

Таким образом, метод прямого перебора в случае решения комбинаторных задач даже при использовании современных ЭВМ имеет весьма ограниченную область применения, поскольку возрастание числа вариантов, подлежащих проверке, при увеличении числа стадий и возможных на них состояний может очень быстро превысить возможности любой вычислительной машины.

Рассмотрим теперь, каким образом можно решить сформулированную выше комбинаторную задачу, используя метод динамического программирования. Как отмечалось выше, процедура решения задачи оптимизации при помощи принципа оптимальности начинается с оптимизации последней стадии процесса, результатом чего является набор оптимальных решений (управлений) на ней для любых возможных состояний входа этой стадии.

В данном случае оптимизация сводится к оценке возможных вариантов перехода из n состояний предыдущей $(N-1)$ -й стадии в n состояний последней N -й стадии. Таким образом, обследованию подлежат n^2 вариантов, что позволяет выделить n оптимальных управлений на этой стадии, соответствующих n состояниям предыдущей стадии и обеспечивающих переход на последнюю стадию с максимальными значениями результатов перехода $r_N(p, q)$. Указанные значения, естественно, зависят от состояния предыдущей стадии, откуда осуществляется переход.

На рис. VI-3 оптимальные переходы выделены сплошными линиями. Числа у стрелок, выражающих возможные переходы, характеризуют оценку перехода. В обозначениях (VI, 15) решение задачи оптимизации последней стадии процесса запишется в виде:

$$q_N^{(1)} = 3 \quad q_N^{(2)} = 1 \quad q_N^{(3)} = 3 \quad (\text{VI, 17})$$

причем величина q_i^j показывает, в какое состояние i -й стадии следует перейти из j -го состояния предыдущей стадии, чтобы получить максимальное значение результата перехода.

Подчеркнем еще раз, что управления, найденные на последней стадии, оптимальны для любой стратегии управления, которая принята на предыдущих стадиях процесса, поскольку обследованы

все возможные состояния входа N -й стадии [выхода $(N-1)$ -й стадии].

Теперь можно определить оптимальное управление на предпоследней стадии при любом состоянии выхода $(N-2)$ -й стадии. На рис. VI-4 при изображении последней стадии оставлены только оптимальные переходы, дающие максимальный результат.

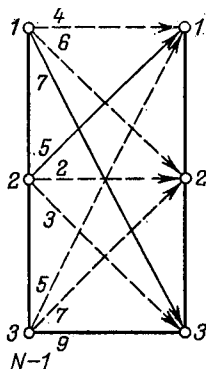


Рис. VI-3. Оптимальные переходы для последней стадии.

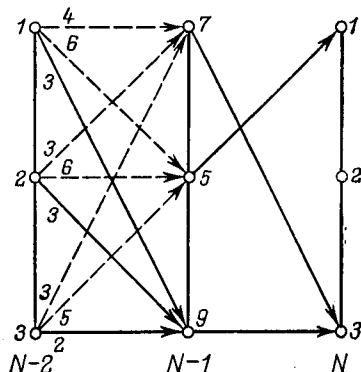


Рис. VI-4. Выбор оптимальных переходов для $(N-1)$ -й стадии.

Выбор оптимального управления на $(N-1)$ -й стадии должен производиться с учетом уже найденного оптимального управления для последней стадии. Он потребует обследования также n^2 вариантов перехода на $(N-1)$ -ю стадию, так как переходы на N -ю стадию уже определены единственным образом. На рис. VI-4 оптимальные переходы на $(N-1)$ -ю стадию показаны сплошными линиями. В обозначениях (VI, 15) можно записать:

$$q_{N-1}^{(1)} = 3 \quad q_{N-1}^{(2)} = 3 \quad q_{N-1}^{(3)} = 3 \quad (\text{VI, 18})$$

Интересно отметить, что найденные оптимальные переходы с учетом изолированной $(N-1)$ -й стадии совсем не оптимальны, так как в ее пределах существуют локальные переходы с большими значениями результатов.

Кроме того, оказывается, что конечное состояние на последней стадии уже определено однозначно, поскольку осталось только одно состояние (3) данной стадии, куда возможен переход с $(N-2)$ -й стадии с максимальным значением результата перехода, оцениваемым по двум последним стадиям.

После того как найдена оптимальная стратегия управления для двух последних стадий, можно перейти к выбору оптимального управления для $(N-2)$ -й стадии (рис. VI-5), на которой обследованию подлежат также n^2 вариантов перехода, и т. д.

Продолжая изложенную процедуру, можно прийти до совокупности состояний первой стадии процесса (рис. VI-6). Если исход-

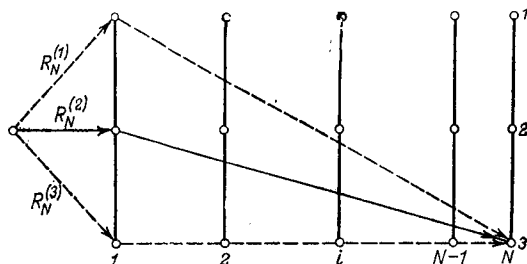


Рис. VI-6. Определение оптимального управления на всех стадиях.

ное состояние процесса зафиксировано, как изображено на рис. VI-6, то на этой стадии выбор управления сведется к оценке n возможных переходов, для каждого из которых найдено значение результата перехода в конечное состояние процесса R_N^j ($j = 1, \dots, n$). Выбор перехода для первой стадии, соответствующего максимальному значению $R_N^{(j)}$, определяет номер $j_{\text{опт}}$ варианта перехода из исходного состояния в конечное и, следовательно, оптимальные управления на всех стадиях, которые теперь можно найти при просмотре маршрута с номером $j_{\text{опт}}$ от первой стадии до последней. На рис. VI-6 показан оптимальный переход при $j = 2$.

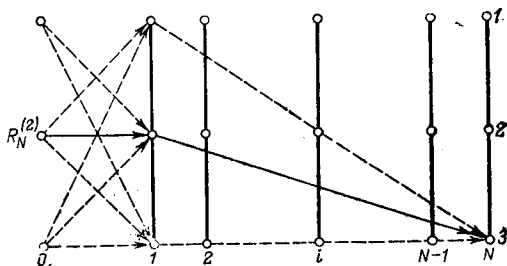


Рис. VI-7. Выбор оптимального исходного состояния процесса.

Если же исходное состояние не определено и может быть выбрано из совокупности n исходных состояний, то на первой стадии также необходимо исследовать n^2 вариантов перехода (рис. VI-7), в результате чего можно найти одно (или несколько) исходное состояние, отвечающее максимальному значению результата для многостадийного процесса в целом.

Таким образом, сформулированная выше комбинаторная задача решена до конца. В процессе решения потребовалось исследовать всего Nn^2 вариантов, тогда как при применении метода прямого поиска путем перебора нужно оценить n^N различных

вариантов. Время решения комбинаторной задачи с $n = 3$ и $N = 20$ при оценке одного варианта за 1 с с использованием принципа оптимальности будет равно $20 \cdot 3^2 = 180$ с = 3 мин, что в сравнении с 3^{20} с ≈ 960 тыс. ч, необходимыми для решения задачи прямым перебором, позволяет весьма ощутимо представить преимущества динамического программирования при решении подобных задач.

Математическая формулировка принципа оптимальности для дискретных процессов

При применении любой стратегии управления многостадийным процессом (не обязательно оптимальной) величина критерия оптимальности R_N , определяемого выражением

$$R_N = \sum_{i=1}^N r_i(x^{(i-1)}, u^{(i)}) \quad (\text{VI}, 19)$$

зависит только от состояния входа первой стадии $x^{(0)}$, т. е.

$$R_N = R_N(x^{(0)}) \quad (\text{VI}, 20)$$

Критерий оптимальности R_{N-1} , определенный также для $N - 1$ последних стадий N -стадийного процесса выражением (VI, 12), может рассматриваться как функция состояния выхода первой стадии $x^{(1)}$:

$$R_{N-1} = R_{N-1}(x^{(1)}) \quad (\text{VI}, 21)$$

Предположим в дальнейшем, что задача оптимизации состоит в нахождении оптимальной стратегии управления

$$\tilde{u}_{N_{\text{опт}}} = (u_{\text{опт}}^{(1)}, u_{\text{опт}}^{(2)}, \dots, u_{\text{опт}}^{(N)}) \quad (\text{VI}, 22)$$

максимизирующей величину R_N .

Обозначим через f_N максимальное значение критерия R_N , которое можно получить при использовании оптимальной стратегии управления $u_{N, \text{опт}}$. Очевидно, что значение f_N также зависит от состояния входа первой стадии $x^{(0)}$ и может быть определено как

$$f_N(x^{(0)}) = \max R_N(x^{(0)}) \quad (\text{VI}, 23)$$

$$u^{(i)} \in U$$

$$i = 1, \dots, N$$

где максимизация проводится по всем возможным управлениям, принадлежащим области допустимых значений U , на всех стадиях процесса.

Соотношение (VI, 23) по существу является математической формулировкой задачи оптимизации N -стадийного процесса и еще не содержит указаний, как именно нужно максимизировать критерий R_N , чтобы получить оптимальную стратегию (VI, 22).

Воспользуемся теперь тем, что критерий оптимальности N -стадийного процесса R_N — аддитивная функция критериев оптимальности отдельных стадий, и представим его в виде:

$$R_N(x^{(0)}) = r_1(x^{(0)}, u^{(1)}) + R_{N-1}(x^{(1)}) \quad (\text{VI}, 24)$$

Подставляя выражение (VI, 24) в соотношение (VI, 23), можно записать:

$$f_N(x^{(0)}) = \max_{\substack{u^i \in U \\ i=1, \dots, N}} [r_1(x^{(0)}, u^{(1)}) + R_{N-1}(x^{(1)})] \quad (\text{VI}, 25)$$

Соотношение (VI, 25) может быть также выражено как

$$f_N(x^{(0)}) = \max_{u^{(1)} \in U} [r_1(x^{(0)}, u^{(1)}) + \max_{\substack{u^{(i)} \in U \\ i=2, \dots, N}} R_{N-1}(x^{(1)})] \quad (\text{VI}, 26)$$

где максимизация первого слагаемого $r_1(x^{(0)}, u^{(1)})$ проводится только по управлению $u^{(1)}$, а второе слагаемое максимизируется выбором управлений на всех стадиях $u^{(i)}$ ($i = 1, \dots, N$), поскольку значение $x^{(1)}$ зависит от управления $u^{(1)}$.

Разумеется, что в выражении, заключенном в квадратные скобки, каждое слагаемое нельзя максимизировать в отдельности, вследствие того, что величины обоих слагаемых зависят от управления $u^{(1)}$. Причем на первое слагаемое управление $u^{(1)}$ влияет прямо, тогда как на второе это влияние сказывается косвенно через изменение значения $x^{(1)}$.

Рассмотрим задачу максимизации второго слагаемого в соотношении (VI, 26):

$$\max_{\substack{u^{(i)} \in U \\ i=2, \dots, N}} R_{N-1}(x^{(1)}) \quad (\text{VI}, 27)$$

которая может интерпретироваться как задача оптимизации для $(N-1)$ -стадийного процесса с критерием оптимальности $R_{N-1}(x^{(1)})$, максимизируемым выбором управлений $u^{(i)}$ ($i = 2, \dots, N$).

Принимая во внимание, что оптимальная стратегия управления

$$\tilde{u}_{N-1, \text{ опт}} = (u_{\text{опт}}^{(2)}, u_{\text{опт}}^{(3)}, \dots, u_{\text{опт}}^{(N)}) \quad (\text{VI}, 28)$$

максимизирует значение критерия оптимальности R_{N-1} , найденного для $N-1$ последних стадий, можно записать соотношение, которое аналогично выражению (VI, 23):

$$f_{N-1}(x^{(1)}) = \max_{\substack{u^{(i)} \in U \\ i=2, \dots, N}} R_{N-1}(x^{(1)}) \quad (\text{VI}, 29)$$

причем через $f_{N-1}(x^{(1)})$ обозначено максимальное значение критерия оптимальности R_{N-1} при использовании оптимальной стратегии управления (VI, 28).

С учетом соотношения (VI, 29) выражение (VI, 26) может быть представлено в виде:

$$f_N x^{(0)} = \max_{u^{(1)} \in U} [r_1(x^{(0)}, u^{(1)}) + f_{N-1}(x^{(1)})] \quad (\text{VI, 30})$$

Воспользовавшись математическим описанием 1-й стадии

$$x^{(1)} = \varphi^{(1)}(x^{(0)}, u^{(1)}) \quad (\text{VI, 31})$$

можно записать:

$$f_{N-1}(x^{(1)}) = f_{N-1}[\varphi^{(1)}(x^{(0)}, u^{(1)})] \quad (\text{VI, 32})$$

Подставляя теперь полученное выражение (VI, 32) вместо второго слагаемого в соотношение (VI, 26), находим:

$$f_N(x^{(0)}) = \max_{u^{(1)} \in U} \{r_1(x^{(0)}, u^{(1)}) + f_{N-1}[\varphi^{(1)}(x^{(0)}, u^{(1)})]\} \quad (\text{VI, 33})$$

Уравнение (VI, 33) является *математической формулировкой принципа оптимальности*. Оно позволяет, зная оптимальную стратегию управления (VI, 28) для $N-1$ последних стадий процесса и зависимость максимального значения критерия R_{N-1} от состояния выхода первой стадии $f_{N-1}(x^{(1)})$, определить оптимальное управление на первой стадии $u_{\text{опт}}^{(1)}$.

Выражение (VI, 33) по существу представляет собой рекуррентное соотношение, характеризующее последовательность функций

$$f_i(x^{(N-i)}) \quad i = 1, \dots, N \quad (\text{VI, 34})$$

последняя из которых $f_N(x^{(0)})$ отвечает искомому решению оптимальной задачи, поскольку по уравнению (VI, 23) значение $f_N(x^{(0)})$ равно максимальному значению критерия оптимальности $R_N(x^{(0)})$. При этом в процессе нахождения функций $f_i(x^{(N-i)})$ определяется также оптимальная стратегия управления $u_{N, \text{опт}}$ (VI, 22).

Очевидно, что для начала расчетов по полученному рекуррентному соотношению (VI, 33) необходимо задаться начальной функцией, порождающей последовательность функций (VI, 34). В качестве такой начальной функции можно принять

$$f_0(x_N) = 0 \quad (\text{VI, 35})$$

что естественным образом соответствует отсутствию процесса за пределами последней стадии.

Вычислительные аспекты динамического программирования

Общая процедура решения задачи методом динамического программирования. Проиллюстрируем процедуру решения задачи оптимизации многостадийного процесса на примере процесса, в котором размерность векторов состояния $x^{(i)}$ и управления $u^{(i)}$ на каждой стадии равна единице. Это позволяет повысить

наглядность проводимых рассуждений при помощи графических построений.

Согласно общему подходу к решению задачи, методом динамического программирования определение оптимальных управлений начинается с последней стадии процесса. Рекуррентное соотношение (VI, 33), записанное для последней стадии с учетом условия (VI, 35), имеет вид:

$$f_1(x^{(N-1)}) = \max_{u^{(N)} \in U} r_N(x^{(N-1)}, u^{(N)}) \quad (\text{VI, 36a})$$

Порядок нахождения оптимального управления для двух возможных значений переменной $x^{(N-1)}$, определяющей состояние входа

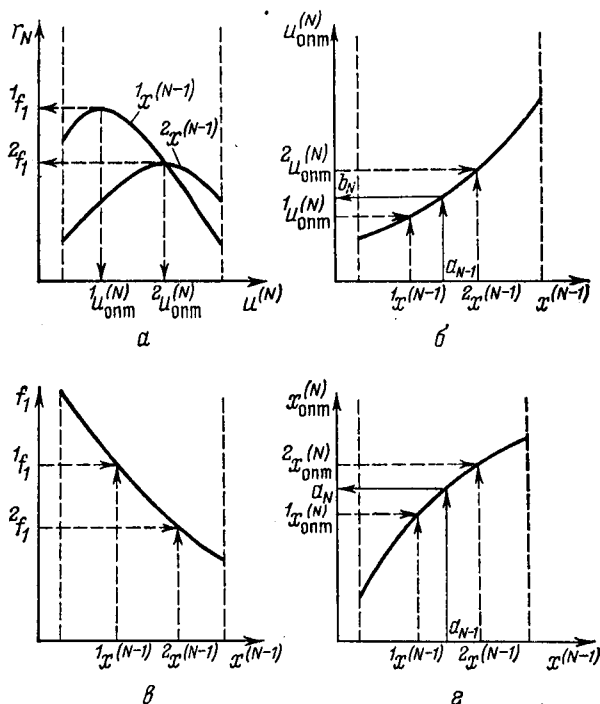


Рис. VI-8. Соотношения, получаемые при оптимизации N -й стадии.

N -й стадии [состояние выхода $(N-1)$ -й стадии], приведен на рис. VI-8, а. Верхние индексы слева у переменных $j u^{(N)}$, $j f_1$ и $j x^{(N)}$ указывают порядковый номер j значения переменной, для которого выполняется построение. Ход построения искомых зависимостей показан пунктирными стрелками.

Зависимость $r_N(x^{(N-1)}, u^{(N)})$, построенная для достаточно большого числа значений переменной $j x^{(N-1)}$ (рис. VI-8, а), дает возможность найти зависимость оптимального управления на последней

стадии $u_{\text{опт}}^{(N)}$ от состояния входа $x^{(N-1)}$ этой стадии, которая изображена на рис. VI-8, б. Одновременно определяется также зависимость максимального значения критерия оптимальности последней стадии f_1 от состояния ее входа $x^{(N-1)}$ (рис. VI-8, в).

Таким образом, с помощью соотношения (VI, 36а) можно получить зависимости:

$$u_{\text{опт}}^{(N)} = u^{(N)}(x^{(N-1)}) \quad (\text{VI, 36б})$$

$$f_1 = f_1(x^{(N-1)}) \quad (\text{VI, 36в})$$

Кроме того, используя математическое описание последней стадии, можно также найти зависимость выхода данной стадии $x^{(N)}$ от входа $x^{(N-1)}$ при оптимальном управлении (рис. VI-8, г):

$$x_{\text{опт}}^{(N)} = \varphi^{(N)}[x^{(N-1)}, u^{(N)}(x^{(N-1)})] = x^{(N)}(x^{(N-1)}) \quad (\text{VI, 36г})$$

Для определения оптимального управления $u^{(N-1)}$ на $(N-1)$ -й стадии из всех полученных выше результатов оптимизации последней стадии необходима только зависимость $f_1(x^{(N-1)})$ (VI, 36в), с учетом которой рекуррентное соотношение (VI, 33) может быть представлено для $(N-1)$ -й стадии как

$$f_2(x^{(N-2)}) = \max_{u^{(N-1)} \in U} \{r_{N-1}(x^{(N-2)}, u^{(N-1)}) + f_1[\varphi^{(N-1)}(x^{(N-2)}, u^{(N-1)})]\} \quad (\text{VI, 37а})$$

На рис. VI-9, а показана зависимость выражения, заключенного в фигурные скобки в соотношении (VI, 37а), от управления $u^{(N-1)}$ на $(N-1)$ -й стадии для двух значений $^1x^{(N-2)}$ и $^2x^{(N-2)}$ состояния входа этой стадии $x^{(N-2)}$. В результате отыскания максимального значения выражения $r_{N-1} + f_1$ можно найти зависимости

$$u_{\text{опт}}^{N-1} = u^{(N-1)}(x^{(N-2)}) \quad (\text{VI, 37б})$$

$$f_2 = f_2(x^{(N-2)}) \quad (\text{VI, 37в})$$

которые приведены на рис. VI-9, б и VI-9, в.

Помимо этого, применяя математическое описание $(N-1)$ -й стадии, можно получить зависимость

$$x_{\text{опт}}^{(N-1)} = x^{(N-1)}(x^{(N-2)}) \quad (\text{VI, 37г})$$

показанную на рис. VI-9, г.

Теперь уже появляется возможность записать рекуррентное соотношение (VI, 33) для $(N-2)$ -й стадии, поскольку зависимость $f_2(x^{(N-2)})$ известна:

$$f_3(x^{(N-3)}) = \max_{u^{(N-2)} \in U} \{r_{N-2}(x^{(N-3)}, u^{(N-2)}) + f_2[\varphi^{(N-2)}(x^{(N-3)}, u^{(N-2)})]\} \quad (\text{VI, 38а})$$

Проводя вычисления, аналогичные рассмотренным выше, находим:

$$u_{\text{опт}}^{(N-2)} = u^{(N-2)}(x^{(N-3)}) \quad (\text{VI, 38б})$$

$$f_3 = f_3(x^{(N-3)}) \quad (\text{VI, 38в})$$

$$x_{\text{опт}}^{(N-2)} = x^{(N-2)}(x^{(N-3)}) \quad (\text{VI, 38г})$$

Порядок определения соотношений (VI, 38б) — (VI, 38г) приведен на рис. VI-10.

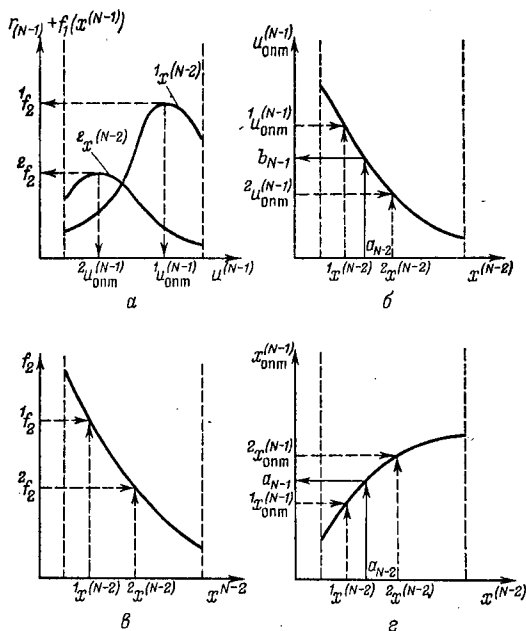


Рис. VI-9. Соотношения, получаемые при выборе оптимального управления на $(N-1)$ -й стадии.

Продолжая рассмотренный процесс вычислений для всех остальных стадий, можно дойти до первой стадии, на которой также будут получены соотношения

$$u_{\text{опт}}^{(1)} = u^{(1)}(x^{(0)}) \quad (\text{VI, 39б})$$

$$f_N = f_N(x^{(0)}) \quad (\text{VI, 39в})$$

$$x_{\text{опт}}^{(1)} = x^{(1)}(x^{(0)}) \quad (\text{VI, 39г})$$

возможный вид кривых для которых показан на рис. VI-11.

На этом первый этап решения задачи оптимизации многостадийного процесса заканчивается. Выведенные соотношения (VI, 39б) и (VI, 39г), (VI, 38б) и (VI, 38г), (VI, 37б) и (VI, 37г),

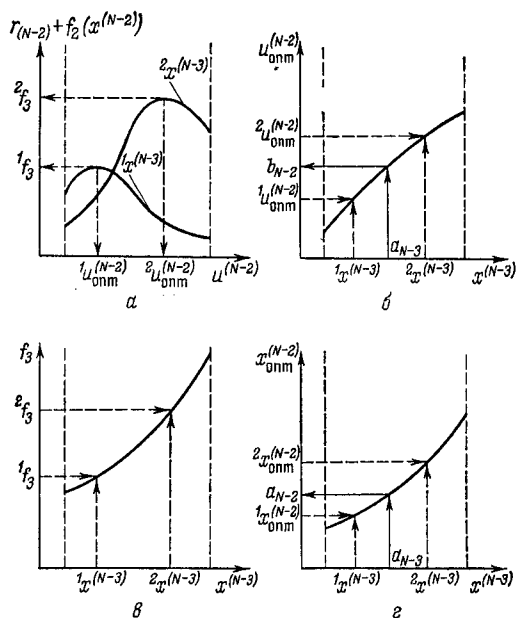


Рис. VI-10. Соотношения, получаемые при выборе оптимального управления на $(N-2)$ -й стадии.

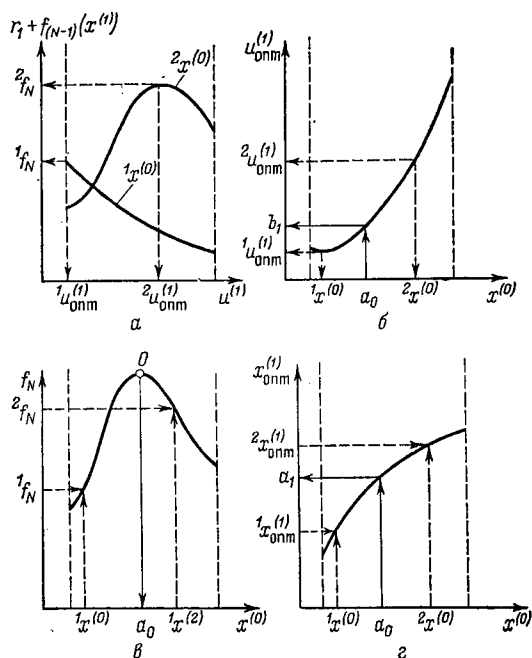


Рис. VI-11. Выбор оптимального состояния входа первой стадии.

(VI, 36б) и (VI, 36г) уже определяют оптимальную стратегию управления N -стадийным процессом для любого возможного состояния входа первой стадии.

На втором этапе решения оптимальной задачи находятся оптимальные управления всех стадий $u^{(i)}$ ($i = 1, \dots, N$), для чего необходимо принять соответствующее значение состояния входа процесса $x^{(0)}$. При этом, если значение $x^{(0)}$ не задано в исходной постановке оптимальной задачи, его можно также определить оптимальным образом из условия максимума величины f_N как функции значения $x^{(0)}$ (VI, 39в).

На рис. VI-11, в приведен случай, когда зависимость имеет максимум, что позволяет найти оптимальное значение состояния входа процесса:

$$x^{(0)} = a_0 \quad (\text{VI, 40})$$

Зависимость $f_N(x^{(0)})$ не обязательно должна иметь экстремальные точки. Максимальное значение f_N может достигаться и на границе допустимой области изменения переменной $x^{(0)}$. Однако при условии свободы выбора значение $x^{(0)}$ всегда можно принять таким, чтобы величина f_N была максимальной.

Когда значение состояния входа процесса определено (VI, 40), т. е. либо задано, либо найдено из условия максимума функции $f_N(x^{(0)})$, можно приступить к нахождению оптимальных управлений для всех стадий процесса, соответствующих выбранной величине $x^{(0)} = a_0$. Процедура определения оптимальных управлений для всех стадий и является вторым, заключительным, этапом решения оптимальной задачи методом динамического программирования.

Порядок расчета оптимальных управлений при этом следующий. По соотношению (VI, 39б) (рис. VI-11, б) находится оптимальное управление на первой стадии процесса $u_{\text{опт}}^{(1)} = b_1$, а по соотношению (VI, 39г) (рис. VI-11, г) рассчитывается значение состояния выхода первой стадии $x_{\text{опт}}^{(1)} = a_1$, отвечающее этому оптимальному управлению.

После того как определено состояние выхода первой стадии $x^{(1)}$, можно найти оптимальное управление $u_{\text{опт}}^{(2)} = b_2$ и состояние выхода $x_{\text{опт}}^{(2)} = a_2$ для второй стадии и т. д. до тех пор, пока не будут определены оптимальные управления для всех стадий процесса. Порядок нахождения оптимальных управлений для $x^{(0)} = a_0$ показан на рис. VI-8, б — VI-11, б и рис. VI-8, г — VI-11, г.

Если по каким-либо причинам состояние входа процесса изменилось, то с помощью полученных выше соотношений нетрудно найти новую совокупность оптимальных управлений для всех стадий процесса, воспользовавшись только вычислениями второго этапа решения задачи оптимизации. В этом смысле стратегия оптимального управления, определяемая соотношениями (VI, 36б) — (VI, 39б) и (VI, 36г) — (VI, 39г), дает решение

оптимальной задачи, которое по свойствам близко к аналитическому решению, поскольку оптимальное управление процессом для любого возможного состояния входа процесса $x^{(0)}$ может быть рассчитано по указанным соотношениям без решения каких-либо уравнений. Заметим, что данную стратегию управления можно найти и для процесса, математическое описание которого на каждой стадии имеет достаточно сложный вид, не допускающий возможности получения решения оптимальной задачи в аналитической форме.

Оптимальная стратегия управления многостадийным процессом с помощью приведенных выше соотношений может быть представлена и в еще более удобной форме, когда зависимость оптимального управления от состояния входа процесса $x^{(0)}$ выражается

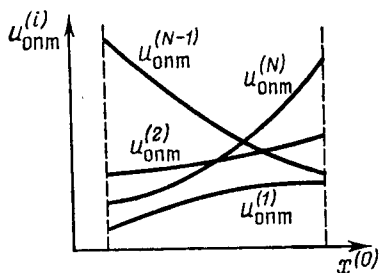


Рис. VI-12. Представление оптимальной стратегии управления многостадийным процессом в зависимости от состояния на его входе.

не через последовательность соотношений (VI, 366) — (VI, 396), а непосредственно, как показано на рис. VI-12, в виде:

$$u_{\text{опт}}^{(i)} = u^{(i)}(x^{(0)}) \quad i = 1, \dots, N \quad (\text{VI, 41})$$

Соотношения (VI, 41) можно использовать для оперативного управления многостадийным процессом, так как они позволяют предсказать значения оптимальных управлений по всем стадиям для любого состояния входа $x^{(0)}$.

Проблема размерности. Таким образом, метод динамического программирования дает возможность при оптимизации многостадийных процессов расчленив задачу выбора оптимальных управлений $u^{(i)}$ ($i = 1, \dots, N$) на N задач, в каждой из которых выбирается только одно управление $u^{(i)}$.

Выше уже была рассмотрена вычислительная процедура метода динамического программирования при оптимизации процесса, в котором размерность векторов состояния $x^{(i)}$ и управления $u^{(i)}$ на каждой стадии равна 1. Очевидно, что решение задачи может усложниться, если размерность вектора состояния m или векторов управления r отлична от 1.

Рассмотрим, например, случай, когда размерность векторов состояния по прежнему равна 1 ($m = 1$), а размерность векторов управления — 2 ($r = 2$). Ограничимся описанием процедуры определения оптимального управления только для одной стадии процесса, например последней.

Для N -й стадии процесса рекуррентное соотношение (VI, 33) в случае, когда размерность вектора управления равна 2, может быть записано так

$$f_1(x^{(N-1)}) = \max_{u_1^{(N)}, u_2^{(N)} \in U} r_N(x^{(N-1)}, u_1^{(N)}, u_2^{(N)}) \quad (\text{VI, 42a})$$

Величина r_N при этом принимается как функция двух переменных $u_1^{(N)}$ и $u_2^{(N)}$, оптимальные значения которых должны быть определены для различных состояний входа $x^{(N-1)}$. Таким образом,

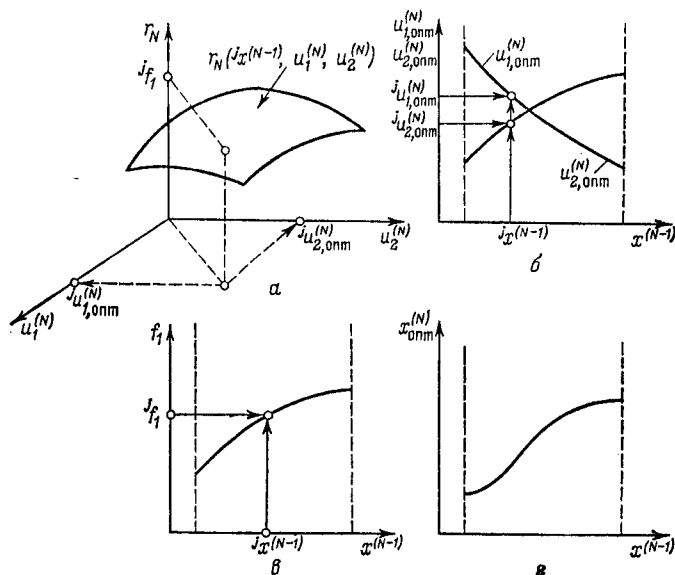


Рис. VI-13. Определение оптимального управления на N -й стадии для $m=1$ и $n=2$.

для каждого значения $x^{(N-1)}$ необходимо искать максимум функции двух переменных (рис. VI-13, а), что позволяет найти две зависимости

$$\begin{aligned} u_{1 \text{ опт}}^{(N)} &= u_1^N(x^{(N-1)}) \\ u_{2 \text{ опт}}^{(N)} &= u_2^N(x^{(N-1)}) \end{aligned} \quad (\text{VI, 42б})$$

определяющие оптимальные значения управляющих воздействий $u_1^{(N)}$ и $u_2^{(N)}$ на последней стадии процесса как функции состояния входа этой стадии $x^{(N-1)}$ (рис. VI-13, б).

Одновременно находится зависимость

$$f_1 = f_1(x^{(N-1)}) \quad (\text{VI, 42в})$$

показанная на рис. VI-13, в, и зависимость

$$x_{\text{опт}}^N = x^{(N)}(x^{(N-1)}) \quad (\text{VI, 42г})$$

приведенная на рис. VI-13, з.

Итак, отличие этого варианта ($m = 1$; $r = 2$) от случая, когда размерности векторов состояния $x^{(i)}$ и управления равны 1 ($m = 1$; $r = 1$), состоит в том, что при определении оптимальных значений управляющих воздействий $u_1^{(i)}$ и $u_2^{(i)}$ на каждой стадии процесса приходится искать максимум функции двух переменных. В результате вместо одного соотношения ($m = 1$; $r = 1$)

$$u_{\text{опт}}^{(N)} = u^{(N)}(x^{(N-1)}) \quad (\text{VI, 43})$$

получаются два (VI, 42б).

Решение задач оптимизации методом динамического программирования обычно проводится на цифровых вычислительных машинах и результаты всех промежуточных вычислений для первого этапа решения задачи обычно хранятся в памяти машины в форме таблиц, соответствующих соотношениям:—

$$u_{\text{опт}}^{(i)} = u^{(i)}(x^{(i-1)}) \quad i = 1, \dots, N \quad (\text{VI, 44})$$

$$x_{\text{опт}}^{(i)} = x^{(i)}(x^{(i-1)}) \quad i = 1, \dots, N \quad (\text{VI, 45})$$

Если каждое из соотношений (VI, 44) и (VI, 45) хранится для случая $m = 1$ и $r = 1$ в виде таблиц значений величин $u_{\text{опт}}^{(i)}$ и $x_{\text{опт}}^{(i)}$ для n значений переменной $x^{(i-1)}$, то общий объем памяти вычислительной машины, требуемый для хранения промежуточных результатов, составляет $2Nn$ ячеек памяти.

Однако, как показано выше, в случае когда $m = 1$, а r отлично от 1, нужно хранить в памяти машины уже r соотношений, определяющих зависимость управляющих воздействий на стадии от состояния ее входа. Таким образом, необходимый объем памяти машины, используемый для хранения промежуточных результатов, составит уже $N(r+1)n$ ячеек памяти.

Рассмотрим теперь вариант, когда размерность вектора управления равна 1 ($r = 1$), а размерность вектора состояния отличается от 1, например $m = 2$.

Рекуррентное соотношение (VI, 33) для последней стадии процесса теперь записывается как

$$f_1(x_1^{(N-1)}, x_2^{(N-1)}) = \max_{u^{(N)} \in U} \{r_N(x_1^{(N-1)}, x_2^{(N-1)}, u^{(N)})\} \quad (\text{VI, 46a})$$

и оптимальное управление $u^{(N)}$ выбирается для всех возможных значений переменных $x_1^{(N-1)}$ и $x_2^{(N-1)}$, характеризующих состояние входа (рис. VI-14, а). Результатом является зависимость

$$u_{\text{опт}}^{(N)} = u^{(N)}(x_1^{(N-1)}, x_2^{(N-1)}) \quad (\text{VI, 46б})$$

изображенная на рис. VI-14, б, а также соотношения:

$$f_1 = f_1(x_1^{(N-1)}, x_2^{(N-1)}) \quad (\text{VI, 46в})$$

и

$$x_{1, \text{опт}}^{(N)} = x_1^{(N)}(x_1^{(N-1)}, x_2^{(N-1)})$$

$$x_{2, \text{опт}}^{(N)} = x_2^{(N)}(x_1^{(N-1)}, x_2^{(N-1)}) \quad (\text{VI, 46г})$$

Таким образом, в отличие от рассмотренных выше случаев здесь уже нужно хранить в памяти машины таблицы для функций m переменных $x_k^{(i)}$, определяемых соотношениями (VI, 46б) и (VI, 46г). Поскольку для запоминания значений функции с n значениями по каждой из m независимых переменных необходимо n^m ячеек памяти, общий объем памяти машины, требуемый для

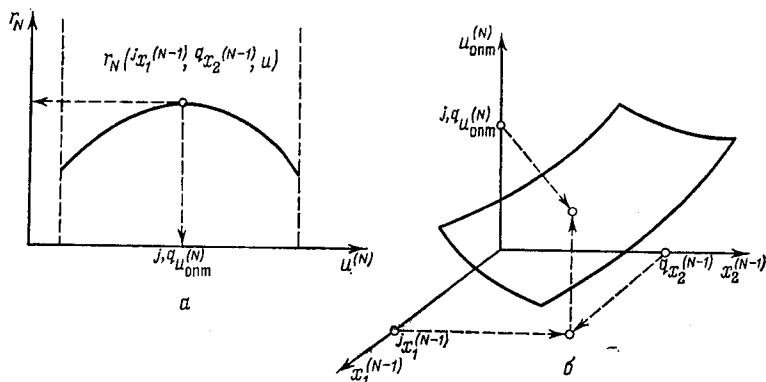


Рис. VI-14. Определение оптимального управления на N -стадии для $m = 2$ и $n = 1$.

хранения результатов первого этапа применения метода динамического программирования, составит $N(m+1)n^m$ ячеек.

Правда, соотношения типа (VI, 45), описывающие выход каждой стадии в зависимости от входа при оптимальном управлении на стадии, могут не храниться в памяти машины на первом этапе оптимизации, а последовательно определяться при расчете оптимальных управлений на стадиях уже на втором этапе решения оптимальной задачи. Однако и при такой организации хранения промежуточных результатов в памяти машины необходимый объем запоминающих устройств для решения задачи оптимизации N -стадийного процесса будет:

$$Nn \text{ ячеек для } m = 1 \quad r = 1 \quad (\text{VI, 47а})$$

$$Nrn \text{ ячеек для } m = 1 \quad r > 1 \quad (\text{VI, 47б})$$

$$Nn^m \text{ ячеек для } m > 1 \quad r = 1 \quad (\text{VI, 47в})$$

$$Nrn^m \text{ ячеек для } m > 1 \quad r > 1 \quad (\text{VI, 47г})$$

Оценки требуемого объема памяти вычислительной машины (VI, 47), разумеется, приведены без учета объема памяти,

необходимого для хранения промежуточных результатов при переходе от одной стадии к другой, т. е. памяти, нужной для хранения зависимости

$$f_i = f_i(x^{(i-1)}) \quad (\text{VI}, 48)$$

а также памяти, необходимой для размещения программы вычислений.

Из оценок (VI, 47) следует, что наиболее сильно требуемый объем памяти машины увеличивается с возрастанием размерности вектора состояний процесса m , т. е. при увеличении числа параметров $x_k^{(i)}$, определяющих состояние каждой его стадии.

Однако указанное препятствие на пути использования метода динамического программирования не столь существенно, если число mn^m не слишком велико, так как в случае решения практических задач можно при отсутствии у вычислительной машины запоминающих устройств достаточно большого объема ограничиться решением на ней только первого этапа задачи оптимизации. При этом соотношения (VI, 44) и (VI, 45) могут выводиться из памяти машины в виде таблиц по мере их получения, а окончательные значения управляющих воздействий можно найти ручным счетом второго этапа или на той же машине, в которую данные таблицы снова вводятся в обратной последовательности.

Гораздо более серьезные затруднения при применении метода динамического программирования в случае оптимизации многостадийных процессов, для которых размерности векторов состояния $x^{(i)}$ и управления $u^{(i)}$ велики, возникают из-за сложности отыскания оптимальных управлений на каждой стадии.

Для примера рассмотрим особенно часто используемый в динамическом программировании *метод поиска максимального значения функции на сетке переменных*. Сущность этого метода для функции одной переменной заключается в том, что значения функции $x(t)$ рассчитываются для n равноотстоящих значений независимой переменной t в интервале ее изменения $t^{(0)} \leq t \leq t^{(k)}$. Значение $t^{(j)}$, при котором величина $x(t^{(j)})$ оказывается наибольшей среди всех вычисленных значений $x(t^{(q)})$, принимается как положение максимума.

Очевидно, что при применении такого метода погрешность в определении положения максимума уменьшается с возрастанием n , однако необходимый объем вычислений из-за этого увеличивается пропорционально n .

Если отыскивается экстремум функции двух переменных $x(t_1, t_2)$ в области изменения переменных, характеризуемой неравенствами

$$t_1^{(0)} \leq t_1 \leq t_1^{(k)} \quad t_2^{(0)} \leq t_2 \leq t_2^{(k)} \quad (\text{VI}, 49)$$

то при разбиении интервала изменения каждой переменной на n частей нужно вычислить значения функции $x(t_1, t_2)$ во всех узлах сетки переменных (рис. VI-15), число которых уже равно n^2 .

Соответственно, при отыскании экстремума функции m переменных необходимо рассчитать значения функции $x(t_1, \dots, t_m)$ в n^m узлах сетки переменных t_k .

Таким образом, оказывается, что при оптимизации N -стадийного процесса, у которого размерности векторов состояния стадий и управлений на стадиях равны 1, всего требуется вычислить n^2 значений оптимизируемой функции на каждой стадии, так как для определения вида соотношения (VI,44) в данном случае нужно n раз осуществить поиск оптимального управления для n различных значений состояния входа стадии $x^{(i-1)}$.

Рассмотрим теперь вариант, когда размерность вектора состояния по-прежнему равна 1, а размерность вектора управления больше 1 ($m = 1$ и $r = 2$, см. рис. VI-13). При этом, в случае отыскания максимума выражения $r_N(x^{(N-1)}, u_1^{(N)}, u_2^{(N)})$ (см. рис. VI-13, а)

для n различных значений переменной $x^{(N-1)}$ необходимо n раз осуществить поиск максимума на сетке переменных $u_i^{(N)}$, имеющей n^r узлов. Другими словами, на каждой стадии нужно $nn^r = n^{r+1}$ раз вычислить значение указанного выражения.

Если размерность вектора управления $r = 1$, а размерность вектора состояния m отличается от 1 ($m = 2$ и $r = 1$, см. рис. VI-14), то для отыскания максимума выражения $r_N(x_1^{(N-1)}, x_2^{(N-1)}, u^{(N)})$ необходимо n^m раз выполнить поиск максимума для функции одной переменной, в связи с чем потребуется рассчитать $nn^m = n^{m+1}$ значений этого выражения.

Нетрудно показать, что в общем случае произвольных значений m и r для решения задачи максимизации на одной стадии требуется провести $n^{(r+m)}$ вычислений выражения, стоящего в правой части рекуррентного соотношения (VI, 33).

Общий же объем расчетов для всех приведенных случаев при оптимизации N -стадийного процесса составит:

$$Nn^2 \quad \text{для} \quad m = 1 \quad r = 1 \quad (\text{VI, 50a})$$

$$Nn^{r+1} \quad \text{для} \quad m = 1 \quad r > 1 \quad (\text{VI, 50б})$$

$$Nn^{m+1} \quad \text{для} \quad m > 1 \quad r = 1 \quad (\text{VI, 50в})$$

$$Nn^{m+r} \quad \text{для} \quad m > 1 \quad r > 1 \quad (\text{VI, 50г})$$

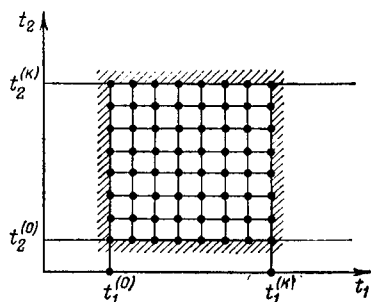


Рис. VI-15. Поиск оптимума на сетке переменных.

Таким образом, видно, что с увеличением размерности векторов состояния m и управления r возрастают необходимые объем памяти вычислительной машины и время решения задачи, которое,

естественно, пропорционально Nn^{m+r} . Если с увеличением требуемого объема запоминающих устройств еще можно как-то мириться (конечно, когда промежуточные результаты, необходимые для перехода от одной стадии к другой, удастся разместить в памяти машины), то экспоненциальное возрастание объема вычислений при увеличении размерности $m+r$ оптимизируемого процесса представляет собой весьма серьезную проблему, на благоприятное решение которой нельзя надеяться даже при возрастании быстродействия вычислительных машин.

Разумеется, что вместо столь расточительного метода поиска (в смысле необходимого объема вычислений) на сетке переменных можно использовать и более эффективные методы (см. главу IX). Однако и в этом случае задача оптимизации процессов высокой размерности остается весьма сложной, хотя бы в отношении требуемого объема памяти для хранения промежуточных результатов на каждой стадии расчета, которая увеличивается пропорционально n^m .

Эти затруднения при применении динамического программирования для оптимизации процессов высокой размерности создатель метода Р. Беллман образно назвал «проклятием размерности».

Поэтому при формулировке задач оптимизации в терминах динамического программирования всегда следует стремиться к тому, чтобы размерность стадии оптимизируемого процесса была по возможности невысокой, так как современные вычислительные машины допускают решение указанным методом задач, размерность которых не превышает 4—5.

Множители Лагранжа в динамическом программировании. Неопределенные множители Лагранжа используются в классическом анализе и в вариационном исчислении при решении задач, на переменные которых наложены ограничения типа равенств. С неменьшим успехом эти множители можно применять и в динамическом программировании, где при их помощи удастся снизить размерность оптимальной задачи.

Для примера рассмотрим многостадийный процесс, в котором размерности векторов состояния и управления на каждой стадии равны 1. Предположим, что критерий оптимальности процесса аддитивен и задан выражением (VI,9). Пусть на управляющие переменные процесса $u^{(i)}$ наложено ограничение вида:

$$\sum_{i=1}^N u^{(i)} - U = 0 \quad u^{(i)} \geq 0 \quad i = 1, \dots, N \quad (\text{VI}, 51)$$

Естественно, что при наличии ограничения (VI,51) максимальное значение критерия оптимальности f_N зависит не только от состояния входа процесса $x^{(0)}$, но также и от величины U , т. е.

$$f_N = f_N(x^{(0)}, U) \quad (\text{VI}, 52)$$

Таким образом, рекуррентное соотношение (VI, 33) может быть представлено в форме

$$f_N(x^{(0)}, U) = \max_{u^{(1)}} \{r_1(x^{(0)}, u^{(1)}) + f_{N-1}[\Phi^{(1)}(x^{(0)}, u^{(1)}), U - u^{(1)}]\} \quad (\text{VI, 53})$$

где максимизация производится по всем значениям управляющего воздействия $u^{(1)}$, которые удовлетворяют неравенству:

$$0 \leq u^{(1)} \leq U \quad (\text{VI, 54})$$

Следовательно, при переходе от стадии к стадии на первом этапе решения задачи методом динамического программирования необходимо вычислять и запоминать функцию двух переменных

$$f_{N-l+1} = f_{N-l+1}(x^{(l-1)}, U^*) \quad (\text{VI, 55})$$

которая определена в области изменения переменной U^* , заданной неравенством:

$$0 \leq U^* \leq U \quad (\text{VI, 56})$$

Другими словами, размерность решаемой задачи при введении ограничения (VI, 51) увеличивается на единицу со всеми вытекающими отсюда последствиями.

Применение множителей Лагранжа позволяет снова свести задачу к исходной размерности оптимизируемого процесса. С этой целью сформируем новое выражение для критерия оптимальности каждой стадии

$$r_i^* = r_i(x^{(i-1)}, u^{(i)}) - \lambda u^{(i)} \quad (\text{VI, 57})$$

с учетом которого критерий оптимальности процесса в целом запишется как

$$R^* = \sum_{i=1}^N r_i^* \quad (\text{VI, 58})$$

Максимальное значение критерия оптимальности f_N в этом случае также является функцией двух величин $x^{(0)}$ и λ , однако значение λ уже не связано с ограничением на выбор управления на стадии, вследствие чего рекуррентное соотношение (VI, 33) можно записать в виде:

$$f_N(x^{(0)}, \lambda) = \max_{0 \leq u^{(1)} \leq U} \{r_1(x^{(0)}, u^{(1)}) - \lambda u^{(1)} + f_{N-1}[\Phi^{(1)}(x^{(0)}, u^{(1)}), \lambda]\} \quad (\text{VI, 59})$$

где λ рассматривается как некоторый параметр.

Естественно, что оптимальные управления на стадиях процесса, определяемые с использованием соотношения (VI, 59), зависят от значения параметра λ , которое должно быть выбрано так, чтобы выполнялось условие (VI, 51):

$$\sum_{i=1}^N u^{(i)}(\lambda) - U = 0 \quad (\text{VI, 60})$$

Другими словами, задача оптимизации многостадийного процесса с ограничением на управляющие воздействия (VI, 51) сводится к решению уравнения (VI, 60), определяющего параметр λ , где $u^{(i)}(\lambda)$ — оптимальные управления, найденные в результате применения рекуррентного соотношения (VI, 59) при заданном постоянном значении λ .

Процедура решения задачи, таким образом, сводится к подбору величины λ , при которой выполняется соотношение (VI, 60). Поскольку при проверке каждого значения λ приходится решать задачу оптимизации исходной (не увеличенной на единицу) размерности, необходимый объем памяти и время решения (при рациональной стратегии поиска λ) оказываются значительно меньше, чем при решении задачи с увеличенной на единицу размерностью, которая приводит к соотношениям (VI, 53) и (VI, 55).

В приведенном примере использования множителей Лагранжа величина λ имеет довольно наглядный физический смысл. Как следует из выражения (VI, 57), параметр λ можно рассматривать в качестве меры стоимости применяемого управления, поскольку в новой формулировке оценки эффективности стадии управление вносит дополнительный вклад, пропорциональный значению λ .

Нужно учитывать, что использование множителей Лагранжа в динамическом программировании не всегда позволяет найти решение оптимальной задачи, т. е. не всегда удастся так выбрать значение множителя, чтобы выполнялось условие (VI, 60). Получить какие-либо общие условия возможности применения этого метода в достаточно компактной и удобной для проверки форме довольно трудно. Поэтому при практических расчетах вопрос о применимости множителей Лагранжа для конкретной задачи обычно решается *методом проб*.

Рассмотрим порядок реализации алгоритма решения задачи оптимизации многостадийного процесса методом динамического программирования при использовании для максимизации на каждой стадии поиска на сетке переменных.

На рис. VI-16 представлена блок-схема алгоритма оптимизации, который можно применять для процессов с размерностью состояния стадий и управлений, равной 1.

Предполагается, что ограничения на переменные состояния и управляющие воздействия заданы в виде неравенств:

$$a_x \leq x^{(i)} < b_x \quad a_u \leq u^{(i)} \leq b_u \quad i = 1, \dots, N \quad (\text{VI, 61})$$

Перед началом решения в вычислительную машину вводится исходная информация (ИИ) (блок 0), содержащая программы вычислений функций

$$x^{(i)} = \varphi^{(i)}(x^{(i-1)}, u^{(i)}) \quad i = 1, \dots, N \quad (\text{VI, 62})$$

$$r_i = r_i(x^{(i-1)}, u^{(i)}) \quad i = 1, \dots, N \quad (\text{VI, 63})$$

предельные значения переменных $x^{(i)}$ и $u^{(i)}$ из соотношений (VI, 61), число стадий процесса N и желаемую точность решения

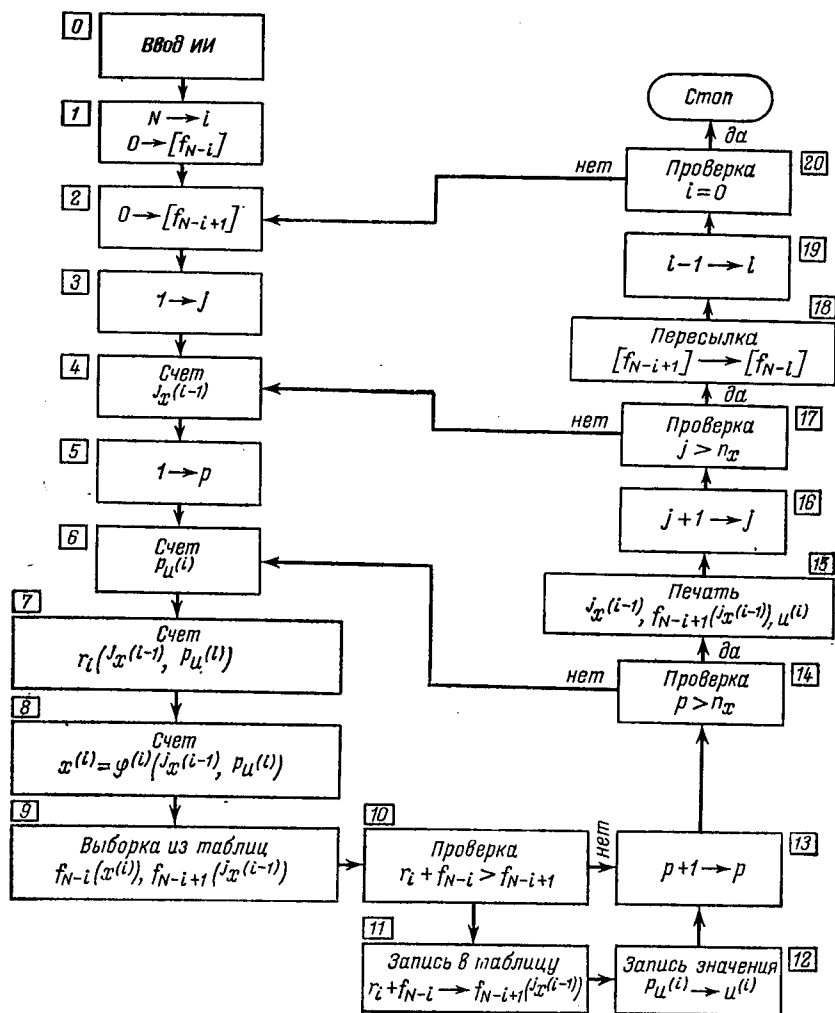


Рис. VI-16. Блок-схема алгоритма для решения одномерных задач.

задачи ε , которая фактически определяет количество вычисляемых значений переменных $j_{x^{(i)}}$ и $p_{u^{(i)}}$ в процессе поиска оптимума на каждой стадии:

$$n_x = \frac{b_x - a_x}{\varepsilon} \quad n_u = \frac{b_u - a_u}{\varepsilon} \quad (\text{VI, 64})$$

В приведенном варианте алгоритма решение заканчивается после того, как найдены зависимости

$$u_{\text{опт}}^{(i)} = u^{(i)}(x^{(i-1)}) \quad i = 1, \dots, N \quad (\text{VI}, 65)$$

$$f_{N-i+1} = f_{N-i+1}(x^{(i-1)}) \quad i = 1, \dots, N \quad (\text{VI}, 66)$$

для всех стадий процесса, которые выводятся на печать по мере их получения, т. е. решение заканчивается после выполнения первого этапа оптимизации.

Такая организация программы позволяет существенно сократить необходимый объем памяти машины. Для хранения промежуточной информации в данном случае используются лишь два массива ячеек памяти $\{f_{N-i+1}\}$ и $\{f_{N-i}\}$ (всего $2n_x$ ячеек), требуемые для запоминания результатов оптимизации на рассматриваемой и предыдущей стадиях.

Функции блоков программы следующие. Блок 1 производит подготовку программы оптимизации к счету, для чего в ячейку счетчика стадий засылается число стадий N . Кроме того, блок 1 подготавливает массив $\{f_{N-i}\}$, в котором должны содержаться результаты оптимизации предыдущей стадии и куда перед началом решения засылаются нулевые значения, что соответствует условию (VI, 35).

Блок 2 засылает нулевые значения в массив $\{f_{N-i+1}\}$, в котором размещаются максимальные значения критерия оптимальности оптимизируемой стадии.

Блок 3 подготавливает начало перебора возможных состояний входа $jx^{(i-1)}$ оптимизируемой стадии, которые вычисляются в блоке 4. Блок 5 подготавливает начало поиска оптимального значения управляющего воздействия $u_{\text{опт}}^{(i)}$ на i -й стадии, для чего применяется метод поиска на сетке. Последовательные значения управления $pu^{(i)}$ рассчитываются в блоке 6.

Блок 7 использует программу вычисления оценки r_i для оптимизируемой стадии так же, как и блок 8, в котором по задаваемой программе рассчитывается состояние выхода оптимизируемой стадии $x^{(i)}$, отвечающее принятым в данный момент значениям состояния входа $jx^{(i-1)}$ и управления $pu^{(i)}$.

По найденному значению $x^{(i)}$ в блоке 9 производится выборка из массива $\{f_{N-i}\}$ максимального значения критерия оптимальности последующих стадий, определяющее в сумме с оценкой величину критерия оптимальности, включающего наряду с последующими стадиями процесса и оптимизируемую в данный момент. Полученный результат $r_i + f_{N-i}(x^{(i)})$ в блоке 10 сравнивается с значением $f_{N-i+1}(jx^{(i-1)})$, которое хранилось до этого момента в соответствующей ячейке массива $\{f_{N-i+1}\}$.

Если вновь найденная величина $f_{N-i+1} = r_i + f_{N-i}(x^{(i)})$ больше прежней, то это означает, что управление $pu^{(i)}$ лучше того, при котором получено прежнее значение f_{N-i+1} , и новое значение f_{N-i+1} записывается в массив $\{f_{N-i+1}\}$ на место прежнего в блоке 11.

Одновременно в блоке 12 производится запоминание для печати управления $\mu^{(i)}$, затем программой управляет блок 13, подготавливающий расчет следующего значения управления.

Если же вновь найденная величина f_{N-i+1} не превышает прежней, записанной в массиве $[f_{N-i+1}]$, то управление из блока 10 сразу передается в блок 13.

В блоке 14 производится проверка на окончание поиска максимального значения $r_i + f_{N-i}$ при заданном значении переменной $jx^{(i-1)}$. Если интервал изменения управляющего воздействия еще не перекрыт, управление передается на расчет следующей величины $\mu^{(i)}$. В противном случае для заданного значения состояния входа jx^{i-1} поиск оптимального управления заканчивается и в блоке 15 выводятся на печать найденные величины $jx^{(i-1)}$, $\mu^{(i)}$ и f_{N-i+1} , что соответствует одной точке в зависимостях (VI, 65) и (VI, 66), и управление передается блоку 16, где подготавливается расчет нового значения состояния входа $j+1x^{(i-1)}$.

Если весь диапазон изменения переменной x^{i-1} еще не обследован, то блок 17 передает управление на расчет следующего значения $jx^{(i-1)}$ (блок 4). В противном случае оптимизация i -й стадии закончена и в блоке 18 производится пересылка массива $[f_{N-i+1}]$, который для следующей оптимизируемой стадии используется как результат оптимизации последующих стадий, т. е. записывается на место массива $[f_{N-i}]$. Далее, в блоке 19 изменяется счетчик стадий, где хранится число стадий, которые еще предстоит оптимизировать. Когда число оптимизируемых стадий еще не исчерпано ($i > 0$), блок 20 передает управление блоку 2, где производится подготовка к оптимизации i -й стадии. Если же все стадии оптимизированы ($i = 0$), то решение задачи заканчивается.

Рассмотренный выше алгоритм поиска оптимума без особого труда можно обобщить и на вариант, когда размерности вектора состояния и управления произвольны. Блок-схема алгоритма, реализующего поиск для этого общего случая, представлена на рис. VI-17.

Программа в основном работает так же, как и описанная выше. Исключение составляют лишь несколько дополнительных блоков (снабженных на рис. VI-17 буквенными индексами), задачей которых является организация циклов при вычислениях значений составляющих векторов состояния $x_k^{(i)}$ и управления $\mu_j^{(i)}$.

В отношении необходимого объема памяти программа для оптимизации процесса произвольной размерности также отличается от приведенной выше лишь тем, что для размещения массивов $[f_{N-i+1}]$ и $[f_{N-i}]$ нужно предусмотреть $2n_x^m$ ячеек памяти и соответствующим образом организовать выборку значений $f_{N-i}(x^{(i)})$ и $f_{N-i+1}(x^{(i-1)})$ в блоке 11. В остальном возрастание необходимого объема памяти несущественно и вызвано лишь тем, что вместо значений величин $x^{(i)}$ и $\mu^{(i)}$ для случая $m = 1$ и $r = 1$ теперь требуется хранить значения векторов $x^{(i)}$ и $\mu^{(i)}$.

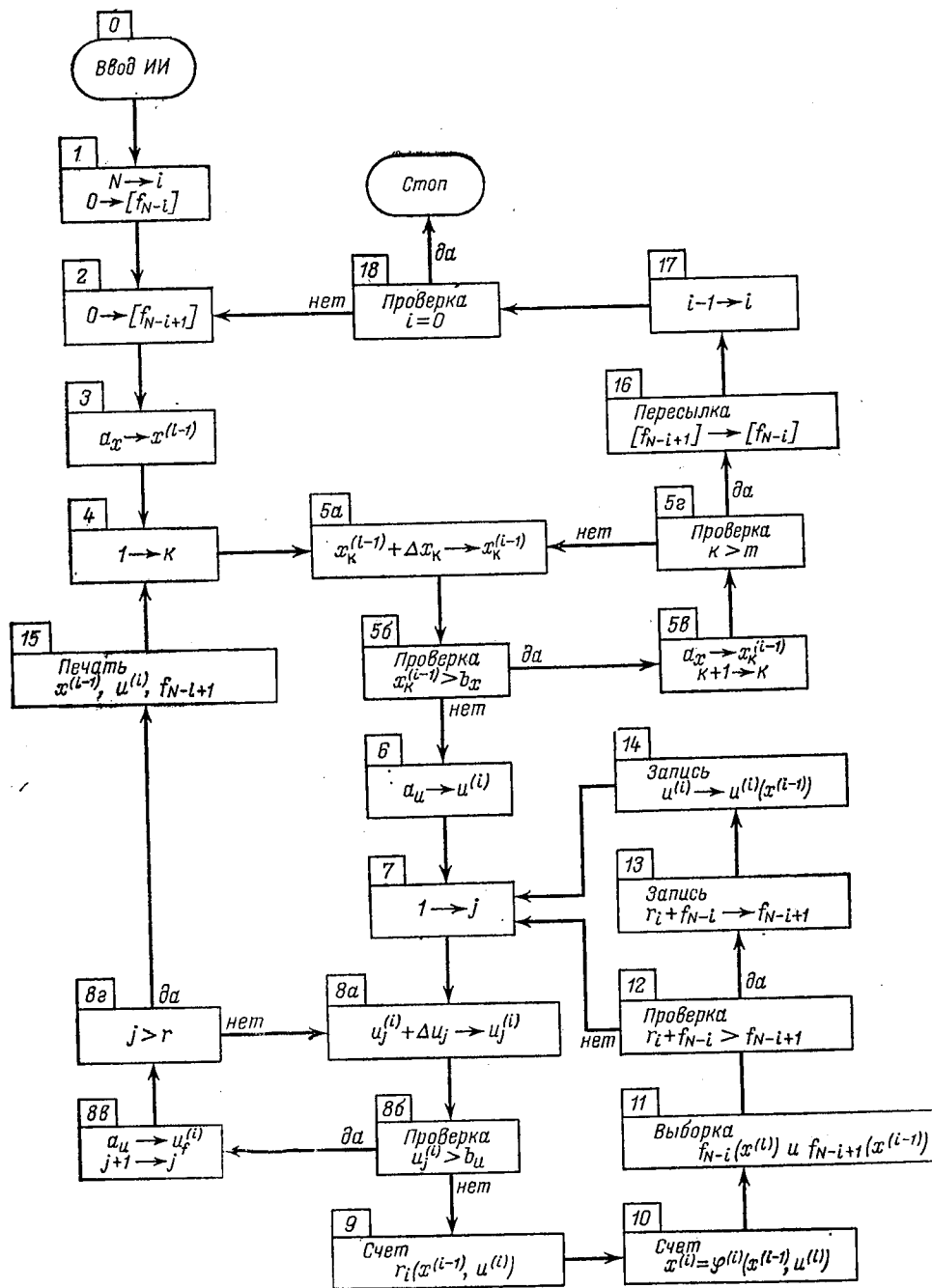


Рис. VI-17. Блок-схема алгоритма для решения задач произвольной размерности.

Разумеется, что программа, блок-схема которой представлена на рис. VI-17, как частный случай включает и программу, рассмотренную выше, т. е. случай $m = 1$ и $r = 1$.

2. ОПТИМАЛЬНОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ РЕАКЦИОННЫХ ОБЪЕМОВ В КАСКАДЕ РЕАКТОРОВ ИДЕАЛЬНОГО СМЕШЕНИЯ

Выше уже отмечалось, что метод динамического программирования находит весьма широкое применение при решении задач оптимизации процессов химической технологии. Значительное число примеров соответствующих оптимальных задач, сформулированных в терминах указанного метода, можно найти в литературе [2, 3]. В подавляющем большинстве практических задач конечное решение получают только в численной форме. Однако в очень простых случаях оно может быть найдено в аналитическом виде, что видно из приведенных ниже примеров, которые наглядно позволяют проследить основные моменты использования метода динамического программирования при решении задач оптимизации.

Пример VI-1. В каскаде N реакторов идеального смешения проводится реакция $A \rightarrow P$, имеющая первый порядок по исходному веществу A . Определить минимальное время пребывания $\tau^{(N)}$ реагентов в каскаде и распределение этого времени по всем реакторам τ_i ($i = 1, \dots, N$), необходимое для достижения заданной степени превращения вещества A в каскаде. Температура во всех реакторах принимается одинаковой.

Решение. Математическое описание i -го реактора в рассматриваемом случае имеет вид [см. уравнение (II, 117)]:

$$x_A^{(i)} = \frac{x_A^{(i-1)}}{1 + \tau_i k_0} \quad (\text{VI, 67})$$

и с учетом того, что температура во всех аппаратах каскада одинакова, может быть представлено как

$$x^{(i)} = \frac{x^{(i-1)}}{1 + \theta_i} \quad \text{где } x^{(i)} = x_A^{(i)} \quad \theta_i = \tau_i k_0 \quad (\text{VI, 68})$$

В качестве управляющего воздействия на каждой стадии при этом применяется значение θ_i , которое одновременно определяет критерий оптимальности для данной стадии:

$$r_i = \theta_i \quad (\text{VI, 69})$$

Согласно выражению (VI, 69), критерий оптимальности каскада в целом запишется в виде

$$R = \sum_{i=1}^N \theta_i \quad (\text{VI, 70})$$

т. е. его величина с точностью до постоянного множителя k_0 совпадает с величиной общего времени пребывания реагентов в каскаде,

В описываемом примере рекуррентное соотношение (VI, 33) для последнего реактора каскада можно записать как

$$f_1(x^{(N-1)}) = \min_{\theta_N} \theta_N \quad (\text{VI, 71})$$

причем минимизация проводится для всех возможных значений концентрации $x^{(N-1)}$ на входе N -го реактора.

Поскольку значение концентрации исходного реагента A на выходе каскада задано (задана степень превращения вещества A в каскаде), минимизации в соотношении (VI, 71) не требуется и необходимое значение времени пребывания в последнем реакторе может быть найдено из математического описания реактора (VI, 68) в виде функции величины $x^{(N-1)}$:

$$\theta_N = \frac{x^{(N-1)}}{x^{(N)}} - 1 \quad (\text{VI, 72})$$

где $x^{(N)}$ — заданное значение концентрации исходного реагента A на выходе каскада.

Таким образом, величина f_1 для последнего аппарата каскада как функция значения $x^{(N-1)}$ определится выражением:

$$f_1(x^{(N-1)}) = \frac{x^{(N-1)}}{x^{(N)}} - 1 \quad (\text{VI, 73})$$

Теперь можно записать рекуррентное соотношение (VI, 33) для $(N-1)$ -го реактора:

$$f_2(x^{(N-2)}) = \min \left\{ \theta_{N-1} + \frac{x^{(N-1)}}{x^{(N)}} - 1 \right\} \quad (\text{VI, 74})$$

или с учетом математического описания $(N-1)$ -го реактора:

$$f_2(x^{(N-2)}) = \min_{\theta_{N-1}} \left\{ \theta_{N-1} + \frac{x^{(N-2)}}{x^{(N)}} \cdot \frac{1}{1 + \theta_{N-1}} - 1 \right\} \quad (\text{VI, 75})$$

Оптимальное значение величины θ_{N-1} может быть найдено из условия:

$$\frac{\partial}{\partial \theta_{N-1}} \left\{ \theta_{N-1} + \frac{x^{(N-2)}}{x^{(N)}} \cdot \frac{1}{1 + \theta_{N-1}} - 1 \right\} = 0 \quad (\text{VI, 76})$$

позволяющего получить уравнение

$$1 - \frac{x^{(N-2)}}{x^{(N)}} \cdot \frac{1}{(1 + \theta_{N-1})^2} = 0 \quad (\text{VI, 77})$$

решение которого будет

$$\theta_{N-1} = \left(\frac{x^{(N-2)}}{x^{(N)}} \right)^{1/2} - 1 \quad (\text{VI, 78})$$

Нетрудно проверить, что значение θ_{N-1} , определенное формулой (VI, 78), действительно соответствует минимуму выражения, стоящего под знаком «min» в соотношении (VI, 75). Подстановка формулы (VI, 78) в его правую часть позволяет найти функцию

$$f_2(x^{(N-2)}) = 2 \left[\left(\frac{x^{(N-2)}}{x^{(N)}} \right)^{1/2} - 1 \right] \quad (\text{VI, 79})$$

после чего оптимизация $(N-1)$ -го реактора заканчивается и становится возможным приступить к оптимизации $(N-2)$ -го реактора.

Для $(N-2)$ -го реактора рекуррентное соотношение (VI, 33) записывается как

$$f_3(x^{(N-3)}) = \min_{\theta_{N-2}} \left\{ \theta_{N-2} + 2 \left[\left(\frac{x^{(N-3)}}{x^{(N)}} \cdot \frac{1}{1 + \theta_{N-2}} \right)^{1/2} - 1 \right] \right\} \quad (\text{VI, 80})$$

откуда можно получить выражения

$$\theta_{N-2} = \left(\frac{x^{(N-3)}}{x^{(N)}} \right)^{1/2} - 1 \quad (\text{VI, 81})$$

$$f_3(x^{(N-3)}) = 3 \left[\left(\frac{x^{(N-3)}}{x^{(N)}} \right)^{1/2} - 1 \right] \quad (\text{VI, 82})$$

аналогично тому, как это было сделано для $(N-1)$ -го реактора.

Сравнивая выражения (VI, 72), (VI, 78) и (VI, 81), а также (VI, 73), (VI, 79) и (VI, 82), легко заметить, что для произвольного i -го реактора могут быть найдены уравнения

$$\theta_i = \left(\frac{x^{(i-1)}}{x^{(N)}} \right)^{\frac{1}{N-i+1}} - 1 \quad (\text{VI, 83})$$

$$f_{N-i+1}(x^{(i-1)}) = (N-i+1) \left[\left(\frac{x^{(i-1)}}{x^{(N)}} \right)^{\frac{1}{N-i+1}} - 1 \right] \quad (\text{VI, 84})$$

из которых при $i = 1$, т. е. для первого реактора каскада, следует:

$$\theta_1 = \left(\frac{x^{(0)}}{x^{(N)}} \right)^{1/N} - 1 \quad (\text{VI, 85})$$

$$f_N(x^{(0)}) = N \left[\left(\frac{x^{(0)}}{x^{(N)}} \right)^{\frac{1}{N}} - 1 \right] \quad (\text{VI, 86})$$

Выражение (VI, 86) уже определяет минимальное значение R , которое можно получить при оптимальном выборе всех θ_i ($i = 1, \dots, N$) для заданного значения $x^{(N)}$ на выходе каскада.

На этом первый этап решения оптимальной задачи методом динамического программирования заканчивается и дальнейший ход решения состоит в отыскании оптимальных величин θ_i для всех реакторов каскада при заданных значениях $x^{(0)}$ и $x^{(N)}$, причем используется формула (VI, 83) совместно с уравнениями математического описания (VI, 68).

Подставляя значение θ_1 из выражения (VI, 85) в соотношение

$$x^{(1)} = \frac{x^{(0)}}{1 + \theta_1} \quad (\text{VI, 87})$$

определяющее концентрацию $x^{(1)}$ на выходе первого реактора, находим:

$$x^{(1)} = x^{(0)} \left(\frac{x^{(N)}}{x^{(0)}} \right)^{\frac{1}{N}} = (x^{(0)})^{\frac{N-1}{N}} (x^{(N)})^{\frac{1}{N}} \quad (\text{VI, 88})$$

после чего с помощью формулы (VI, 83), записанной для $i = 2$, получим:

$$\theta_2 = \left(\frac{(x^{(0)})^{\frac{N-1}{N}} (x^{(N)})^{\frac{1}{N}}}{x^{(N)}} \right)^{\frac{1}{N-1}} - 1 = \left(\frac{x^{(0)}}{x^{(N)}} \right)^{\frac{1}{N}} - 1 \quad (\text{VI, 89})$$

Итак, найденное значение θ_2 в точности равно значению θ_1 , определяемому формулой (VI, 85).

Продолжая этот процесс, т. е. последовательно вычисляя значения концентраций на выходе реакторов и находя по формуле (VI, 83) величины θ_i , можно получить:

$$\theta_i = k_0 \tau_i = \left(\frac{x^{(0)}}{x^{(N)}} \right)^{\frac{1}{N}} - 1 \quad i = 1, \dots, N \quad (\text{VI, 90})$$

т. е. все θ_i равны между собой.

Таким образом найдено, что в изотермическом каскаде реакторов идеального смешения оптимальное распределение времени пребывания по всем аппаратам будет в том случае, если объемы всех реакторов равны между собой (одинаковое время пребывания τ_i во всех аппаратах). При этом время пребывания реагентов в каждом реакторе τ_i ($i = 1, \dots, N$), при котором достигается заданная степень превращения исходного реагента A , т. е. определенная величина отношения $x^{(0)}/x^{(N)}$, рассчитывается по формуле (VI, 90). Общее время пребывания реагентов в каскаде характеризуется величиной f_N (VI, 86), рассматриваемой для заданного значения $x^{(N)}$ как функция величины $x^{(0)}$.

Эти же результаты были получены выше при применении метода неопределенных множителей Лагранжа.

Пример VI-2. Для условий примера VI-1 требуется найти распределение заданного общего времени пребывания $\tau^{(N)}$ по всем реакторам каскада, при котором на его выходе получается минимальное значение концентрации исходного реагента A .

Решение. Критерий оптимальности в данном случае может быть представлен в виде:

$$R = x^{(N)} \quad (\text{VI, 91})$$

т. е. можно принять, что оценки эффективности для всех реакторов каскада определены как

$$r_i = 0 \quad i = 1, \dots, N-1 \quad r_N = x^{(N)} \quad (\text{VI, 92})$$

Поскольку на выбор управляющих воздействий θ_i наложено ограничение:

$$\sum \theta_i = \theta^{(N)} = k_0 \tau^{(N)} \quad (\text{VI, 93})$$

для решения оптимальной задачи методом динамического программирования введем неопределенный множитель λ , используя который можно записать следующие выражения для оценок оптимальности каждого реактора каскада [см. выражение (VI, 57)]:

$$r_i^* = \lambda \theta_i \quad i = 1, \dots, N-1, \quad r_N^* = \lambda \theta_N + x^{(N)} \quad (\text{VI, 94})$$

Тогда критерий оптимальности (VI, 91) заменится критерием:

$$R^* = x^{(N)} + \lambda \sum_{i=1}^N \theta_i = R + \lambda \sum_{i=1}^N \theta_i \quad (\text{VI, 95})$$

Для последнего реактора каскада рекуррентное соотношение (VI, 59), применяемое при решении оптимальной задачи с множителями Лагранжа, имеет вид:

$$f_1(x^{(N-1)}, \lambda) = \min_{\theta_N} \left\{ \lambda \theta_N + \frac{x^{(N-1)}}{1 + \theta_N} \right\} \quad (\text{VI, 96})$$

Оптимальное значение θ_N может быть в данном случае найдено из условия

$$\frac{\partial}{\partial \theta_N} \left\{ \lambda \theta_N + \frac{x^{(N-1)}}{1 + \theta_N} \right\} = 0 \quad (\text{VI, 97})$$

позволяющего получить уравнение

$$\lambda - x^{(N-1)} \frac{1}{(1 + \theta_N)^2} = 0 \quad (\text{VI, 98})$$

решение которого будет:

$$\theta_N = \left(\frac{x^{(N-1)}}{\lambda} \right)^{1/2} - 1 \quad (\text{VI, 99})$$

Подставляя формулу (VI, 99) в правую часть соотношения (VI, 96), найдем:

$$f_1(x^{(N-1)}, \lambda) = 2(\lambda x^{(N-1)})^{1/2} - \lambda \quad (\text{VI, 100})$$

С учетом выражения (VI, 100) рекуррентное соотношение (VI, 59) для $(N-1)$ -го реактора каскада запишется в виде:

$$f_2(x^{(N-2)}, \lambda) = \min_{\theta_{N-1}} \{ \lambda \theta_{N-1} + 2(\lambda x^{(N-1)})^{1/2} - \lambda \} \quad (\text{VI, 101})$$

или, принимая во внимание, что

$$x^{(N-1)} = \frac{x^{(N-2)}}{1 + \theta_{N-1}} \quad (\text{VI, 102})$$

выражение (VI, 101) можно также представить как

$$f_2(x^{(N-2)}, \lambda) = \min_{\theta_{N-1}} \left\{ \lambda \theta_{N-1} + 2 \left(\frac{\lambda x^{(N-2)}}{1 + \theta_{N-1}} \right)^{1/2} - \lambda \right\} \quad (\text{VI, 103})$$

Определяя, как и выше, величины θ_{N-1} и f_2 из соотношения (VI, 103), получим:

$$\theta_{N-1} = \left(\frac{x^{(N-2)}}{\lambda} \right)^{1/3} - 1 \quad (\text{VI, 104})$$

$$f_2(x^{(N-2)}, \lambda) = 3(\lambda^2 x^{(N-2)})^{1/3} - 2\lambda \quad (\text{VI, 105})$$

Аналогично, для $(N-2)$ -го реактора могут быть выведены соотношения:

$$\theta_{N-2} = \left(\frac{x^{(N-3)}}{\lambda} \right)^{1/4} - 1 \quad (\text{VI, 106})$$

$$f_3(x^{(N-3)}, \lambda) = 4(\lambda^3 x^{(N-3)})^{1/4} - 3\lambda \quad (\text{VI, 107})$$

Сравнивая уравнения (VI, 99), (VI, 104) и (VI, 106), а также (VI, 100), (VI, 105) и (VI, 107), легко заметить, что для произвольного i -го реактора можно найти:

$$\theta_i = \left(\frac{x^{(i-1)}}{\lambda} \right)^{\frac{1}{N-i+2}} - 1 \quad (\text{VI, 108})$$

$$f_{N-i+1}(x^{(i-1)}, \lambda) = (N-i+2) (\lambda^{N-i+1} x^{(i-1)})^{\frac{1}{N-i+2}} - (N-i+1) \lambda \quad (\text{VI, 109})$$

откуда при $i = 1$, т. е. для первого реактора каскада, следует:

$$\theta_1 = \left(\frac{x^{(0)}}{\lambda} \right)^{\frac{1}{N+1}} - 1 \quad (\text{VI, 110})$$

$$f_N(x^{(0)}, \lambda) = (N+1) (\lambda^N x^{(0)})^{\frac{1}{N+1}} - N \lambda \quad (\text{VI, 111})$$

Теперь предстоит второй этап решения задачи оптимизации — определение значений θ_i , которые в данном случае могут быть найдены как функции величины λ .

Вычисляя значение концентрации на выходе первого реактора каскада $x^{(1)}$ с учетом выражения (VI, 110), получим:

$$x^{(1)} = \frac{x^{(0)}}{1 + \theta_1} = \lambda^{\frac{1}{N+1}} (x^{(0)})^{\frac{N}{N+1}} \quad (\text{VI, 112})$$

После этого по формуле (VI, 108) рассчитываем оптимальное значение θ_i для $i = 2$:

$$\theta_2 = \left(\frac{x^{(1)}}{\lambda} \right)^{\frac{1}{N}} - 1 = \left(\frac{x^{(0)}}{\lambda} \right)^{\frac{1}{N+1}} - 1 \quad (\text{VI, 113})$$

которое оказывается в точности равным значению θ_1 , определяемому формулой (VI, 110). Продолжая расчет значений θ_i , можно проверить, что все последующие величины θ_i также равны между собой и равны значению θ_1 , т. е.

$$\theta_i = \left(\frac{x^{(0)}}{\lambda} \right)^{\frac{1}{N+1}} - 1 \quad i = 1, \dots, N \quad (\text{VI, 114})$$

Таким образом, опять приходим к выводу, что оптимальное распределение заданного времени пребывания по всем реакторам каскада будет при одинаковом времени пребывания во всех аппаратах. Очевидно, что при этом

$$\theta_i = \frac{\theta^{(N)}}{N} \quad (\text{VI, 115})$$

Тот же результат может быть получен и в случае, если вычисления продолжают в соответствии с методикой использования множителей Лагранжа в динамическом программировании.

Подставляя найденные как функции λ величины θ_i из выражения (VI, 114) в условие (VI, 93), получим уравнение относительно значения λ :

$$\sum_{i=1}^N \theta_i = N \left[\left(\frac{x^{(0)}}{\lambda} \right)^{\frac{1}{N+1}} - 1 \right] = \theta^{(N)} \quad (\text{VI, 116})$$

решение которого будет:

$$\lambda = x^{(0)} \left(\frac{\theta^{(N)}}{N} + 1 \right)^{-(N+1)} \quad (\text{VI, 117})$$

Выражение (VI, 117) при подстановке в формулу (VI, 114) позволяет найти:

$$\theta_i = \left[\left(\frac{\theta^{(N)}}{N} + 1 \right)^{N+1} \right]^{\frac{1}{N+1}} - 1 = \frac{\theta^{(N)}}{N} \quad (\text{VI, 118})$$

т. е. опять получено соотношение (VI, 115).

Минимальное значение концентрации $x^{(N)}$ на выходе каскада при этом можно определить из выражения для критерия оптимальности R^* (VI, 95), если учесть, что минимальное значение R^* характеризуется выражением (VI, 111). В результате находим:

$$\begin{aligned} x^{(N)} = f_N - \lambda \sum_{i=1}^N \theta_i &= (N+1) \frac{x^{(0)}}{\left(\frac{\theta^{(N)}}{N} + 1 \right)^N} - N \frac{x^{(0)}}{\left(\frac{\theta^{(N)}}{N} + 1 \right)^{N+1}} - \\ &- \frac{x^{(0)} \theta^{(N)}}{\left(\frac{\theta^{(N)}}{N} + 1 \right)^{N+1}} = \frac{x^{(0)}}{\left(\frac{\theta^{(N)}}{N} + 1 \right)^N} \end{aligned} \quad (\text{VI, 119})$$

Таким образом, рассматриваемая оптимальная задача решена до конца.

Пример VI-3. Графически проанализировать процедуру оптимизации каскада реакторов для реакции произвольного порядка. Формулировка оптимальной задачи такая же, как и в примере VI-1, т. е. для заданной степени превращения исходного вещества A в каскаде (для заданной концентрации $x^{(N)}$ на его выходе) определить время пребывания τ_i для всех реакторов так, чтобы общее время пребывания реагентов в каскаде было минимальным.

Решение. Математическое описание i -го реактора для реакции произвольного порядка имеет вид уравнения

$$x^{(i-1)} - x^{(i)} - \theta_i (x^{(i)})^{n_A} = 0 \quad (\text{VI, 120})$$

которое уже нельзя решить относительно концентрации на выходе аппарата аналитически при произвольном значении n_A .

Для решения оптимальной задачи в качестве управляющего воздействия примем величину $x^{(i)}$ в i -м реакторе. Тогда оценка его оптимальности r_i может быть записана как

$$r_i = \theta_i = \frac{x^{(i-1)} - x^{(i)}}{(x^{(i)})^{n_A}} \quad (\text{VI, 121})$$

С учетом выражения (VI, 121) рекуррентное соотношение (VI, 33) для последнего реактора каскада будет:

$$f_1(x^{(N-1)}) = \min_{x^{(N)}} \left\{ \frac{x^{(N-1)} - x^{(N)}}{(x^{(N)})^{n_A}} \right\} \quad (\text{VI, 122})$$

Тогда оптимальное значение $x_{\text{опт}}^{(N)}$ определится без решения задачи минимизации формулой

$$x_{\text{опт}}^{(N)} = x^{(N)} \quad (\text{VI, 123})$$

так как величина $x^{(N)}$ задана условиями оптимальной задачи.

Таким образом, можно записать, что

$$f_1(x^{(N-1)}) = \frac{x^{(N-1)} - x^{(N)}}{(x^{(N)})^{n_A}} \quad (\text{VI}, 124)$$

Для $(N-1)$ -го реактора рекуррентное соотношение (VI, 33) с учетом выражения (VI, 124) принимает вид:

$$f_2(x^{(N-2)}) = \min_{x^{(N-1)}} \left\{ \frac{x^{(N-2)} - x^{(N-1)}}{(x^{(N-1)})^{n_A}} + \frac{x^{(N-1)} - x^{(N)}}{(x^{(N)})^{n_A}} \right\} \quad (\text{VI}, 125)$$

Решение уравнения (VI, 125) уже не может быть найдено в аналитической форме для произвольного значения n_A (общий случай). Поэтому рассмотрим графический метод решения.

Построим зависимость значения $f_1(x^{(N-1)})$, определяемого выражением (VI, 124), в координатах $x^{(N-1)} - f_1$. Ниже оси абсцисс построим семейство зависимостей

$$r_{N-1}(x^{(N-1)}) = \frac{x^{(N-2)} - x^{(N-1)}}{(x^{(N-1)})^{n_A}} \quad (\text{VI}, 126)$$

в котором в качестве параметра используется величина $x^{(N-2)}$, принимающая различные значения в допустимой области изменения, определяемой неравенствами

$$0 \leq x^{(N-2)} \leq x^{(0)} \quad (\text{VI}, 127)$$

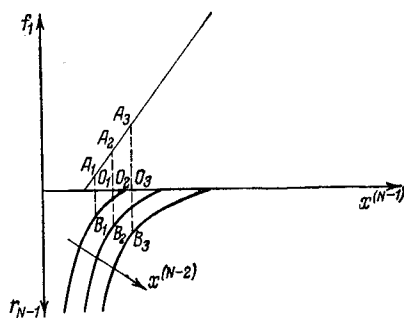


Рис. VI-18. К оптимизации каскада реакторов.

Перечисленные зависимости изображены на рис. VI-18, где стрелкой показано направление смещения графика зависимости (VI, 126) при увеличении значения $x^{(N-2)}$.

Для каждой величины $x^{(N-2)}$ расстояние по вертикали между графиками, построенными в разных квадрантах, характеризует значение выражения, стоящего под знаком минимума в соотношении (VI, 125), при соответствующей величине $x^{(N-1)}$, которая определяется, в свою очередь, как абсцисса точки пересечения вертикали с осью абсцисс.

На рис. VI-18 минимальные значения выражения $r_{N-1} + f_1$ отмечены отрезками A_1B_1 , A_2B_2 и A_3B_3 . Оптимальные величины $x^{(N-1)}$ характеризуются соответственно точками пересечения O_1 , O_2 и O_3 этих отрезков с осью абсцисс.

Выполняя указанные построения для достаточно большого числа значений переменной $x^{(N-2)}$, можно построить зависимость $f_2(x^{(N-2)})$, которая приведена в верхней части рис. VI-19. Ниже оси абсцисс показано изображение зависимости

$$r_{N-2}(x^{(N-2)}) = \frac{x^{(N-3)} - x^{(N-2)}}{(x^{(N-2)})^{n_A}} \quad (\text{VI}, 128)$$

для нескольких значений $x^{(N-3)}$.

На рис. VI-19 можно найти зависимость $f_3(x^{(N-3)})$, которая может быть использована при выборе оптимального значения $x^{(N-3)}$ для $(N-3)$ -го реактора, и т. д. Продолжая этот процесс, можно дойти до первого реактора, для которого вместо семейства кривых в нижнем квадранте будет получена одна кривая, отве-

чающая заданной концентрации исходного продукта $x^{(0)}$ на входе каскада (рис. VI-20).

Оптимальное значение $x^{(1)}$ при этом уже рассчитывается единственным образом, что одновременно определяет и величину оптимального времени пребывания θ_1 для первого реактора каскада, как длину отрезка O_1B_1 на рис. VI-20. Найденное значение $x^{(1)}$ выделяет из семейства кривых

$$r_2(x^{(2)}) = \frac{x^{(1)} - x^{(2)}}{(x^{(2)})^{n_A}} \quad (\text{VI, 129})$$

одну кривую, определяющую, в свою очередь, значения $x^{(2)}$ и θ_2 и т. д. до тех пор, пока не будут вычислены все значения θ_i ($i = 1, \dots, N$), сумма которых

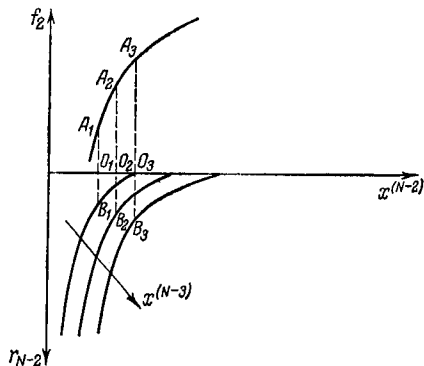


Рис. VI-19. К оптимизации каскада реакторов.

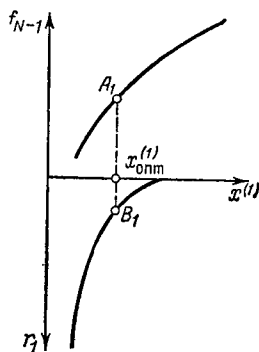


Рис. VI-20. К оптимизации каскада реакторов.

позволяет найти минимальное необходимое время пребывания компонентов в каскаде N реакторов, обеспечивающее заданное значение концентрации исходного реагента x^N на выходе каскада.

3. ПРИНЦИП ОПТИМАЛЬНОСТИ ДЛЯ ПРОЦЕССОВ С РАСПРЕДЕЛЕННЫМИ ПАРАМЕТРАМИ

В предыдущих разделах настоящей главы рассматривались вопросы применения метода динамического программирования для оптимизации дискретных многостадийных процессов. Именно при анализе таких процессов, которые допускают четкое разбиение на стадии, наиболее наглядно проявляются основные достоинства этого метода как способа решения оптимальных задач для процессов с произвольным числом управляемых стадий. Однако метод динамического программирования можно использовать также и для оптимизации процессов с распределенными параметрами и нестационарных процессов с сосредоточенными параметрами, которые изменяются непрерывно. При этом закон их изменения описывается системами дифференциальных уравнений

$$\frac{dx_i}{dt} = \varphi_i(x_1, \dots, x_m, u_1, \dots, u_r, t) \quad (\text{VI, 130})$$

$$i = 1, \dots, m$$

или в векторной форме:

$$\frac{dx}{dt} = \varphi(x, u, t) \quad (\text{VI}, 131)$$

в которой через x обозначен вектор состояния процесса, рассматриваемый как функция независимой переменной t , а через u — вектор управления, который может принимать любое значение из допустимой области его определения.

Для системы уравнений (VI, 131) могут быть заданы граничные условия

$$x(t^{(0)}) = x^{(0)} \quad (\text{VI}, 132)$$

отвечающие исходному состоянию процесса.

Проводя аналогию между непрерывным и дискретным процессами, можно заметить, что для системы уравнений (VI, 231) соответствующее математическое описание многостадийного процесса имеет вид конечных соотношений (VI, 2). В случае дискретного процесса граничным условиям (VI, 132) отвечает вектор состояния входа первой стадии $x^{(0)}$.

Аналогично тому, как для дискретного процесса определяется аддитивный критерий оптимальности (VI, 9), для непрерывного процесса можно также задать критерий оптимальности в виде функционала

$$I = \int_{t^{(0)}}^{t^{(k)}} \varphi_0(x, u, t) dt \quad (\text{VI}, 133)$$

подынтегральное выражение которого является заданной функцией переменных x_i , u_i и t и который также, естественно, обладает аддитивными свойствами, поскольку интеграл в выражении (VI, 133) всегда можно представить как сумму интегралов по меньшим интервалам интегрирования.

Принципиально можно рассматривать непрерывный процесс как дискретный с достаточно большим числом стадий N , и, таким образом, применять описанную в предыдущих разделах методику оптимизации для этого процесса. Зачастую именно такой путь оптимизации непрерывных процессов и используется, тем более, что при решении оптимальных задач на вычислительных машинах интегрирование дифференциальных уравнений обычно выполняется с применением разностных методов, по существу заменяющих непрерывный процесс его дискретным приближением. Однако получаемые при применении принципа оптимальности уравнения для непрерывного процесса могут иметь самостоятельный интерес, поскольку при этом появляется возможность их решения иными методами.

Математическая формулировка принципа оптимальности для непрерывных процессов

При выводе выражений, которые для непрерывных процессов заменяют рекуррентное соотношение (VI, 33), можно было бы проанализировать предельный переход при бесконечном увеличении числа стадий ($N \rightarrow \infty$) в данном соотношении. Однако этот путь страдает отсутствием наглядности, поэтому в приведенном способе используются непосредственно соотношения (VI, 131) и (VI, 133).

Для наглядности ограничимся рассмотрением варианта, когда размерности векторов состояния x и управления u равны 1. При этом можно воспользоваться графической иллюстрацией основных моментов вывода на фазовой плоскости переменных x и t . Система уравнений (VI, 130) для данного случая заменится одним уравнением

$$\frac{dx}{dt} = \varphi_1(x, u, t) \quad (\text{VI, 134})$$

а функционал I (VI, 133) запишется в виде

$$I = \int_{t^{(0)}}^{t^{(k)}} \varphi_0(x, u, t) dt \quad (\text{VI, 135})$$

где функция φ_0 задана для скалярных значений переменных x , u и t .

Предположим, что известно оптимальное управление, которое переводит процесс из начального состояния

$$x(t^{(0)}) = x^{(0)} \quad (\text{VI, 136})$$

в некоторое конечное:

$$x(t^{(k)}) = x^{(k)} \quad (\text{VI, 137})$$

Это означает, что определена оптимальная траектория $x_{\text{опт}}(t)$, по которой процесс переходит из начального состояния $x^{(0)}$ в конечное $x^{(k)}$. Указанная траектория, т. е. зависимость $x(t)$, может быть найдена в результате интегрирования уравнения (VI, 134) с граничным условием (VI, 136) при оптимальном управлении $u_{\text{опт}}(t)$ (рис. VI-21, кривая I).

Допустим, что задача оптимизации сформулирована как задача максимизации функционала (VI, 135), и обозначим максимальное значение функционала, получаемое при подстановке в него функций $u_{\text{опт}}(t)$ и $x_{\text{опт}}(t)$ через $f(x^{(0)}, t^{(0)})$, т. е.

$$f(x^{(0)}, t^{(0)}) = \int_{t^{(0)}}^{t^{(k)}} \varphi_0[x_{\text{опт}}(t), u_{\text{опт}}(t), t] dt \quad (\text{VI, 138})$$

Величина f при этом может рассматриваться как функция значений $x^{(0)}$ и $t^{(0)}$.

Предположим теперь, что под действием некоторого произвольного управления $u(t)$, отличающегося от оптимального, процесс переводится из начального состояния (VI, 136) в состояние $x^*(\tau)$, которое соответствует значению независимой переменной $t = \tau$ и не попадает на оптимальную траекторию $x(t)$ (рис. VI-21, пунктирная линия). Пусть далее из состояния $x^*(\tau)$ процесс переводится в конечное состояние (VI, 137) с использованием оптимального управления $u_{\text{опт}}^*(t)$ (рис. VI-21, кривая 2), вообще говоря, отличающегося от оптимального управления $u_{\text{опт}}(t)$, переводящего процесс из начального состояния в конечное с макси-

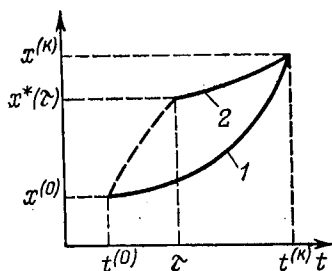


Рис. VI-21. К выводу математической формулировки принципа оптимальности для непрерывных процессов.

мальным значением функционала (VI, 135). Тогда величина критерия оптимальности для второй траектории определится как сумма

$$\int_{t^{(0)}}^{\tau} \Phi_0[x(t), u(t), t] dt + f[x^*(\tau), \tau] \quad (\text{VI, 139})$$

в которой слагаемое $f[x^*(\tau), \tau]$ характеризует максимальное значение функционала (VI, 135) для участка траектории от $t = \tau$ до $t = t^{(k)}$ при оптимальном управлении на этом участке.

Согласно принципу оптимальности, для оптимальности всей траектории закон управления на начальном участке изменения независимой переменной t в интервале, равном $\tau - t^{(0)}$, должен быть выбран таким образом, чтобы обеспечить максимальное значение критерия оптимальности на всем переходе от $t^{(0)}$ до $t^{(k)}$ при условии, что в интервале изменения независимой переменной от τ до $t^{(k)}$ оптимальное управление известно.

Другими словами, если известно оптимальное управление, которое может перевести процесс из состояния $x^*(\tau)$ в конечное состояние $x^{(k)}$, причем получаемый критерий оптимальности равен $f[x^*(\tau), \tau]$, то оптимальное управление в интервале изменения независимой переменной от $t^{(0)}$ до τ необходимо выбирать так, чтобы максимизировалась сумма (VI, 139).

Максимальное значение суммы (VI, 139), очевидно, должно быть равно $f[x^{(0)}, t^{(0)}]$, т. е. максимальному значению функционала (VI, 135) при оптимальном управлении на всей траектории от

$t = t^{(0)}$ до $t = t^{(h)}$. Следовательно, можно записать, что

$$f(x^{(0)}, t^{(0)}) = \max_{u(t)} \left\{ \int_{t^{(0)}}^{\tau} \Phi_0[x(t), u(t), t] dt + f[x^*(\tau), \tau] \right\} \quad (\text{VI, 140})$$

Полученное соотношение (VI, 140) по существу является непрерывным аналогом выведенного ранее для дискретных процессов рекуррентного соотношения (VI, 33).

Если интервал $\tau - t^{(0)}$ выбран достаточно малым, значение $x^*(\tau)$ может быть определено из уравнения (VI, 134) и граничного условия (VI, 136) с помощью уравнения

$$x^*(\tau) \approx x^{(0)} + \Phi_1(x^{(0)}, u^{(0)}, t^{(0)}) (\tau - t^{(0)}) \quad (\text{VI, 141})$$

которое представляет собой известное разностное выражение, применяемое при численном интегрировании дифференциальных уравнений.

С помощью уравнения (VI, 141) можно найти величину

$$f[x^*(\tau), \tau] \approx f(x^{(0)}, t^{(0)}) + \frac{\partial f(x^{(0)}, t^{(0)})}{\partial x} \Phi_1(x^{(0)}, u^{(0)}, t^{(0)}) (\tau - t^{(0)}) + \frac{\partial f(x^{(0)}, t^{(0)})}{\partial t} (\tau - t^{(0)}) \quad (\text{VI, 142})$$

для чего используется обычный прием разложения функции многих переменных в ряд Тейлора в окрестности точки $(x^{(0)}, t^{(0)})$ по степеням малого параметра $(\tau - t^{(0)})$ с точностью до членов первого порядка малости по $(\tau - t^{(0)})$.

Кроме того, при малом значении $(\tau - t^{(0)})$ интеграл в соотношении (VI, 140) можно также записать как

$$\int_{t^{(0)}}^{\tau} \Phi_0[x(t), u(t), t] dt \approx \Phi_0(x^{(0)}, u^{(0)}, t^{(0)}) (\tau - t^{(0)}) \quad (\text{VI, 143})$$

Подставляя теперь выражения (VI, 142) и (VI, 143) в соотношение (VI, 140), найдем:

$$f(x^{(0)}, t^{(0)}) \approx \max_{u^{(0)}} \left\{ \Phi_0(x^{(0)}, u^{(0)}, t^{(0)}) (\tau - t^{(0)}) + f(x^{(0)}, t^{(0)}) + \frac{\partial f(x^{(0)}, t^{(0)})}{\partial x} \Phi_1(x^{(0)}, u^{(0)}, t^{(0)}) (\tau - t^{(0)}) + \frac{\partial f(x^{(0)}, t^{(0)})}{\partial t} (\tau - t^{(0)}) \right\} \quad (\text{VI, 144})$$

причем максимизация проводится уже только выбором величины $u^{(0)}$.

Величины

$$f(x^{(0)}, t^{(0)}) \text{ и } \frac{\partial f(x^{(0)}, t^{(0)})}{\partial t} (\tau - t^{(0)})$$

могут быть вынесены из-под знака максимизации, поскольку их значения не зависят от выбора $u^{(0)}$. Поэтому после взаимного уничтожения величин $f(x^{(0)}, t^{(0)})$, которые входят в правую и левую части соотношения (VI, 144), и сокращения его на $\tau - t^{(0)}$ в результате предельного перехода $\tau \rightarrow t^{(0)}$ получим точное равенство:

$$-\frac{\partial f(x^{(0)}, t^{(0)})}{\partial t} = \max_{u^{(0)}} \left\{ \varphi_0(x^{(0)}, u^{(0)}, t^{(0)}) + \right. \\ \left. + \frac{\partial f(x^{(0)}, t^{(0)})}{\partial x} \varphi_1(x^{(0)}, u^{(0)}, t^{(0)}) \right\} \quad (\text{VI, 145})$$

Это выражение можно записать для любой точки оптимальной траектории (не обязательно начальной), что позволяет опустить в нем индекс «0» у переменных:

$$-\frac{\partial f(x, t)}{\partial t} = \max_u \left\{ \varphi_0(x, u, t) + \frac{\partial f(x, t)}{\partial x} \varphi_1(x, u, t) \right\} \quad (\text{VI, 146})$$

Полученное уравнение (VI, 146) представляет собой *дифференциальное уравнение Беллмана* и является аналитическим выражением принципа оптимальности для непрерывных процессов.

Для процессов, состояние которых определяется более чем одной переменной, т. е. при размерности вектора состояния m , не равной 1, дифференциальное уравнение Беллмана может быть также записано в виде соотношения (VI, 146)

$$-\frac{\partial f(x, t)}{\partial t} = \max_u \{ \varphi_0(x, u, t) + [\text{grad } f, \varphi(x, u, t)] \} \quad (\text{VI, 147})$$

где используется обозначение:

$$[\text{grad } f, \varphi(x, u, t)] = \sum_{i=1}^m \frac{\partial f(x, t)}{\partial x_i} \varphi_i(x, u, t) \quad (\text{VI, 148})$$

В уравнении (VI, 147) максимизация проводится по всем возможным значениям вектора управления u в допустимой области его изменения U .

Решение уравнения Беллмана

Уравнение Беллмана (VI, 147) представляет собой дифференциальное уравнение в частных производных, решением которого является функция $f(x, t)$, рассматриваемая как функция переменных x и t . Величина u , входящая в правую часть уравнения (VI, 147), исключается из него в результате максимизации. Если максимизирующее значение u находится внутри допустимой области изменения U , необходимым условием максимума выражения, стоящего в фигурных скобках, служит равенство нулю производной от этого выражения по u .

Таким образом, уравнение (VI, 147) может быть заменено системой уравнений

$$-\frac{\partial f}{\partial \tau} = \varphi_0(x, u, t) + [\text{grad } f, \varphi(x, u, t)] \quad (\text{VI, 149})$$

$$\frac{\partial \varphi_0(x, u, t)}{\partial u} + \left(\text{grad } f, \frac{\partial \varphi(x, u, t)}{\partial u} \right) = 0 \quad (\text{VI, 150})$$

где уравнение (VI, 150) следует понимать как систему уравнений:

$$\frac{\partial \varphi_0(x, u, t)}{\partial u_l} + \sum_{i=1}^n \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\partial \varphi_i(x, u, t)}{\partial u_l} = 0 \quad l = 1, \dots, r \quad (\text{VI, 151})$$

Естественно, что система уравнений (VI, 149) и (VI, 150) не совсем эквивалентна исходному уравнению (VI, 147), поскольку условию (VI, 150) могут удовлетворять не только оптимальные управления, но и управления, которые придают функционалу (VI, 133) минимальное значение, а также управления, определяющие локальные максимумы этого функционала. Таким образом, система уравнений (VI, 149) и (VI, 150) является лишь необходимым условием оптимальности, тогда как уравнение (VI, 147) содержит и достаточное условие в форме требования максимизации. Однако на практике для отыскания оптимальных управлений в процессе часто достаточно рассмотреть решение системы уравнений (VI, 149) и (VI, 150).

Простейший способ решения системы уравнений (VI, 149) и (VI, 150) [или (VI, 151)] заключается в том, чтобы попытаться из системы конечных соотношений (VI, 151) найти величины u_l в виде выражений:

$$u_l = u_l(\text{grad } f, x, t) \quad l = 1, \dots, r \quad (\text{VI, 152})$$

Подставляя затем выражения (VI, 152) в уравнение (VI, 149), можно получить одно дифференциальное уравнение в частных производных относительно функции f , которое решается, если для функции f заданы соответствующие граничные условия. В качестве одного такого условия может быть использовано тождественное равенство нулю значения функции f в конечной точке траектории, т. е. при $t = t^{(k)}$ и $x = x^{(k)}$

$$f(x^{(k)}, t^{(k)}) = 0 \quad (\text{VI, 153})$$

Кроме того, из условия (VI, 153) также следует:

$$\frac{\partial f(x^{(k)}, t^{(k)})}{\partial x_i} = 0 \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{VI, 154})$$

При помощи условия (VI, 153) из уравнения (VI, 147) находят, что для конечной точки траектории должно выполняться условие

$$-\frac{\partial f(x^{(k)}, t^{(k)})}{\partial t} = \max_{u^{(k)}} \varphi_0(x^{(k)}, u^{(k)}, t^{(k)}) \quad (\text{VI, 155})$$

которое с учетом приведенных выше рассуждений можно также записать в виде системы:

$$-\frac{\partial f(x^{(k)}, t^{(k)})}{\partial t} = \varphi_0(x^{(k)}, u_{\text{опт}}^{(k)}, t^{(k)}) \quad (\text{VI}, 156)$$

$$-\frac{\partial \varphi_0(x^{(k)}, u_{\text{опт}}^{(k)}, t^{(k)})}{\partial u_l} = 0 \quad l = 1, \dots, r \quad (\text{VI}, 157)$$

В соотношении (VI, 156) составляющие $u_l^{(k)}$ вектора управления $u_{\text{опт}}$ находятся из решения системы уравнений (VI, 157).

Таким образом, для функции $f(x, t)$ определены как значение в конечной точке траектории (VI, 153), так и величины всех производных в этой точке (VI, 154), (VI, 156). Следовательно, функция $f(x, t)$ может быть найдена интегрированием уравнения (VI, 149), в котором значения u_l характеризуются системой (V, 151).

Для решения уравнения Беллмана можно воспользоваться численными методами [3], а в ряде случаев, особенно при решении целого класса задач оптимизации химических реакторов, — методом характеристик [2, 4].

Смысл получаемого решения $f(x, t)$ уравнения Беллмана заключается в том, что становится известным максимальное значение критерия оптимальности, которое получается, если применяется оптимальное управление. Для известной функции $f(x, t)$ оптимальное управление при этом может быть найдено с помощью выражений (VI, 152) и определяется как функция текущего значения вектора состояния $x(t)$ и независимой переменной t .

Пример VI-4. Для процесса, описываемого системой уравнений

$$\begin{aligned} \frac{dx_1}{dt} &= \varphi_1 = (u)^2 \\ \frac{dx_2}{dt} &= \varphi_2 = ux_1 \end{aligned} \quad (\text{VI}, 158)$$

критерий оптимальности которого имеет вид функционала

$$I = \int_{t^{(0)}}^{t^{(k)}} [(x_1)^2 + (u)^2] dt \quad (\text{VI}, 159)$$

найти уравнение Беллмана с граничными условиями.

Решение. Система уравнений (VI, 151) в данном случае будет

$$2u + \frac{\partial f}{\partial x_1} 2u + \frac{\partial f}{\partial x_2} x_1 = 0 \quad (\text{VI}, 160)$$

откуда получим:

$$u = -\frac{1}{2} \cdot \frac{\frac{\partial f}{\partial x_2}}{1 + \frac{\partial f}{\partial x_1}} x_1 \quad (\text{VI}, 161)$$

Записывая теперь уравнение (VI, 149):

$$-\frac{\partial f}{\partial t} = (x_1) + (u)^2 + \frac{\partial f}{\partial x_1} (u)^2 + \frac{\partial f}{\partial x_2} u x_1 \quad (\text{VI, 162})$$

и подставляя в него выражение (VI, 161), находим:

$$-\frac{\partial f}{\partial t} = (x_1)^2 \left(1 - \frac{1}{4} \cdot \frac{\left(\frac{\partial f}{\partial x_2} \right)^2}{1 + \frac{\partial f}{\partial x_1}} \right) \quad (\text{VI, 163})$$

Граничные условия для функции $f(x_1, x_2, t)$, определяемые соотношениями (VI, 153) и (VI, 154), представляются как

$$f(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, t^{(k)}) = 0 \quad (\text{VI, 164})$$

$$\frac{\partial f(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, t^{(k)})}{\partial x_i} = 0 \quad i = 1, 2 \quad (\text{VI, 165})$$

Для расчета граничного значения производной $\partial f / \partial t$ предварительно нужно решить систему уравнений (VI, 157), которая с учетом вида подынтегрального выражения функционала (VI, 159) будет:

$$2u^{(k)} = 0 \quad (\text{VI, 166})$$

откуда

$$u^{(k)} = 0 \quad (\text{VI, 167})$$

и условие для производной $\partial f / \partial t$ (VI, 156) согласно выражению (VI, 167) запишется как

$$-\frac{\partial f(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, t^{(k)})}{\partial t} = (x_1^{(k)})^2 \quad (\text{VI, 168})$$

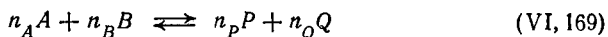
Следует отметить, что когда оптимальные управления находятся на границе области U , замена уравнения (VI, 147) системой уравнений (VI, 149) и (VI, 150) не позволяет использовать ее для определения оптимального решения задачи. При этом система (VI, 150) не выполняется ни при каких значениях управляющих воздействий и для решения оптимальной задачи лучше воспользоваться, например, сведением непрерывного процесса к дискретному с достаточно большим числом стадий. На практике такой прием довольно широко применяется при решении задач оптимизации непрерывных процессов, поскольку он дает возможность избежать решения, как правило, нелинейного уравнения в частных производных, каким является уравнение Беллмана.

4. ОПТИМАЛЬНЫЕ ТЕМПЕРАТУРНЫЕ ПРОФИЛИ В РЕАКТОРАХ ИДЕАЛЬНОГО ВЫТЕСНЕНИЯ ДЛЯ ОБРАТИМЫХ РЕАКЦИЙ

Задача нахождения оптимального температурного профиля в реакторе идеального вытеснения для обратимых реакций рассматривалась выше (см. пример III-8). Однако в данном случае представляет интерес получить ее решение методом динамического программирования, чтобы подробнее проанализировать

основные соотношения, к которым приводит принцип оптимальности, сформулированный для процессов с распределенными параметрами (к ним можно отнести и реактор идеального вытеснения).

Как уже отмечалось (см. пример III-8), математическое описание реактора идеального вытеснения для обратимых реакций общего вида



может быть представлено в форме уравнения

$$\frac{dx}{d\tau} = w(x, T) \quad (\text{VI, 170})$$

описывающего изменение степени превращения x одного из исходных реагентов по длине реактора.

Сформулируем задачу оптимизации как задачу определения оптимального температурного профиля в реакторе $T(\tau)$, при котором в аппарате заданных размеров можно достигнуть максимальной степени превращения x . Конечное значение степени превращения $x^{(k)}$ с учетом уравнения (VI, 170) может быть рассчитано как величина функционала

$$x^{(k)} = \int_0^{\tau_k} w(x, T) d\tau \quad (\text{VI, 171})$$

с заданными пределами интегрирования 0 и τ_k .

Введем обозначения

$$\begin{aligned} u &= T & x &= x \\ \varphi(x, u) &= \varphi_0(x, u) = \varphi_1(x, u) = w(x, T) \end{aligned} \quad (\text{VI, 172})$$

с использованием которых выражения (VI, 170) и (VI, 171) запишутся как

$$\frac{dx}{d\tau} = \varphi(x, u) \quad (\text{VI, 173})$$

$$x^{(k)} = \int_0^{\tau_k} \varphi(x, u) dt \quad (\text{VI, 174})$$

Тогда система уравнений (VI, 149) и (VI, 150) согласно выражениям (VI, 173) и (VI, 174) примет вид:

$$-\frac{\partial f}{\partial \tau} = \varphi(x, u) \left(1 + \frac{\partial f}{\partial x} \right) \quad (\text{VI, 175})$$

$$\frac{\partial \varphi(x, u)}{\partial u} = 0 \quad (\text{VI, 176})$$

Уравнение (VI, 176) определяет оптимальное значение температуры для любой заданной степени превращения и совпадает с

учетом обозначений (VI, 172) с полученным в примере III-8 условием (III, 121). При помощи этого условия можно рассчитать оптимальный температурный профиль как функцию степени превращения x , изменяющуюся по длине реактора в соответствии с уравнением (VI, 170). Поэтому в данном случае нет необходимости решать уравнение (VI, 175), поскольку дальнейший ход расчета оптимального температурного профиля в аппарате уже не отличается от рассмотренного в примере III-8.

Однако на данном примере можно применить для решения уравнения (VI, 175) метод характеристик [4] и оценить информацию, которая может быть получена в результате решения.

Для этого запишем уравнение (VI, 175) в виде

$$-\frac{\partial f}{\partial \tau} = \Phi(x) \left(1 + \frac{\partial f}{\partial x} \right) \quad (\text{VI, 177})$$

где с помощью соотношения

$$u = u(x) \quad (\text{VI, 178})$$

которое выводится из условия (VI, 176), исключена переменная.

Граничные условия для уравнения (VI, 177) могут быть представлены в форме соотношений:

$$f(x^{(k)}, \tau_k) = 0 \quad (\text{VI, 179})$$

$$\frac{\partial f(x^{(k)}, \tau_k)}{\partial x} = 0 \quad (\text{VI, 180})$$

$$-\frac{\partial f(x^{(k)}, \tau_k)}{\partial \tau} = \Phi(x^{(k)}) \quad (\text{VI, 181})$$

Полная система уравнений характеристик, соответствующих уравнению в частных производных (VI, 177), в данном случае имеет вид

$$\frac{dx}{ds} = \Phi(x) \quad (\text{VI, 182})$$

$$\frac{d\tau}{ds} = 1 \quad (\text{VI, 183})$$

$$\frac{df}{ds} = -\Phi(x) \quad (\text{VI, 184})$$

$$\frac{df_x}{ds} = -\frac{d\Phi(x)}{dx} (1 + f_x) \quad (\text{VI, 185})$$

$$\frac{df_\tau}{ds} = 0 \quad (\text{VI, 186})$$

где параметр s используется в уравнениях характеристик как независимая переменная.

Если почленно разделить уравнение (VI, 182) на уравнение (VI, 183), то в результате получим уравнение

$$\frac{dx}{d\tau} = \Phi(x) \quad (\text{VI, 187})$$

описывающее изменение степени превращения по длине реактора при оптимальной температуре в каждой его точке. Таким образом, уравнения характеристик определяют течение процесса при оптимальных условиях.

Из последнего уравнения (VI, 186) семейства характеристик следует, кроме того, что вдоль характеристики значение f_τ остается постоянным. Вместе с тем, граничное условие (VI, 181) показывает, что величина f_τ имеет тот же знак, что и значение ω . Поскольку интерес представляют только положительные значения скорости реакции ($\omega > 0$), то это означает, что величина f_τ вдоль всей характеристики сохраняет постоянное положительное значение.

Уравнение (VI, 177) описывает процесс лишь в той области, где оптимальную температуру можно выбрать при использовании условия (VI, 176), которое позволяет найти выражение (VI, 178). Если же на выбор оптимального значения температуры наложено ограничение типа неравенства:

$$T_1 \leq T \leq T_2 \quad (u_1 \leq u \leq u_2) \quad (\text{VI, 188})$$

и выражение (VI, 178) дает указанную температуру, выходящую за пределы ограничения (VI, 188), то оптимальным будет ее значение, соответствующее верхнему или нижнему пределу в неравенствах (VI, 188). В этом случае результирующий оптимальный температурный профиль в реакторе идеального вытеснения состоит из изотермических участков при температурах T_1 и T_2 и участка с температурой, характер изменения которой определяется выражением (VI, 178). При этом в данное выражение необходимо подставить зависимость степени превращения от τ , получаемую интегрированием уравнения (VI, 187).

Рассмотрим порядок расчета оптимального температурного профиля на примере обратимой экзотермической реакции



для которой выражение (VI, 178) может быть записано в виде [см. уравнение (III, 139)]

$$z_{\text{опт}} = \left[\frac{E_2}{E_1} f(x_A) \right]^{E_1/(E_1 - E_2)} \quad (\text{VI, 190})$$

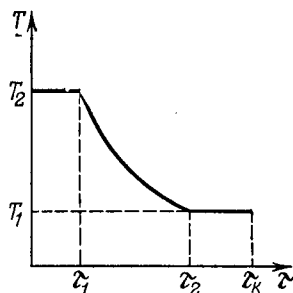
где $f(x_A)$ определяется уравнением (III, 133) и

$$f(x_A) = \frac{x_A}{1 - x_A} \quad (\text{VI, 191})$$

Для экзотермической реакции $E_1 < E_2$ и соотношение (VI, 190) характеризует монотонное убывание температуры с возрастанием степени превращения по длине реактора. В данном случае в начале аппарата при $x_A = 0$ оптимальная температура стремится к бесконечно большому значению,

Таким образом, оптимальный температурный профиль при наличии ограничений (VI, 188) должен обязательно иметь изотермический участок при максимальной температуре T_2 и может иметь изотермический участок при минимальной температуре T_1 . Задача теперь сводится к нахождению значений τ_1 и τ_2 (рис. VI-22), в пределах которых оптимальный температурный профиль описывается выражением (VI, 190).

Рис. VI-22. Оптимальный температурный профиль в реакторе идеального вытеснения для обратимой экзотермической реакции при наличии ограничений на ее температуру.



Степень превращения $\kappa_A^{(1)}$ при $\tau = \tau_1$ легко определяется из соотношения (VI, 190), для чего его необходимо записать в виде

$$\kappa_A = \frac{1}{1 + \frac{E_2}{E_1} z^{(E_2 - E_1)/E_1}} \quad (\text{VI, 192})$$

и подставить в него значение $z^{(2)} = z(T_2)$. В результате получим:

$$\kappa_A^{(1)} = \frac{1}{1 + \frac{E_2}{E_1} (z^{(2)})^{(E_2 - E_1)/E_1}} \quad (\text{VI, 193})$$

Поскольку на участке реактора $0 \leq \tau \leq \tau_1$ процесс протекает в изотермических условиях, из уравнения (VI, 170) находим:

$$\tau_1 = \int_0^{\kappa_A^{(1)}} \frac{d\kappa}{w(\kappa, T_2)} \quad (\text{VI, 194})$$

причем верхний предел интегрирования определяется соотношением (VI, 193).

Дальнейший характер изменения температуры описывается соотношением (VI, 190) до значения $\kappa_A^{(2)}$, которое может быть также вычислено по формуле (VI, 192) при подстановке в нее значения температуры T_1 , соответствующего нижнему пределу ограничений (VI, 188):

$$\kappa_A^{(2)} = \frac{1}{1 + \frac{E_2}{E_1} (z^{(1)})^{(E_2 - E_1)/E_1}} \quad (\text{VI, 195})$$

Тогда, подставляя в уравнение (VI, 170) зависимость $T_{\text{опт}}(\kappa)$, характеризующую выражением (VI, 190), и рассчитывая интеграл в соотношении

$$\tau = \tau_1 + \int_{\kappa_A^1}^{\kappa_A} \frac{d\kappa}{w[\kappa, T_{\text{опт}}(\kappa)]} \quad (\text{VI, 196})$$

как функцию переменного верхнего предела интегрирования, можно найти зависимость $\tau = \tau(\kappa_A)$ или $\kappa_A = \kappa_A(\tau)$. Отсюда из выражения (VI, 190) получим зависимость

$$z_{\text{опт}} = z(\tau) \quad (\text{VI, 197})$$

определяющую характер изменения температуры на неизотермическом участке как функцию τ .

Если для заданной величины τ_h значение температуры, описываемое соотношением (VI, 197), не меньше значения T_1 , задающего нижний допустимый предел температуры, то изотермический участок с минимальной температурой T_1 в реакторе отсутствует. В противном случае он будет, и для расчета величины τ_2 необходимо воспользоваться соотношением (VI, 196), в котором в качестве верхнего предела интегрирования принимается значение $\kappa_A^{(2)}$, определяемое выражением (VI, 195).

Изложенный случай оптимальной задачи для обратимых экзотермических реакций, осуществляемых в реакторе идеального вытеснения, приведен в литературе [2], в которой можно найти также значительное число примеров применения уравнения Беллмана для оптимизации реакторных процессов.

* *
*

Рассмотренные в настоящей главе примеры использования метода динамического программирования для решения оптимальных задач затрагивают лишь относительно небольшую область возможного применения этого метода. Более полные сведения об его использовании для решения задач оптимизации могут быть найдены в достаточно подробном изложении в литературе [2, 3, 5, 6].

Достоинства метода динамического программирования при решении оптимальных задач для процессов невысокой размерности неоспоримы, поскольку он принадлежит к числу немногих методов оптимизации, при применении которых полученное решение соответствует глобальному оптимуму.

Вместе с тем следует иметь в виду и недостатки этого метода, обусловленные «проклятием размерности» (см. стр. 280), и всегда стремиться к тому, чтобы при формулировке оптимальной задачи в терминах динамического программирования размерность оптимизируемого процесса была по возможности малой.

Для оптимизации процессов с распределенными параметрами предпочтительнее все же оказывается принцип максимума, которому посвящена следующая глава. Однако всегда нужно учитывать возможность аппроксимации непрерывного процесса дискретным многостадийным процессом и пользоваться указанной возможностью для решения оптимальных задач невысокой размерности. Это обусловлено тем, что метод динамического программирования представляет в распоряжение исследователя весьма удобную процедуру оптимизации многостадийных процессов, которая сравнительно легко программируется на вычислительных машинах.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Беллман Р.* Динамическое программирование. Пер. с англ. М., Издательский центр «Издательство «Мир», 1960. 400 с.
2. *Арис Р.* Оптимальное проектирование химических реакторов. Пер. с англ. М., Издательский центр «Издательство «Мир», 1963. 238 с.
3. *Робертс С.* Динамическое программирование в процессах химической технологии и методы управления. Пер. с англ. М., «Мир», 1965. 488 с.
4. *Смирнов В. И.* Курс высшей математики. Т. 4. М., Физматгиз, 1958. 812 с.
5. *Беллман Р.* Процессы регулирования с адаптацией. Пер. с англ. М., «Наука», 1964. 364 с.
6. *Беллман Р., Дрейфус С.* Прикладные задачи динамического программирования. М., «Наука», 1965. 458 с.

ПРИНЦИП МАКСИМУМА

При решении вариационных задач классическими методами, как уже отмечалось выше, серьезные, а иногда и непреодолимые трудности возникают в тех случаях, когда отыскиваемые управляющие воздействия не принадлежат к классу непрерывных функций или когда на переменные задачи наложены ограничения типа неравенств. Для решения таких задач иногда с успехом может быть использован метод, сформулированный и доказанный в работах Л. С. Понтрягина и его учеников [1—5], который получил название *принципа максимума*.

В ряде работ [1—4] принцип максимума формулируется как необходимый признак оптимальности для процессов, описываемых системами нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений. Показано, что если процесс характеризуется системой линейных уравнений, принцип максимума является достаточным условием оптимальности.

В литературе [5] формулируются также условия, при выполнении которых принцип максимума можно применять как необходимый и достаточный признак оптимальности для процессов, описываемых системами нелинейных дифференциальных уравнений.

Принцип максимума распространяется и на процессы с распределенными параметрами, которые описываются уравнениями в частных производных [6]. Кроме того, с некоторыми оговорками [7] принцип максимума может использоваться для оптимизации дискретных процессов.

В настоящее время принцип максимума нашел широкое применение в практике решения оптимальных задач оптимизации, относящихся к области химической технологии [8—12].

1. ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ

Наиболее наглядно можно проиллюстрировать основные идеи принципа максимума для процесса, описываемого системой обыкновенных (в общем случае нелинейных) дифференциальных уравнений

$$\frac{dx_i}{dt} = \varphi_i(x_1, x_2, \dots, x_m, u_1, u_2, \dots, u_r) \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{VII}, 1)$$

или в векторной форме

$$\frac{dx}{dt} = \Phi(x, u) \quad (\text{VII}, 2)$$

причем x — вектор состояния процесса, рассматриваемый как функция независимой переменной t ; u — вектор управления, принимающий любые значения из допустимой области его определения U , которая может быть задана в виде совокупности соответствующего числа соотношений типа равенств или неравенств.

Если математическое описание процесса содержит уравнения, в правые части которых входит независимая переменная t , то это описание можно легко представить в форме системы уравнений (VII, 1), для чего достаточно ввести в уравнения еще одну переменную $x_{m+1} \equiv t$ (стр. 187).

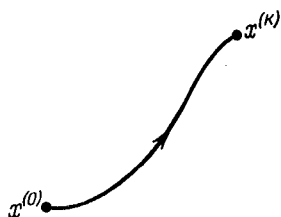


Рис. VII-1. Траектория процесса с заданным начальными и конечным состояниями.

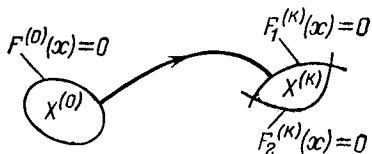


Рис. VII-2. Задание областей допустимых состояний для начала и конца траектории процесса.

Для системы уравнений (VII, 1) или, что то же самое, для векторного уравнения (VII, 2) могут быть заданы граничные условия

$$x_i(t^{(0)}) = x_i^{(0)} \quad i = 1, \dots, m \quad \text{или} \quad x(t^{(0)}) = x^{(0)} \quad (\text{VII}, 3)$$

$$x_i(t^{(k)}) = x_i^{(k)} \quad i = 1, \dots, m \quad \text{или} \quad x(t^{(k)}) = x^{(k)} \quad (\text{VII}, 4)$$

определяющие заданные значения всех или только некоторых переменных состояния x_i для двух значений независимой переменной $t^{(0)}$ и $t^{(k)}$. В дальнейшем состояние процесса при $t = t^{(0)}$ удобно называть начальным, а состояние при $t = t^{(k)}$ — конечным, что, естественно, позволяет интерпретировать поведение процесса в фазовом пространстве переменных состояния как переход из начального состояния $x^{(0)}$ в конечное $x^{(k)}$ (рис. VII-1) или из некоторой области $X^{(0)}$ начальных состояний в область $X^{(k)}$ конечных состояний процесса (рис. VII-2).

Предполагается, что критерий оптимальности процесса в общем случае задан в виде функционала

$$I = \int_{t^{(0)}}^{t^{(k)}} \Phi_0(x, u) dt \quad (\text{VII}, 5)$$

в котором $\Phi_0(x, u)$ — заданная функция переменных x_i и u_i .

Начальное $t^{(0)}$ и конечное $t^{(k)}$ значения независимой переменной t в общем случае также могут быть не заданы в исходной постановке оптимальной задачи и подлежат определению в процессе ее решения.

Формулировка принципа максимума на примере задач о быстродействии

В задачах о быстродействии требуется так выбрать управляющие воздействия в каждый момент времени, чтобы перевести процесс из заданного начального состояния в заданное конечное за минимальное время. Типичными примерами таких задач из области химической технологии служат задачи отыскания оптимальных программ управления периодическими процессами и близкие им задачи наиболее быстрого перевода процесса с одного режима эксплуатации на другой. Кроме того, целый ряд химико-технологических задач, как, например, задача выбора оптимального температурного профиля в реакторе вытеснения, можно также сформулировать как задачи о быстродействии.

Следует отметить, что задача о быстродействии является частным случаем более общей задачи с критерием оптимальности, заданным в виде функционала (VII,5), если в нем положить:

$$\varphi_0 \equiv 1 \quad (\text{VII}, 6)$$

Тогда

$$I = \int_{t^{(0)}}^{t^{(k)}} dt = t^{(k)} - t^{(0)} \quad (\text{VII}, 7)$$

и, таким образом, функционал (VII,5) при условии (VII,6) определяет время перехода процесса из начального состояния $x^{(0)}$ в конечное $x^{(k)}$. Далее для упрощения иногда будем полагать, что $t^{(0)} = 0$ и, следовательно, задача оптимизации сводится к минимизации значения $t^{(k)}$, которое в этом случае характеризует время перехода процесса из начального состояния в конечное.

Для простоты примем, что в рассматриваемой задаче о быстродействии используется только одно управляющее воздействие u , т. е. $r = 1$, и процесс описывается системой уравнений:

$$\frac{dx_i}{dt} = \varphi_i(x_1, x_2, \dots, x_m, u) \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{VII}, 8)$$

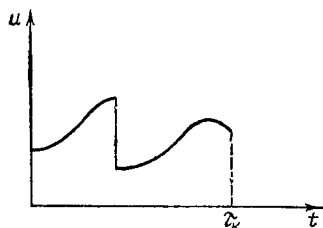
Необходимые обобщения при большем числе управляющих воздействий (при произвольном числе r) могут быть получены формально заменой в конечных выражениях величины u на вектор $\mathbf{u}$. Обсуждение правомерности такой замены можно найти в литературе [4, 5].

Допустим теперь, что оптимальное управление $u_{\text{опт}}(t)$, переводящее процесс из начального состояния $x^{(0)}$ в конечное $x^{(k)}$ за

минимальное время $t^{(h)} = \tau_h$, известно (рис. VII-3). Это управление не обязательно должно быть непрерывной функцией t . Достаточно, чтобы оно имело лишь конечное число точек разрыва первого рода, т. е. таких точек, в которых функция изменяется скачком от одного конечного значения к другому, как показано на рис. VII-3. Соответствующая оптимальному управлению $u_{\text{опт}}(t)$ траектория процесса в фазовом пространстве обозначена на рис. VII-4 сплошной линией.

При любом другом управлении, отличающемся от оптимального, получаемая в результате траектория уже не будет пере-

Рис. VII-3. Оптимальное управление.



водить процесс в конечное состояние за минимальное время. При этом неоптимальная траектория либо попадает в конечную точку за время большее, чем τ_h , либо вообще при этом управлении в конечную точку попасть невозможно.

Таким образом, при применении неоптимального управления состояние процесса в момент времени τ_h отличается от заданного

Рис. VII-4. Траектории процесса в фазовом пространстве, соответствующие оптимальному (сплошная линия) и неоптимальному (пунктир) управлениям.



конечного $x^{(h)}$. На рис. VII-4 неоптимальная траектория показана пунктиром и заканчивается в точке $(x^{(h)})^*$, в которую процесс переводится при неоптимальном управлении за время τ_h .

Предположим, что на некотором малом интервале времени длиной

$$\Delta\tau = \varepsilon M \quad (\text{VII, 9})$$

где M — положительное число и ε — малый положительный параметр, оптимальное управление заменяется произвольным постоянным значением u^* . В результате получим новый закон управления $u(t)$, уже неоптимальный (рис. VII-5). При использовании этого закона траектория процесса до момента времени $\tau - \Delta\tau$ совпадает с оптимальной, а с момента времени $\tau - \Delta\tau$ начнет отклоняться от нее. В момент времени τ_h , определенный для оптимального процесса, новая траектория уже не попадает в заданную конечную точку $x^{(h)}$, а окажется на некотором расстоянии от нее (рис. VII-6).

Если интервал времени Δt , на котором оптимальное управление заменяется произвольным постоянным значением, выбран достаточно малым, то отклонение от оптимальной траектории тоже мало. Очевидно, что это отклонение уже может дать представление о том, оптимальна или нет исходная траектория.

Такой прием носит название «игольчатой» вариации в отличие от вариации функции, использовавшейся при выводе уравнения Эйлера в классическом вариационном исчислении. Достоинство метода «игольчатой» вариации заключается прежде всего в том,

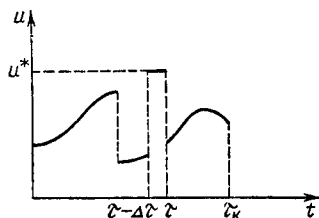


Рис. VII-5. Варьирование оптимального управления.

что разрывность функций, которая препятствует эффективному применению классических вариационных методов, в данном случае кладется в основу математического аппарата, что позволяет включить в класс допустимых решений оптимальных задач также и разрывные функции.

Поскольку оптимальное управление на участке траектории от момента времени $t = \tau$ до $t = \tau_k$ одинаково для оптимальной

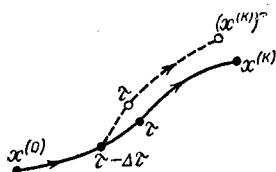


Рис. VII-6. Отклонение конечной точки траектории для варьированного управления.

траектории и для неоптимальной, получаемой при применении игольчатой вариации, отклонение последней от оптимальной траектории может рассматриваться как результат различия значений переменных состояния в момент времени $t = \tau$. Эту разницу можно определить, если принять во внимание, что в момент времени $\tau - \Delta t$ величина $x(\tau - \Delta t)$ одна и та же для обеих траекторий и что на участке от $\tau - \Delta t$ до τ оптимальная траектория описывается уравнением

$$\frac{dx}{dt} = \varphi(x, u_{\text{опт}}) \quad (\text{VII}, 10)$$

а неоптимальная

$$\frac{dx^*}{dt} = \varphi(x^*, u^*) \quad (\text{VII}, 11)$$

Для малого значения Δt величины $x(\tau)$ и $x^*(\tau)$ могут быть рассчитаны из уравнений (VII, 10) и (VII, 11) с помощью прибли-

женных разностных выражений для производных:

$$x(\tau) = x(\tau - \Delta\tau) + \Phi[x(\tau - \Delta\tau), u_{\text{опт}}(\tau - \Delta\tau)] \Delta\tau \quad (\text{VII}, 12)$$

$$x^*(\tau) = x(\tau - \Delta\tau) + \Phi[x(\tau - \Delta\tau), u^*] \Delta\tau \quad (\text{VII}, 13)$$

Соотношения (VII, 12) и (VII, 13) позволяют найти отклонение неоптимальной траектории от оптимальной в момент времени τ , которое с учетом выражения (VII, 9) можно записать как

$$x^*(\tau) - x(\tau) = \varepsilon M \{ \Phi[x(\tau - \varepsilon M), u^*] - \Phi[x(\tau - \varepsilon M), u_{\text{опт}}(\tau - \varepsilon M)] \} \quad (\text{VII}, 14)$$

Если считать параметр ε бесконечно малой величиной, что, согласно выражению (VII, 9), соответствует бесконечно малому времени действия игольчатой вариации управления, то и отклонение неоптимальной траектории в момент времени τ от оптимальной, определяемое выражением (VII, 14), будет бесконечно мало. Поэтому можно принять, что и для любого последующего момента времени $t \geq \tau$ отклонение неоптимальной траектории от оптимальной будет иметь порядок малости, равный порядку малости параметра ε . Если теперь ввести в рассмотрение вектор отклонения неоптимальной траектории от оптимальной и представить его как

$$\varepsilon \delta x(t) = x^*(t) - x(t) \quad (\text{VII}, 15)$$

то величина $\varepsilon \delta x$ окажется бесконечно малой для всего участка траектории от $t = \tau$ до $t = \tau_k$.

Величина $\delta x(t)$ называется *вариацией траектории*. Для нее могут быть получены уравнения, описывающие закон ее изменения по всей траектории. Для вывода этих уравнений представим соотношение (VII, 15) в виде:

$$x^*(t) = x(t) + \varepsilon \delta x(t) \quad (\text{VII}, 16)$$

Поскольку на участке $\tau \leq t \leq \tau_k$ используется оптимальное управление $u_{\text{опт}}(t)$, то уравнение, описывающее неоптимальную траекторию, имеет на этом участке форму:

$$\frac{dx^*}{dt} = \Phi(x^*, u_{\text{опт}}) \quad (\text{VII}, 17)$$

Подставляя в уравнение (VII, 17) величину x^* из выражения (VII, 16), получим:

$$\frac{d(x + \varepsilon \delta x)}{dt} = \Phi(x + \varepsilon \delta x, u_{\text{опт}}) \quad (\text{VII}, 18)$$

Правую часть уравнения (VII, 18) можно разложить в ряд по степеням малого параметра ε . Оставляя в разложении члены не выше первого порядка по ε и переходя от векторной формы записи системы уравнений к обычной, найдем:

$$\begin{aligned} \frac{d(x_i + \varepsilon \delta x_i)}{dt} &= \varphi_i(x_1, \dots, x_m, u_{\text{опт}}) + \\ &+ \sum_{k=1}^m \frac{\partial \varphi_i(x_1, \dots, x_m, u_{\text{опт}})}{\partial x_k} \varepsilon \delta x_k \quad i = 1, \dots, m \end{aligned} \quad (\text{VII}, 19)$$

Принимая во внимание, что при оптимальном управлении

$$\frac{dx_i}{dt} = \varphi_i(x_1, \dots, x_m, u_{\text{опт}}) \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{VII, 20})$$

после почленного вычитания уравнений системы (VII, 20) из уравнений (VII, 19) и сокращения на ϵ получим:

$$\frac{d(\delta x_i)}{dt} = \sum_{k=1}^m \frac{\partial \varphi_i(x_1, \dots, x_m, u_{\text{опт}})}{\partial x_k} \delta x_k \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{VII, 21})$$

Система уравнений (VII, 21) является системой линейных обыкновенных дифференциальных уравнений относительно неизвестных δx_k , где величины

$$\frac{\partial \varphi_i(x_1, \dots, x_m, u_{\text{опт}})}{\partial x_k}$$

могут рассматриваться как переменные коэффициенты, определяемые решением системы (VII, 20), и называется системой уравнений в вариациях. Ее можно также представить в векторной форме, если считать правую часть этой системы как произведение матрицы

$$A = \begin{bmatrix} \frac{\partial \varphi_1}{\partial x_1} & \frac{\partial \varphi_1}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial \varphi_1}{\partial x_m} \\ \frac{\partial \varphi_2}{\partial x_1} & \frac{\partial \varphi_2}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial \varphi_2}{\partial x_m} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial \varphi_m}{\partial x_1} & \frac{\partial \varphi_m}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial \varphi_m}{\partial x_m} \end{bmatrix} \quad (\text{VII, 22})$$

на вектор-столбец

$$\delta x = \begin{bmatrix} \delta x_1 \\ \delta x_2 \\ \vdots \\ \delta x_m \end{bmatrix} \quad (\text{VII, 23})$$

Таким образом, с учетом обозначений (VII, 22) и (VII, 23) система уравнений в вариациях (VII, 21) запишется так

$$\frac{d(\delta x)}{dt} = A \delta x \quad (\text{VII, 24})$$

При вычислении коэффициентов системы уравнений в вариациях, т. е. производных $d\varphi_i/dx_k$, необходимо иметь в виду, что эти производные изменяются вдоль всей траектории и характеризуются значениями $x_i(t)$ и $u_{\text{опт}}(t)$, соответствующими оптимальной траектории процесса.

Система уравнений в вариациях может быть проинтегрирована с начальными условиями, которые определяются величиной вариации

ции в момент времени $t = \tau$. Значение $\delta x(\tau)$ можно найти из соотношений (VII, 14) и (IV, 15):

$$\delta x(\tau) = M \{ \varphi [x(\tau - \varepsilon M), u^*] - \varphi [x(\tau - \varepsilon M), u_{\text{опт}}(\tau - \varepsilon M)] \} \quad (\text{VII, 25})$$

В пределе при $\varepsilon \rightarrow 0$ выражение (VII, 25) принимает вид:

$$\delta x(\tau) = M \{ \varphi [x(\tau), u^*] - \varphi [x(\tau), u_{\text{опт}}(\tau)] \} \quad (\text{VII, 26})$$

В результате интегрирования системы уравнений (VII, 21) или, что то же самое, системы (VII, 24) может быть получен вектор вариации конца траектории при игольчатой вариации управляющего воздействия в момент времени $t = \tau$. Отклонение конечной точки неоптимальной траектории от конечной точки оптимальной траектории при этом описывается выражением:

$$x^*(\tau_k) - x(\tau_k) = \varepsilon \delta x(\tau_k) \quad (\text{VII, 27})$$

Система уравнений в вариациях как система линейных однородных уравнений обладает важным свойством, а именно: сумма любых двух ее решений, найденных при неодинаковых начальных условиях, также является решением. Таким образом, если начальное условие

$$\delta x(\tau_1) = M_1 \{ \varphi [x(\tau_1), u_1] - \varphi [x(\tau_1), u_{\text{опт}}(\tau_1)] \} \quad (\text{VII, 28})$$

определяет решение системы уравнений в вариациях

$$\delta x_1(t)$$

а начальное условие

$$\delta x(\tau_2) = M_2 \{ \varphi [x(\tau_2), u_2] - \varphi [x(\tau_2), u_{\text{опт}}(\tau_2)] \} \quad (\text{VII, 29})$$

характеризует решение

$$\delta x_2(t)$$

где τ_1 и τ_2 , вообще говоря, различные моменты времени, то и сумма этих решений

$$\delta x(t) = \delta x_1(t) + \delta x_2(t) \quad (\text{VII, 30})$$

также представляет собой решение системы уравнений в вариациях при использовании уже двух игольчатых вариаций управления в разные моменты времени.

В частности, для конечного момента времени τ_k на основании приведенного свойства можно утверждать, что любые два вектора вариации конечной точки $\varepsilon_1 \delta x_1(\tau_k)$ и $\varepsilon_2 \delta x_2(\tau_k)$ определяют новый вектор вариации точки

$$\varepsilon \delta x(\tau_k) = \varepsilon_1 \delta x_1(\tau_k) + \varepsilon_2 \delta x_2(\tau_k) \quad (\text{VII, 31})$$

который может быть получен с помощью двух игольчатых вариаций управления (рис. VII-7).

Можно показать, что через любую точку оптимальной траектории, соответствующую произвольному моменту времени t , в том числе и через конечную точку траектории $t = \tau_k$, проводится такая

гиперплоскость, что при любых игольчатых вариациях управления для моментов времени $\tau < t$ точки варьированных траекторий $\delta x(t)$ располагаются по одну сторону этой гиперплоскости, причем именно с той стороны, с которой к ней подходит оптимальная траектория.

Доказательство данного утверждения в общем случае фазового пространства произвольной размерности m достаточно сложно [5],

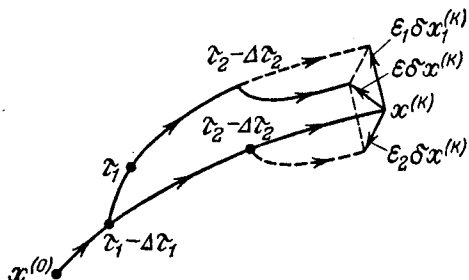


Рис. VII-7. Результирующая вариация конечной точки траектории при использовании двух игольчатых вариаций оптимального управления.

поэтому ограничимся лишь вариантом, когда размерность фазового пространства равна двум и, следовательно, гиперплоскость изображается в нем прямой линией l (рис. VII-8).

Предположим, что такой «отсекающей» гиперплоскости не существует. В случае двухмерного пространства это означает, что для любой прямой линии l , проведенной через точку траектории

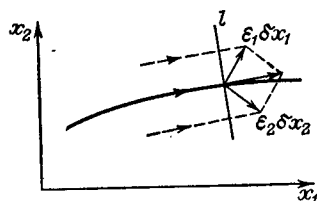


Рис. VII-8. К объяснению существования «отсекающей» гиперплоскости в любой точке траектории.

$x(t)$ (рис. VII-8), всегда имеются такие варьированные траектории, которые пересекают указанную линию по обе стороны от точки $x(t)$. Поскольку известно, что сумма решений системы уравнений в вариациях также является ее решением, всегда можно выбрать величины ϵ_1 и ϵ_2 так, чтобы вектор суммы

$$\epsilon \delta x(t) = \epsilon_1 \delta x_1(t) + \epsilon_2 \delta x_2(t) \quad (\text{VII}, 32)$$

попал на оптимальную траекторию, но уже за данной линией. Отсюда следует, что за время t можно продвинуться по оптимальной траектории несколько дальше, чем при применении оптимального управления на всем промежутке времени $[0, t]$, если «испортить» это управление двумя игольчатыми вариациями. Таким образом получается противоречие. Остается принять, что «отсекающая» гиперплоскость существует.

Разумеется, что приведенные рассуждения не могут претендовать на строгость даже в случае двухмерного пространства, так

как вариации траектории вычисляются лишь с точностью до членов первого порядка малости по ϵ . Строгое доказательство существования «отсекающей» гиперплоскости можно найти в литературе [5].

Известно [13], что положение плоскости в пространстве полностью характеризуется заданием вектора ее нормали λ , т. е. вектора, ортогонального данной плоскости. Определим вектор нормали «отсекающей» плоскости как вектор, ориентированный в направлении движения по оптимальной траектории. Тогда для любого вектора вариации этой траектории справедливо соотношение

$$(\delta x(t), \lambda(t)) \leq 0 \quad (\text{VII}, 33)$$

которое означает, что скалярное произведение вектора вариации $\delta x(t)$ на вектор нормали «отсекающей» плоскости $\lambda(t)$ является неположительной величиной. Это вытекает из того, что любой вектор вариации $\delta x(t)$ лежит по другую сторону плоскости от вектора ее нормали $\lambda(t)$ и, следовательно, образует с вектором $\lambda(t)$ тупой угол, из-за чего скалярное произведение (VII, 33) не может быть положительным.

Соотношение (VII, 33) справедливо для любой точки оптимальной траектории, в том числе и для точки, соответствующей моменту времени $t = \tau$, в которой проводится игольчатая вариация управления. Однако в точке $t = \tau$ вектор вариации траектории характеризуется выражением (VII, 26). Поэтому, подставляя из него величину $\delta x(\tau)$ в соотношение (VII, 33), получим

$$(M \{ \Phi[x(\tau), u] - \Phi[x(\tau), u_{\text{опт}}(\tau)] \}, \lambda(\tau)) \leq 0 \quad (\text{VII}, 34)$$

Так как величина M по определению положительна, соотношение (VII, 34) может быть также записано в виде:

$$(\{ \Phi[x(t), u] - \Phi[x(t), u_{\text{опт}}(t)] \}, \lambda(t)) \leq 0 \quad (\text{VII}, 35)$$

Вектор нормали «отсекающей» плоскости $\lambda(t)$ не может иметь все компоненты, одновременно равные нулю, поэтому неравенство (VII, 35) переходит в равенство лишь тогда, когда выполняется условие

$$(\Phi[x(t), u], \lambda(t)) = (\Phi[x(\tau), u_{\text{опт}}(t)], \lambda(t)) \quad (\text{VII}, 36)$$

откуда следует

$$u = u_{\text{опт}}(t) \quad (\text{VII}, 37)$$

Таким образом, если величина (Φ, λ) рассматривается как функция управляющего воздействия u , то соотношения (VII, 35) и (VII, 36) означают, что она достигает своего максимального значения при оптимальном управлении (VII, 37). Следовательно, соотношение (VII, 35) можно также представить в виде

$$(\Phi[x(t), u_{\text{опт}}(t)], \lambda(t)) = \max_{u \in U} (\Phi[x(t), u], \lambda(t)) \quad (\text{VII}, 38)$$

где максимум ищется по всем возможным значениям управляющего воздействия из допустимой области его изменения U .

Полученное соотношение (VII, 38) и является аналитическим выражением принципа максимума. Оно означает, что в каждой точке траектории оптимальное управляющее воздействие должно выбираться из условия достижения максимального значения величины скалярного произведения $[\varphi(x, u), \lambda]$. При этом оптимальное управление определяется как функция величин x и λ , т. е. как функция положения точки на траектории $x(t)$ и вектора нормали «отсекающей» плоскости $\lambda(t)$, проведенной через данную точку.

Для использования соотношения (VII, 38) при решении оптимальной задачи необходимо еще иметь уравнения, описывающие изменение вектора λ вдоль траектории. Для вывода этих уравнений потребуем дополнительно, чтобы скалярное произведение (VII, 33) было постоянной неположительной величиной для всей траектории, т. е.

$$[\delta x(t), \lambda(t)] = \text{const} \leq 0 \quad (\text{VII, 39})$$

Дифференцируя выражение (VII, 39) по t , получим:

$$\left(\frac{d(\delta x)}{dt}, \lambda \right) + \left(\delta x, \frac{d\lambda}{dt} \right) = 0 \quad (\text{VII, 40})$$

Подставляя выражение для производной $d(\delta x)/dt$ из векторного уравнения (VII, 24) в соотношение (VII, 40), можно записать его в виде

$$(A \delta x, \lambda) + \left(\delta x, \frac{d\lambda}{dt} \right) = 0; \quad (\text{VII, 41})$$

или в соответствии с правилом матричных операций

$$(A \delta x)^T \lambda + \delta x^T \frac{d\lambda}{dt} = 0$$

где первое слагаемое представляет собой скалярное произведение вектора $A \delta x$ на вектор λ . Вектор $(A \delta x)^T$ может быть преобразован согласно правилу перестановки матриц в их произведении при транспонировании (см. Приложение I, стр. 564):

$$(A \delta x)^T = \delta x^T A^T \quad (\text{VII, 42})$$

причем A^T — транспонированная матрица A , а δx^T — вектор-строка.

В результате соотношение (VII, 41) можно записать как

$$\delta x \left(A^T \lambda + \frac{d\lambda}{dt} \right) = 0 \quad (\text{VII, 43})$$

Поскольку величина δx есть произвольный вектор вариации, соотношение (VII, 43) может выполняться лишь в том случае, если

$$\frac{d\lambda}{dt} = -A^T \lambda \quad (\text{VII, 44})$$

Таким образом, уравнение (VII, 44), полученное в векторной форме, определяет изменение вектора λ вдоль траектории процесса

и в обычной форме записи соответствует следующей системе уравнений:

$$\frac{d\lambda_i(t)}{dt} = - \sum_{k=1}^m \frac{\partial \varphi_k[x(t), u_{\text{опт}}(t)]}{\partial x_i} \lambda_k(t) \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{VII}, 45)$$

Система (VII, 45) представляет собой однородную систему линейных дифференциальных уравнений с переменными коэффициентами. Вследствие однородности общее решение этой системы находится с точностью до произвольного постоянного множителя. В частном случае, когда данный множитель принимается равным нулю, получается тривиальное (нулевое) решение.

Итак, для оптимизации процесса, описываемого системой уравнений (VII, 8), в смысле наискорейшего перевода его из заданного начального состояния $x^{(0)}$ в заданное конечное $x^{(k)}$ можно воспользоваться условием (VII, 38), в котором для определения компонентов вектора $\lambda(t)$ применяется нетривиальное решение системы уравнений (VII, 45).

При произвольном числе управляющих воздействий, т. е. когда размерность вектора управления $r \geq 1$, найденные выше соотношения будут справедливы, если в уравнениях (VII, 8) и (VII, 45) и в условии (VII, 38) управляющее воздействие u заменить на вектор управления u .

Принцип максимума можно записать в более компактной форме, если в условии (VII, 38) величину скалярного произведения обозначить как

$$H[\lambda(t), x(t), u] = (\varphi[x(t), u], \lambda(t)) = \sum_{k=1}^m \lambda_k(t) \varphi_k[x(t), u] \quad (\text{VII}, 46)$$

Функция $H(\lambda, x, u)$ при этом рассматривается как функция векторных переменных λ , x и u и условие (VII, 38) может быть представлено в виде

$$H[\lambda(t), x(t), u_{\text{опт}}(t)] = \max_{u \in U} H[\lambda(t), x(t), u] \quad (\text{VII}, 47)$$

где максимум функции H ищется по всем возможным значениям вектора управления из области его определения U .

Переменные x_i , являющиеся компонентами вектора состояния процесса x , находятся решением системы уравнений (VII, 1), а компоненты вектора λ_i — решением системы:

$$\frac{d\lambda_i(t)}{dt} = - \sum_{k=1}^m \frac{\partial \varphi_k[x(t), u_{\text{опт}}(t)]}{\partial x_i} \lambda_k(t) \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{VII}, 48)$$

С помощью функции H систему уравнений (VII, 1) можно также записать в следующей компактной форме

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \lambda_i} \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{VII}, 49)$$

или с использованием векторной формы записи

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \lambda} \quad (\text{VII}, 50)$$

Нетрудно показать, что система уравнений (VII, 48) с учетом функции H представляется как

$$\frac{d\lambda_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_i} \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{VII}, 51)$$

или в векторной форме

$$\frac{d\lambda}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x} \quad (\text{VII}, 52)$$

Согласно выражениям (VII, 50) и (VII, 52) функцию H иногда называют *гамильтонианом*, подчеркивая тем самым ее сходство с гамильтонианом уравнений движения материальной точки, в которых роль вектора λ выполняет вектор импульса движения.

Свойства функции H . Можно доказать [5], что функция H , рассматриваемая как функция независимой переменной t , т. е. вдоль траектории процесса, при оптимальном управлении $u_{\text{опт}}(t)$ непрерывна и, кроме того, сохраняет постоянное значение вдоль всей траектории.

Отсылая читателя к доказательству непрерывности [5], рассмотрим лишь не очень строгое, но достаточно наглядное доказательство постоянства функции H . С этой целью проанализируем выражение для полной производной от функции H по независимой переменной t , которое имеет вид:

$$\frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \lambda} \cdot \frac{d\lambda}{dt} + \frac{\partial H}{\partial x} \cdot \frac{dx}{dt} + \frac{\partial H}{\partial u} \cdot \frac{du}{dt} \quad (\text{VII}, 53)$$

Принимая во внимание выражения (VII, 50) и (VII, 52) для производных $d\lambda/dt$ и dx/dt , нетрудно видеть, что первые два слагаемых в соотношении (VII, 53) взаимно сокращаются, в результате чего оно принимает вид:

$$\frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial u} \cdot \frac{du}{dt}. \quad (\text{VII}, 54)$$

Если оптимальное значение вектора управления $u_{\text{опт}}$ находится внутри области U , то максимальное значение функции H соответствует точке экстремума этой функции, для которой выполняется условие

$$\frac{\partial H}{\partial u} = 0 \quad (\text{VII}, 55)$$

эквивалентное в обычной форме записи системе уравнений

$$\frac{\partial H}{\partial u_l} = 0 \quad l = 1, \dots, r \quad (\text{VII}, 56)$$

Если же оптимальное управление находится на границе области U , заданной системой неравенств

$$a_l \leq u_l \leq b_l \quad l = 1, \dots, r \quad (\text{VII}, 57)$$

то выполняется условие

$$\frac{du}{dt} = 0 \quad (\text{VII}, 58)$$

В любом из отмеченных случаев с учетом соотношений (VII, 55) или (VII, 58) полная производная по t от функции H , определяемая выражением (VII, 54), равна нулю, откуда следует, что функция H имеет постоянное значение на оптимальной траектории, т. е.

$$H[\lambda(t), x(t), u_{\text{опт}}(t)] = \text{const} \quad (\text{VII}, 59)$$

Покажем теперь, что это значение, кроме того, неотрицательно. Для доказательства неотрицательности функции H рассмотрим вариацию конечной точки траектории $\varepsilon \delta x(\tau_k)$, обусловленную уменьшением времени τ_k на величину $\Delta\tau = \varepsilon M$, где ε — бесконечно малый положительный параметр. Вариация $\varepsilon \delta x(\tau_k)$ при этом выражается соотношением:

$$\varepsilon \delta x(\tau_k) = x(\tau_k - \varepsilon M) - x(\tau_k) \quad (\text{VII}, 60)$$

Представляя величину $x(\tau_k - \varepsilon M)$ в виде разложения в ряд по степеням ε с точностью до членов первого порядка малости по ε , можно записать выражение

$$x(\tau_k - \varepsilon M) = x(\tau_k) - \varepsilon M \frac{dx(\tau_k)}{dt} \quad (\text{VII}, 61)$$

подстановка которого в соотношение (VII, 60) позволяет найти

$$\delta x(\tau_k) = -M \frac{dx(\tau_k)}{dt} \quad (\text{VII}, 62)$$

или с учетом выражения для производной dx/dt из уравнения (VII, 2)

$$\delta x(\tau_k) = -M\varphi[x(\tau_k), u_{\text{опт}}(\tau_k)] \quad (\text{VII}, 63)$$

Поскольку вектор вариации конечной точки $\varepsilon \delta x(\tau_k)$ и вектор нормали «отсекающей» плоскости $\lambda(\tau_k)$ расположены по разные стороны от нее, скалярное произведение этих векторов должно быть отрицательным, т. е. с учетом выражения (VII, 63) получим:

$$-(\varphi[x(\tau_k), u_{\text{опт}}(\tau_k)], \lambda(\tau_k)) \leq 0 \quad (\text{VII}, 64)$$

Однако величина $(\varphi[x(\tau_k), u_{\text{опт}}(\tau_k)], \lambda(\tau_k))$ представляет собой не что иное, как значение функции H в конечной точке траектории. Поэтому из соотношения (VII, 64) следует, что в ней

$$H[\lambda(\tau_k), x(\tau_k), u_{\text{опт}}(\tau_k)] \geq 0 \quad (\text{VII}, 65)$$

Кроме того, ввиду постоянства функции H вдоль всей траектории для любых значений t выполняется условие:

$$H[\lambda(t), x(t), u_{\text{опт}}(t)] = H[\lambda(\tau_k), x(\tau_k), u_{\text{опт}}(\tau_k)] \geq 0 \quad (\text{VII}, 66)$$

Итак, если управляемый процесс, описываемый системой дифференциальных уравнений

$$\frac{dx_i(t)}{dt} = \varphi_i[x(t), u(t)] \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{VII}, 1)$$

при использовании оптимального управления $u_{\text{опт}}(t)$ за минимально возможное время $\tau_k = t^{(k)} - t^{(0)}$ переводится из начального состояния

$$x(t^{(0)}) = x^{(0)} \quad (\text{VII}, 3)$$

в конечное

$$x(t^{(k)}) = x^{(k)} \quad (\text{VII}, 4)$$

то принцип максимума утверждает следующее.

Существует такая функция H , определяемая соотношением

$$H[\lambda(t), x(t), u] = \sum_{i=1}^m \lambda_i(t) \varphi_i[x(t), u] \quad (\text{VII}, 46)$$

где переменные $\lambda_i(t)$ удовлетворяют системе уравнений

$$\frac{d\lambda_i(t)}{dt} = - \sum_{k=1}^m \lambda_k(t) \frac{\partial \varphi_k[x(t), u_{\text{опт}}(t)]}{\partial x_i} \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{VII}, 48)$$

которая принимает максимальное значение на оптимальной траектории, т. е.

$$H[\lambda(t), x(t), u_{\text{опт}}(t)] = \max_{u \in U} H[\lambda(t), x(t), u] \quad (\text{VII}, 47)$$

причем это значение постоянно и неотрицательно вдоль всей траектории процесса

$$H[\lambda(t), x(t), u_{\text{опт}}(t)] = H[\lambda(t^{(k)}), x(t^{(k)}), u_{\text{опт}}(t^{(k)})] \geq 0 \quad (\text{VII}, 66)$$

В приведенной формулировке не содержится никаких сведений о том, будут ли вообще существовать оптимальные управления и траектория и как их найти. Тем самым принцип максимума в данной формулировке представляет собой лишь *необходимое условие* оптимальности. Однако показано [5], что при соблюдении некоторых добавочных ограничений на оптимизируемый процесс, которые, как правило, оказываются выполненными при решении практических задач, принцип максимума является также и *достаточным условием* оптимальности. Другими словами, если оптимальное управление найдено с использованием условия (VII, 47), то это управление действительно оптимальное и никакой дополнительной проверки оптимальности не требуется.

Принцип максимума для задач с критерием оптимальности, заданным в виде функционала

Выше неоднократно отмечалось (см., например, стр. 206), что значительное число оптимальных задач может быть сформулировано как задачи минимизации или максимизации функционала:

$$I = \int_{t^{(0)}}^{t^{(k)}} \varphi_0(x, u) dt \quad (\text{VII, 67})$$

Указывалось также (стр. 312), что задача о быстродействии является частным случаем более общей задачи о минимизации функционала (VII, 67), когда $\varphi_0 \equiv 1$. Аналогично целый ряд задач, в которых требуется получить минимальное или максимальное значение одной или заданной функции нескольких переменных состояния в конце процесса, представляет собой частный случай задачи с функционалом (VII, 67). Так, например, если нужно найти минимальное значение переменной x_i при $t = t^{(k)}$, то оптимальную задачу можно сформулировать как задачу минимизации функционала

$$I = \int_{t^{(0)}}^{t^{(k)}} \varphi_i(x, u) dt \quad (\text{VII, 68})$$

который, как легко убедиться, равен

$$I = \int_{t^{(0)}}^{t^{(k)}} \frac{dx_i}{dt} dt = x_i(t^{(k)}) - x_i(t^{(0)}) \quad (\text{VII, 69})$$

Таким образом, при решении задач минимизации функционала (VII, 68) решается задача минимизации разности между конечным и начальным значениями переменной x_i , что при заданном начальном значении $x_i(t^{(0)})$ соответствует минимизации конечного значения $x_i(t^{(k)})$.

Можно показать, что задача минимизации (или максимизации) функционала (VII, 67) может быть сведена к рассмотренной выше задаче о быстродействии. Доказательство этого утверждения можно найти в литературе [4] для произвольного вида подынтегрального выражения функционала (VII, 67), а ниже приведен вывод конечных соотношений принципа максимума для случая, когда подынтегральная функция $\varphi_0(x, u)$ в выражении функционала (VII, 67) является положительной и ограниченной функцией для всех значений x и u .

В выражении функционала (VII, 67) пределы интегрирования могут быть заданы или нет в исходной постановке оптимальной задачи. Чтобы охватить оба эти варианта, в указанном выводе принимается, что значения $t^{(0)}$ и $t^{(k)}$ не фиксированы, но к системе

уравнений математического описания оптимизируемого процесса добавлено еще одно уравнение для дополнительной переменной $x_{m+1} \equiv t$:

$$\frac{dx_{m+1}}{dt} = 1$$

Тогда оптимальные задачи с заданными и неопределенными пределами интегрирования в выражении функционала (VII, 67) будут различаться между собой только заданием или отсутствием граничных условий для переменной x_{m+1} . Более детально этот вопрос рассмотрен при обсуждении вычислительных аспектов принципа максимума (см. стр. 340).

С учетом уравнения для переменной x_{m+1} будем считать, что система уравнений математического описания оптимизируемого процесса имеет вид

$$\frac{dx_i}{dt} = \varphi_i(\tilde{x}, u) \quad i = 1, \dots, m+1 \quad (\text{VII, 70})$$

где через $\tilde{x}$ обозначен вектор:

$$\tilde{x} = (x_1, x_2, \dots, x_{m+1})$$

Для того чтобы свести задачу минимизации функционала (VII, 67) к приведенной выше задаче о быстродействии, вместо независимой переменной t введем новую независимую переменную ω , которую определим соотношением:

$$\omega = \int_{t^{(0)}}^{t^{(k)}} \varphi_0(\tilde{x}, u) dt = \omega(t) \quad (\text{VII, 71})$$

Нетрудно видеть, что значение переменной ω при $t = t^{(k)}$ совпадает с выражением функционала (VII, 67).

Поскольку предполагается, что функция $\varphi_0(x, u)$ положительна, переменная ω будет монотонно возрастающей функцией t .

Следовательно, существует однозначная обратная функция

$$t = t(\omega) \quad (\text{VII, 72})$$

что позволяет осуществить замену переменных и вместо независимой переменной t в уравнениях математического описания оптимизируемого процесса (VII, 70) ввести переменную ω .

С учетом соотношения (VII, 72) переменные x и u в уравнениях математического описания процесса при этом будут рассматриваться как функции переменной ω , т. е.

$$x[t(\omega)] \quad u[t(\omega)] \quad (\text{VII, 73})$$

Кроме того, дифференцированием соотношения (VII, 71) можно найти

$$d\omega = \varphi_0[\tilde{x}(t), u(t)] dt \quad (\text{VII, 74})$$

откуда, принимая во внимание зависимость (VII, 72), получим:

$$dt = \frac{d\omega}{\varphi_0 [\tilde{x}(\omega), u(\omega)]} \quad (\text{VII, 75})$$

Теперь с учетом выражения (VII, 75) система уравнений математического описания процесса (VII, 70) может быть представлена как

$$\frac{dx_i}{d\omega} = \frac{\varphi_i [\tilde{x}(\omega), u(\omega)]}{\varphi_0 [\tilde{x}(\omega), u(\omega)]} \quad i = 1, \dots, m+1 \quad (\text{VII, 76})$$

Для системы уравнений (VII, 76) уже можно применить полученную выше формулировку принципа максимума для задачи о быстродействии, которая вследствие переменных (VII, 71) эквивалентна задаче минимизации функционала (VII, 67).

Запишем для системы уравнений (VII, 76) функцию H :

$$H[\tilde{\lambda}(\omega), \tilde{x}(\omega), u] = \sum_{k=1}^{m+1} \lambda_k(\omega) \frac{\varphi_k[\tilde{x}(\omega), u]}{\varphi_0[\tilde{x}(\omega), u]} \quad (\text{VII, 77})$$

Согласно результатам, найденным в случае задачи о быстродействии, эта функция должна достигать максимального значения на оптимальной траектории

$$H[\tilde{\lambda}(\omega), \tilde{x}(\omega), u_{\text{опт}}(\omega)] = \max_{u \in U} H[\tilde{\lambda}(\omega), \tilde{x}(\omega), u] \quad (\text{VII, 78})$$

и, кроме того, должна быть на ней постоянной неотрицательной величиной:

$$H[\tilde{\lambda}(\omega), \tilde{x}(\omega), u_{\text{опт}}(\omega)] \geq 0 \quad (\text{VII, 79})$$

Функции $\lambda_i(\omega)$ ($i = 1, \dots, m+1$) при этом удовлетворяют системе уравнений:

$$\frac{d\lambda_i}{d\omega} = -\frac{\partial H}{\partial x_i} \quad i = 1, \dots, m+1 \quad (\text{VII, 80})$$

Воспользовавшись выражением (VII, 77), вычислим правые части уравнений (VII, 80):

$$\begin{aligned} \frac{\partial H}{\partial x_i} &= \frac{1}{\varphi_0} \sum_{k=1}^{m+1} \left(\lambda_k \frac{\partial \varphi_k}{\partial x_i} - \frac{\varphi_k}{\varphi_0} \frac{\partial \varphi_0}{\partial x_i} \right) = \frac{1}{\varphi_0} \left(\sum_{k=1}^{m+1} \lambda_k \frac{\partial \varphi_k}{\partial x_i} - \frac{\partial \varphi_0}{\partial x_i} \sum_{k=1}^{m+1} \lambda_k \frac{\varphi_k}{\varphi_0} \right) = \\ &= \frac{1}{\varphi_0} \left(\sum_{k=1}^{m+1} \lambda_k \frac{\partial \varphi_k}{\partial x_i} - \frac{\partial \varphi_0}{\partial x_i} H \right) \end{aligned} \quad (\text{VII, 81})$$

Следовательно:

$$\frac{d\lambda_i}{d\omega} = -\frac{1}{\varphi_0} \left(\sum_{k=1}^{m+1} \lambda_k \frac{\partial \varphi_k}{\partial x_i} - H \frac{\partial \varphi_0}{\partial x_i} \right) \quad i = 1, \dots, m+1 \quad (\text{VII, 82})$$

Вид правых частей уравнений (VII, 82) подсказывает ввести в рассмотрение величину

$$\lambda_0 = -H[\tilde{\lambda}(\omega), \tilde{x}(\omega), u_{\text{опт}}(\omega)] \quad (\text{VII}, 83)$$

которая равна неположительной константе, т. е.

$$\lambda_0 \leq 0 \quad (\text{VII}, 84)$$

Это позволяет записать уравнения (VII, 82) в более компактной форме:

$$\frac{d\lambda_i}{d\omega} = -\frac{1}{\varphi_0} \sum_{k=0}^{m+1} \lambda_k \frac{\partial \varphi_k}{\partial x_i} \quad (\text{VII}, 85)$$

С учетом выражения для функции H (VII, 77) и соотношения (VII, 83) условие максимума (VII, 78) может быть также представлено как

$$-\lambda_0 = \max_{u \in U} \sum_{k=1}^{m+1} \lambda_k(\omega) \frac{\varphi_k[\tilde{x}(\omega), u]}{\varphi_0[\tilde{x}(\omega), u]} \quad (\text{VII}, 86)$$

Вводя константу λ_0 в соотношение (VII, 86) под знак максимума, его можно также переписать в виде:

$$\max_{u \in U} \left\{ \frac{1}{\varphi_0[\tilde{x}(\omega), u]} \sum_{k=0}^{m+1} \lambda_k(\omega) \varphi_k[\tilde{x}(\omega), u] \right\} = 0 \quad (\text{VII}, 87)$$

Поскольку функция $\varphi_0[x, u]$ всюду положительна и ограничена, соотношение (VII, 87) может быть выполнено только в том случае, если равна нулю сумма в выражении под знаком максимума. Таким образом:

$$\max_{u \in U} \left\{ \sum_{k=0}^{m+1} \lambda_k(\omega) \varphi_k[\tilde{x}(\omega), u] \right\} = 0 \quad (\text{VII}, 88)$$

Если теперь ввести в рассмотрение функцию

$$\tilde{H}[\lambda_0, \tilde{\lambda}(\omega), \tilde{x}(\omega), u] = \sum_{k=0}^{m+1} \lambda_k(\omega) \varphi_k[\tilde{x}(\omega), u] \quad (\text{VII}, 89)$$

то соотношение максимума (VII, 88) примет вид:

$$\tilde{H}[\lambda_0, \tilde{\lambda}(\omega), \tilde{x}(\omega), u_{\text{опт}}(\omega)] = \max_{u \in U} \tilde{H}[\lambda_0, \tilde{\lambda}(\omega), \tilde{x}(\omega), u] = 0 \quad (\text{VII}, 90)$$

Так как выбор оптимального уравнения в соотношении (VII, 90) не зависит от переменной ω , а определяется лишь значениями $\tilde{\lambda}(\omega)$ и $\tilde{x}(\omega)$, то можно вернуться к исходной переменной t , в результате чего получим

$$\tilde{H}[\lambda_0, \tilde{\lambda}(t), \tilde{x}(t), u_{\text{опт}}(t)] = \max_{u \in U} \tilde{H}[\lambda_0, \tilde{\lambda}(t), \tilde{x}(t), u] = 0 \quad (\text{VII}, 91)$$

где функция $\tilde{H}$ имеет вид:

$$\tilde{H}[\lambda_0, \tilde{\lambda}(t), \tilde{x}(t), u] = \sum_{k=0}^{m+1} \lambda_k(t) \varphi_k[\tilde{x}(t), u] \quad (\text{VII}, 92)$$

В выражении (VII, 92) величины λ_i ($i = 1, \dots, m+1$) рассматриваются как функции независимой переменной t . Уравнения, описывающие изменение величин λ_i в зависимости от t , могут быть получены из системы уравнений (VII, 82), если принять во внимание выражение (VII, 74), определяющее дифференциал $d\omega$ через дифференциал dt , что дает:

$$\frac{d\lambda_i}{dt} = - \sum_{k=0}^{n+1} \lambda_k(t) \frac{\partial \varphi_k[\tilde{x}(t), u_{\text{опт}}(t)]}{\partial x_i} \quad i = 1, \dots, m+1 \quad (\text{VII}, 93)$$

Систему уравнений (VII, 93) можно также записать с учетом функции $\tilde{H}$ как

$$\frac{d\lambda_i}{dt} = - \frac{\partial \tilde{H}}{\partial x_i} \quad i = 1, \dots, m+1 \quad (\text{VII}, 94)$$

Таким образом установлено, что если для процесса, математическое описание которого имеет вид системы уравнений (VII, 70), известно оптимальное управление $u_{\text{опт}}(t)$, переводящее процесс из начального состояния $\tilde{x}^{(0)}$ в конечное $\tilde{x}^{(k)}$ с минимальным значением функционала (VII, 67), то существуют такая неположительная константа λ_0 и такой набор функций $\lambda_i(t)$ ($i = 1, \dots, m+1$), удовлетворяющих системе уравнений (VII, 93), что функция $\tilde{H}$, определяемая выражением (VII, 92), достигает своего максимального значения, тождественно равного нулю, на оптимальной траектории. Другими словами, выполняется соотношение максимума (VII, 91).

Граничные условия

Соотношение максимума (VII, 47) или в более общем виде (VII, 91) позволяет определить оптимальное управление $u_{\text{опт}}(t)$ для любого значения независимой переменной t , если известны соответствующие величины $x(t)$ и $\lambda(t)$. Таким образом, для нахождения указанного управления в интервале изменения независимой переменной от $t^{(0)}$ до $t^{(k)}$ нужно знать значения переменных $x(t)$ и $\lambda(t)$ во всем исследуемом интервале. Другими словами, необходимо выполнить совместное интегрирование системы уравнений математического описания оптимизируемого процесса (VII, 1) или (VII, 70) и системы уравнений для функций $\lambda_i(t)$ (VII, 48) или (VII, 93).

Связь систем уравнений (VII, 1) и (VII, 48), с одной стороны, обусловлена тем, что коэффициенты системы (VII, 48) являются функциями переменных $x_i(t)$, а, с другой стороны, — тем, что оптимальное управление $u_{\text{опт}}(t)$, при котором должны интегрироваться

эти системы уравнений, согласно соотношению максимума (VII, 47) определяется как функция величин $x(t)$ и $\lambda(t)$.

Как известно [12], для интегрирования системы n дифференциальных уравнений первого порядка требуется задать n значений искоемых функций. Поэтому в рассматриваемой задаче оптимизации для интегрирования $2m$ уравнений систем (VII, 1) и (VII, 48) необходимо задание $2m$ граничных условий для функций $x_i(t)$ и $\lambda_i(t)$. Если начальное и конечное состояния процесса полностью заданы, т. е. заданы граничные условия для всех переменных состояний

$$x_i(t^{(0)}) = x_i^{(0)} \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{VII, 95})$$

$$x_i(t^{(k)}) = x_i^{(k)} \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{VII, 96})$$

то системы уравнений (VII, 1) и (VII, 48) в принципе можно проинтегрировать, поскольку общее число граничных условий (VII, 95) и (VII, 96) равно числу уравнений в этих системах.

Вместе с тем, как отмечалось выше, не всегда начальное и конечное состояния полностью определены заданием граничных условий вида (VII, 95) и (VII, 96). Иногда могут быть заданы лишь области возможных значений начального $x^{(0)}$ и конечного $x^{(k)}$ состояний, которые при этом ограничиваются соотношениями типа равенств или неравенств.

С примерами таких задач можно встретиться на практике при переводе процесса с одного режима на другой, когда новый режим характеризуется лишь некоторыми основными параметрами. Например, в случае реактора это может быть концентрация целевого продукта, тогда как концентрации остальных продуктов реакции могут быть и не заданы.

В задачах вариационного исчисления (стр. 214) недостаток граничных условий восполняется условиями трансверсальности, число которых равнялось числу недостающих граничных условий для уравнения Эйлера. Аналогичные условия трансверсальности можно получить и при использовании принципа максимума. Рассмотрим порядок вывода этих условий на примере задачи о быстродействии для процесса, описываемого системой трех уравнений, что соответствует изображению фазовой траектории в трехмерном пространстве переменных x_1, x_2 и x_3 .

Допустим, что начальное состояние процесса задано граничными условиями

$$x_i(t^{(0)}) = x_i^{(0)} \quad i = 1, 2, 3 \quad (\text{VII, 97})$$

а относительно конечного состояния известно, что оно должно располагаться на поверхности, уравнение которой имеет вид:

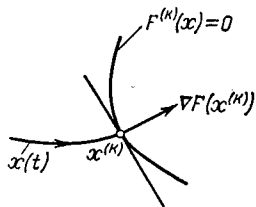
$$F^{(k)}(x_1, x_2, x_3) = 0 \quad (\text{VII, 98})$$

Ранее было отмечено (стр. 317), что в каждой точке оптимальной траектории, включая конечную, можно построить «отсекаю-

щую» плоскость, не пересекающуюся ни с одной траекторией, получаемой варьированием оптимального управления. Следовательно, в точке касания оптимальной траектории с поверхностью, определяемой уравнением (VII, 98), также может быть построена указанная плоскость, касательная к поверхности (VII, 98). В противном случае, т. е. если плоскость пересечется с поверхностью (VII, 98), можно так выбрать вариацию управления, что новая траектория коснется поверхности раньше оптимальной.

Условием касания плоскости с поверхностью является требование совпадения нормали плоскости с нормалью к поверхности в точке касания (рис. VII-9). Нормаль к поверхности, описываемой уравнением (VII, 98), совпадает с градиентом функции $F^{(k)}$, т. е., с одной стороны, вектор нормали n определяется в виде:

$$n = \text{grad } F^{(k)} = \left(\frac{\partial F^{(k)}}{\partial x_1}, \frac{\partial F^{(k)}}{\partial x_2}, \frac{\partial F^{(k)}}{\partial x_3} \right) \quad (\text{VII, 99})$$



С другой стороны, вектор нормали «отсекающей» плоскости есть не что иное, как вектор-функция:

$$\lambda(t) = [\lambda_1(t), \lambda_2(t), \lambda_3(t)] \quad (\text{VII, 100})$$

Рис. VII-9. К выводу условий трансверсальности.

Условия совпадения этих нормалей по направлению дают систему следующих соотношений

$$\lambda_i(t^{(k)}) = q \frac{\partial F^{(k)}[x(t^{(k)})]}{\partial x_i} \quad i = 1, 2, 3 \quad (\text{VII, 101})$$

которая в векторной форме может быть записана как

$$\lambda(t^{(k)}) = q \text{grad } F^{(k)}[x(t^{(k)})] \quad (\text{VII, 102})$$

причем q — некоторое постоянное число.

Очевидно, что условие (VII, 102) справедливо и при произвольном числе переменных состояния m .

Полученные условия (VII, 102) называются обычно условиями трансверсальности и дают недостающие соотношения для полного набора граничных условий систем уравнений (VII, 1) и (VII, 48). В дополнение к m начальным условиям типа (VII, 97) в данном случае соотношение (VII, 102) приводит к еще m условиям для конечной точки оптимальной траектории:

$$\lambda_i(t^{(k)}) = q \frac{\partial F^{(k)}[x(t^{(k)})]}{\partial x_i} \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{VII, 103})$$

Причем постоянная q определяется из условия, что конечная точка траектории лежит на заданной поверхности (VII, 98).

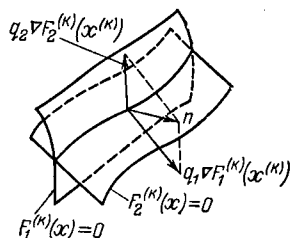
Пусть теперь вместо одного ограничения типа (VII, 98) задано несколько ограничений такого же типа

$$F_j^{(k)}(x) = 0 \quad j = 1, \dots, p \quad (\text{VII, 104})$$

что соответствует случаю, когда конечная точка траектории лежит на пересечении поверхностей, каждая из которых описывается одним из уравнений (VII, 104). Тогда необходимо, чтобы вектор $\lambda(t)$ был ортогональным пересечению этих поверхностей. Так, например, для трехмерного фазового пространства, когда требуется, чтобы конечная точка траектории удовлетворяла двум соотношениям

$$F_1^{(k)}(x_1, x_2, x_3) = 0 \quad F_2^{(k)}(x_1, x_2, x_3) = 0 \quad (\text{VII}, 105)$$

пересечением поверхностей, определяемых уравнениями (VII, 105), будет линия в фазовом пространстве (рис. VII-10), нормаль к которой можно выразить через нормали к поверхностям (VII, 105) с помощью уравнения:



$$n = q_1 \text{grad } F_1^{(k)} + q_2 \text{grad } F_2^{(k)} \quad (\text{VII}, 106)$$

Условие совпадения по направлению нормали (VII, 106) и вектора-функции $\lambda(t)$ дает при этом соотношения:

Рис. VII-10. Определение нормали к линии пересечения двух поверхностей.

$$\lambda_i(t^{(k)}) = q_1 \frac{\partial F_1^{(k)}[x(t^{(k)})]}{\partial x_i} + q_2 \frac{\partial F_2^{(k)}[x(t^{(k)})]}{\partial x_i} \quad i = 1, 2, 3 \quad (\text{VII}, 107)$$

которые должны выполняться совместно с уравнениями (VII, 105) в конечной точке оптимальной траектории.

Аналогично для произвольной размерности фазового пространства нормаль к пересечению поверхностей, заданных в m -мерном пространстве уравнениями (VII, 104), характеризуется выражением:

$$n = \sum_{j=1}^p q_j \text{grad } F_j^{(k)} \quad (\text{VII}, 108)$$

Условие совпадения направления этой нормали с направлением вектора-функции $\lambda(t)$ дает векторное равенство

$$\lambda(t^{(k)}) = \sum_{j=1}^p q_j \text{grad } F_j^{(k)}[x(t^{(k)})] \quad (\text{VII}, 109)$$

эквивалентное системе соотношений

$$\lambda_i(t^{(k)}) = \sum_{j=1}^p q_j \frac{\partial F_j^{(k)}[x(t^{(k)})]}{\partial x_i} \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{VII}, 110)$$

Система уравнений (VII, 110) совместно с уравнениями (VII, 104) приводит к $m + p$ условиям для конечной точки оптимальной траектории. После исключения p параметров q_j

Таким образом для конечных значений функций $\lambda_i(t)$ получим следующие условия:

$$\lambda_i(t^{(k)}) = q_i \quad i = 1, \dots, p \quad (\text{VII}, 117)$$

$$\lambda_i(t^{(k)}) = 0 \quad i = p + 1, \dots, m \quad (\text{VII}, 118)$$

Поскольку параметры q_i в соотношениях (VII, 117) не определены, эти соотношения не дают никакой дополнительной информации для решения оптимальной задачи. Условия же (VII, 118) совместно с условиями (VII, 114) составляют как раз m граничных условий для конечной точки оптимальной траектории, что позволяет с учетом m начальных условий (VII, 95) найти в точности $2m$ граничных условий, необходимых для интегрирования систем уравнений (VII, 1) и (VII, 48).

Аналогично можно рассмотреть также вариант, когда полностью не закреплена начальная точка оптимальной траектории.

Вычислительные аспекты принципа максимума

Рассмотрим методику решения оптимальной задачи с применением соотношений максимума (VII, 47), т. е. на примере задачи о быстродействии. В более общем случае минимизации функционала, когда нужно использовать соотношение максимума в форме (VII, 91), вычислительная процедура по существу не изменяется, за исключением ряда особенностей, которые отмечены ниже.

Итак, ставится задача отыскания оптимального управления для процесса, описываемого системой дифференциальных уравнений (VII, 1), которое переводит его из некоторого начального состояния в конечное, причем в общем случае оба состояния не обязательно фиксируются заданием всех переменных.

Поскольку оптимальное управление удовлетворяет в каждой точке траектории соотношению максимума (VII, 47), оно устанавливает связь данного управления с значениями $x(t)$ и $\lambda(t)$ в этой точке и, следовательно, его можно записать как

$$u_{\text{опт}}(t) = u_{\text{опт}}[\lambda(t), x(t)] \quad (\text{VII}, 119)$$

Выражение (VII, 119), разумеется, не всегда может быть получено в аналитическом виде и тогда его представляют в виде таблиц или графиков, соответствующих результатам численного решения задачи максимизации функции H выбором управляющих воздействий u_l ($l = 1, \dots, r$).

В частном случае, когда правые части системы уравнений математического описания процесса (VII, 1) относительно просты, для нахождения зависимости (VII, 119) можно использовать уравнения

$$\frac{\partial H}{\partial u_l} = 0 \quad l = 1, \dots, r \quad (\text{VII}, 120)$$

определяющие экстремальные точки функции H внутри допустимой области изменения управляющих воздействий u . При этом, естественно, выбираются только те решения системы уравнений (VII, 120), которые обеспечивают максимальное значение функции H . Кроме того, нужно учитывать, что оптимальное управление, максимизирующее функцию H , может также находиться и на границе допустимой области U .

Пример VII-1. Математическое описание процесса имеет вид уравнения:

$$\frac{dx}{dt} = u \quad (\text{VII, 121})$$

Определить оптимальное управление $u(t)$, переводящее процесс за минимальное время из заданного начального состояния $x^{(0)}$ в заданное конечное $x^{(k)}$, если диапазон возможных значений управляющего воздействия ограничен неравенствами:

$$-U \leq u \leq U \quad (\text{VII, 122})$$

Решение. В этом простейшем случае, конечно, нет необходимости применять математический аппарат принципа максимума, поскольку и так очевидно, что перевод процесса, описываемого уравнением (VII, 121), следует производить с максимальной скоростью изменения переменной x , т. е. с предельной величиной управляющего воздействия u , причем знак управления определяется тем, в каком направлении по оси x от начальной точки $x^{(0)}$ расположена конечная точка $x^{(k)}$. Однако на данном примере можно обсудить формальные приемы использования принципа максимума, которые неоднократно применяются в приведенных ниже примерах.

Составим функцию H для рассматриваемой оптимальной задачи:

$$H = \lambda \varphi(x, u) = \lambda u \quad (\text{VII, 123})$$

Дифференциальное уравнение для единственной функции λ при этом имеет вид

$$\frac{\partial \lambda}{\partial t} = - \frac{\partial H}{\partial x} \equiv 0 \quad (\text{VII, 124})$$

и решением его будет:

$$\lambda(t) = C_1 = \text{const} \quad (\text{VII, 125})$$

Подставляя значение λ (VII, 125) в выражение для функции (VII, 123), получим:

$$H = C_1 u \quad (\text{VII, 126})$$

Оптимальное управление $u_{\text{опт}}$ в данном случае не зависит от t и, очевидно, определяется знаком постоянной интегрирования C_1 . Если $C_1 > 0$, то оптимальное управление $u_{\text{опт}} = U$, если $C_1 < 0$, то $u_{\text{опт}} = -U$. Это обстоятельство удобно записать в следующей форме:

$$u_{\text{опт}} = U \operatorname{sgn} C_1 \quad (\text{VII, 127})$$

где $\operatorname{sgn} x$ — так называемая *функция знака*:

$$\operatorname{sgn} x = \begin{cases} 1 & x > 0 \\ 0 & x = 0 \\ -1 & x < 0 \end{cases} \quad (\text{VII, 128})$$

Подставляя выражение (VII, 127) в уравнение (VII, 121), находим:

$$\frac{dx}{dt} = U \operatorname{sgn} C_1 \quad (\text{VII, 129})$$

Поскольку правая часть уравнения (VII, 129) является постоянной величиной, оно может быть проинтегрировано и его решением будет:

$$x = (U \operatorname{sgn} C_1) t + C_2 \quad (\text{VII, 130})$$

Выражение (VII, 130) включает две постоянных интегрирования C_1 и C_2 , которые необходимо определить из заданных граничных условий для переменной x . Использование условия для начальной точки $x^{(0)}$, т. е. при $t = t^{(0)} = 0$, позволяет найти

$$C_2 = x^{(0)} \quad (\text{VII, 131})$$

после чего из условия для конечной точки $x^{(k)}$, т. е. при $t = t^{(k)}$, получим соотношение:

$$x^{(k)} = (U \operatorname{sgn} C_1) t^{(k)} + x^{(0)} \quad (\text{VII, 132})$$

Отсюда

$$C_1 = \operatorname{sgn} (x^{(k)} - x^{(0)}) \quad (\text{VII, 133})$$

$$\frac{|x^{(k)} - x^{(0)}|}{U t^{(k)}} = 1 \quad (\text{VII, 134})$$

Выражение (VII, 133) характеризует значение постоянной интегрирования C_1 , а уравнение (VII, 134) позволяет найти время, которое затрачивается на переход из начального состояния $x^{(0)}$ в конечное $x^{(k)}$ при оптимальном управлении:

$$t^{(k)} = \frac{|x^{(k)} - x^{(0)}|}{U} \quad (\text{VII, 135})$$

Подстановка выражения (VII, 133) в соотношение (VII, 127) определяет оптимальное управление как функцию начального и конечного состояний оптимизируемого процесса:

$$u_{\text{опт}} = U \operatorname{sgn} (x^{(k)} - x^{(0)}) \quad (\text{VII, 136})$$

Оптимальная траектория при этом находится подстановкой значения постоянной (VII, 133) в выражение (VII, 130):

$$x = [U \operatorname{sgn} (x^{(k)} - x^{(0)})] t + x^{(0)} \quad (\text{VII, 137})$$

Таким образом, поставленная оптимальная задача полностью решена, в результате чего определено оптимальное управление (VII, 136), получена оптимальная траектория (VII, 137) и найдено время перехода процесса по данной траектории (VII, 135).

Пример VII-2. Математическое описание процесса имеет вид системы уравнений:

$$\frac{dx_1}{dt} = x_2 \quad \frac{dx_2}{dt} = u. \quad (\text{VII, 138})$$

Определить оптимальное управление $u_{\text{опт}}(t)$, переводящее процесс за минимальное время из начального состояния

$$x_1(t^{(0)}) = x_1(0) = x_1^{(0)} \quad x_2(t^{(0)}) = x_2(0) = x_2^{(0)} \quad (\text{VII, 139})$$

в конечное, расположенное на линии, описываемой уравнением:

$$F^{(k)}(x_1, x_2) = x_1 - x_2 = 0 \quad (\text{VII, 140})$$

На величину управляющего воздействия наложены ограничения

$$-U \leq u \leq U \quad (\text{VII, 141})$$

Решение. Составим функцию H :

$$H = \lambda_1 \Phi_1 + \lambda_2 \Phi_2 = \lambda_1 x_2 + \lambda_2 u \quad (\text{VII, 142})$$

Система дифференциальных уравнений для λ_1 и λ_2 в данном случае будет:

$$\frac{d\lambda_1}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_1} = 0 \quad \frac{d\lambda_2}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_2} = -\lambda_1 \quad (\text{VII, 143})$$

Граничные условия для функций λ_1 и λ_2 на конце траектории имеют при этом вид соотношений (VII, 103):

$$\lambda_1(t^{(k)}) = q \frac{\partial F^{(k)}}{\partial x_1} = q \quad \lambda_2(t^{(k)}) = q \frac{\partial F^{(k)}}{\partial x_2} = -q \quad (\text{VII, 144})$$

Система уравнений (VII, 143) может быть проинтегрирована, в результате чего найдем:

$$\lambda_1(t) = C_1 \quad \lambda_2(t) = -C_1 t + C_2 \quad (\text{VII, 145})$$

Полагая, что момент времени $t^{(k)}$, соответствующий попаданию процесса в конечное состояние, известен, определим из граничных условий (VII, 144) постоянные интегрирования C_1 и C_2

$$C_1 = q \quad C_2 = q(t^{(k)} - 1) \quad (\text{VII, 146})$$

с учетом которых выражения (VII, 145) запишутся в виде:

$$\lambda_1(t) = q \quad \lambda_2(t) = q(t^{(k)} - t - 1) \quad (\text{VII, 147})$$

Из выражения для функции H (VII, 142) следует, что она достигает максимальной величины, если управляющее воздействие в каждый момент времени имеет максимальное по модулю значение и знак, совпадающий со знаком функции $\lambda_2(t)$, т. е.

$$u_{\text{опт}}(t) = U \operatorname{sgn} \lambda_2(t) \quad (\text{VII, 148})$$

Согласно выражениям (VII, 147) функция $\lambda_2(t)$ представляет собой линейную функцию t и поэтому может только один раз менять свой знак при изменении t . Таким образом, можно сделать вывод, что оптимальное управление для процесса, описываемого системой уравнений (VII, 138), при наличии ограничений (VII, 141) является кусочно-постоянной функцией t , обладающей не более чем одной точкой переключения с одного предельного значения в неравенствах (VII, 141) на другое. При этом не исключается возможность, что оптимальное управление вообще не будет иметь точек переключения, т. е. будет сохранять постоянную величину в течение всего перехода процесса из начального состояния в конечное.

Поскольку для интервалов постоянства управления правая часть второго из уравнений математического описания (VII, 138) постоянна, эти уравнения можно проинтегрировать:

$$x_1(t) = \frac{1}{2} u t^2 + C_3 t + C_4 \quad x_2(t) = u t + C_3 \quad (\text{VII, 149})$$

Исключая переменную t из уравнений (VII, 149), получим уравнение траектории процесса на фазовой плоскости в виде:

$$x_1 = \frac{1}{2u} (x_2)^2 + C_4 - \frac{C_3^2}{2u} \quad (\text{VII, 150})$$

Значения постоянных интегрирования C_3 и C_4 могут быть рассчитаны из начальных условий (VII, 139), используя которые получим:

$$C_3 = x_2^{(0)} \quad C_4 = x_1^{(0)} \quad (\text{VII, 151})$$

На фазовой плоскости переменных x_1 и x_2 область конечных состояний изображается прямой линией $k_1 k_2$, проходящей через начало координат

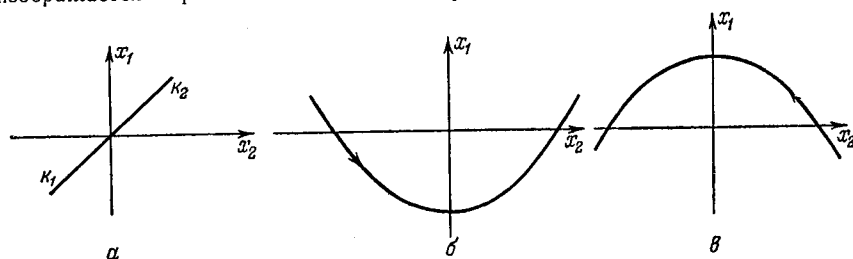


Рис. VII-11. Область конечных состояний процесса (а), определенная заданием уравнения (VII, 140), и возможные траектории процесса при положительном (б) и отрицательном (в) управлениях.

(рис. VII-11, а). Траектории процесса для управления постоянного знака имеют вид парабол, обращенных выпуклостью вниз для положительного управления (рис. VII-11, б) и вверх — для отрицательного (рис. VII-11, в). Направление движения по траекториям показано на рис. VII-11 стрелками.

С помощью выражения для $\lambda_2(t)$ (VII, 147) можно определить момент переключения управления $t^{(s)}$, если принять во внимание, что $\lambda_2(t^{(s)}) = 0$:

$$t^{(s)} = t^{(k)} - 1 \quad (\text{VII, 152})$$

Из уравнения (VII, 152) следует вывод, что переключение управления будет лишь в том случае, если из данного начального состояния нельзя попасть на линию конечных значений $k_1 k_2$ за время $t^{(k)} \leq 1$.

Следовательно, точки фазовой плоскости, из которых переход на линию конечных значений $k_1 k_2$ при постоянном управлении возможен за время $t^{(k)} = 1$, характеризуют некоторую линию переключения управления. Уравнение этой линии можно найти, подставляя соотношения (VII, 149) в условие (VII, 140) и принимая $t = 1$. Тогда полученное соотношение между начальными условиями и определит уравнение линии переключения:

$$x_1^{(s)} = \frac{1}{2} u \quad (\text{VII, 153})$$

На рис. VII-12, а показана линия $s_1 s_2$, описываемая выражением (VII, 153). Из каждой ее точки возможен переход на линию конечных состояний $k_1 k_2$ за одно и то же время $t^{(k)} = 1$.

Область фазовой плоскости, ограниченная линией $s_1 A_1 O_1 k_1$, определяет совокупность начальных состояний, из которых можно попасть на линию конечных состояний $k_1 k_2$ при постоянном управлении $u = U$ за время $t^{(k)} \leq 1$. Аналогично, область, ограниченная линией $s_2 A_2 O_2 k_2$, характеризует совокупность начальных состояний, из которых возможно попадание на линию конечных состояний при постоянном управлении $u = -U$ за время $t^{(k)} \leq 1$. Из начальных состояний, расположенных за пределами указанных областей, нельзя попасть на линию конечных состояний $k_1 k_2$ за время, меньшее 1. Кроме того, оптимальное управление в последнем случае должно содержать точку переключения с одного предельного значения в неравенствах (VII, 141) на другое. При этом траектории, входящие на линию $s_1 A_1$, должны иметь управление $u = -U$, а траектории, при-

ходящие на линию s_2A_2 , — управление $u = U$. В результате получается картина фазовых траекторий, изображенная на рис. VII-12, б.

Время перехода процесса из произвольного начального состояния для области, ограниченной линией $s_1A_1O_1k_1$, в конечное состояние на линии k_1k_2 можно определить, если уравнения (VII, 149) с учетом значений постоянных интегриро-

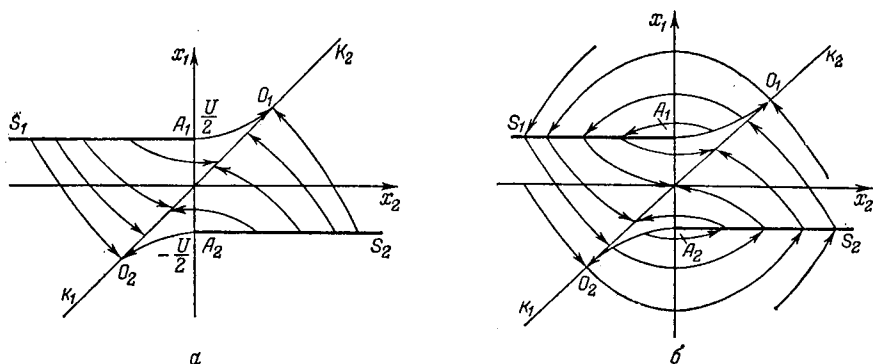


Рис. VII-12. Линии переключения управления (а) и общая картина фазовых траекторий при оптимальном управлении (б).

вания (VII, 151) подставить в уравнение линии конечных состояний (VII, 140). Решая полученное уравнение относительно t , находим:

$$t^{(k)} = 1 - \frac{x_2^{(0)}}{U} - \sqrt{1 + \left(\frac{x_2^{(0)}}{U}\right)^2 - 2\frac{x_1^{(0)}}{U}} \quad (\text{VII, 154})$$

Точно так же, для области, ограниченной линией $s_2A_2O_2k_2$:

$$t^{(k)} = 1 + \frac{x_2^{(0)}}{U} - \sqrt{1 + \left(\frac{x_2^{(0)}}{U}\right)^2 + 2\frac{x_1^{(0)}}{U}} \quad (\text{VII, 155})$$

Для начальных состояний из области, ограниченной линией $s_1A_1O_1k_2$:

$$t^{(k)} = t^{(s)} + 1 \quad (\text{VII, 156})$$

Момент переключения $t^{(s)}$ в данном случае определяется из условия, что при $t = t^{(s)}$ значение x_1 должно быть равно $1/2U$. Это отвечает пересечению начального участка траектории с линией переключения. Отсюда следует, что

$$t^{(s)} = \frac{x_2^{(0)}}{U} + \sqrt{\left(\frac{x_2^{(0)}}{U}\right)^2 - 1 + 2\frac{x_1^{(0)}}{U}} \quad (\text{VII, 157})$$

Аналогично, для области, ограниченной линией $s_2A_2O_2k_1$:

$$t^{(s)} = -\frac{x_2^{(0)}}{U} + \sqrt{\left(\frac{x_2^{(0)}}{U}\right)^2 - 1 - 2\frac{x_1^{(0)}}{U}} \quad (\text{VII, 158})$$

Рассмотрим особенности решения задач, в которых критерий оптимальности задан в виде функционала. Как отмечалось выше, при выводе соотношения максимума (VII, 90) предполагается, что

система уравнений математического описания оптимизируемого процесса дополнена уравнением:

$$\frac{dx_{m+1}}{dt} = 1 \quad (\text{VII}, 159)$$

для неизвестной x_{m+1} . Соответствующая неизвестной x_{m+1} функция λ_{m+1} при этом определяется уравнением

$$\frac{d\lambda_{m+1}}{dt} = - \frac{\partial \tilde{H}}{\partial x_{m+1}} \quad (\text{VII}, 160)$$

которое для случая, когда правые части уравнений математического описания не зависят явно от переменной t , имеет наиболее простой вид

$$\frac{d\lambda_{m+1}}{dt} = 0 \quad (\text{VII}, 161)$$

и его решением будет:

$$\lambda_{m+1} = C_{m+1} = \text{const} \quad (\text{VII}, 162)$$

Если пределы интегрирования в выражении функционала (VII, 67) не заданы, то значение постоянной интегрирования C_{m+1} определяется условиями трансверсальности [см. уравнения (VII, 118)] и равно:

$$C_{m+1} = 0 \quad (\text{VII}, 163)$$

Таким образом, для любого значения независимой переменной находим:

$$\lambda_{m+1}(t) = 0 \quad (\text{VII}, 164)$$

Следовательно, число слагаемых в выражении для функции $\tilde{H}$ (VII, 92) можно уменьшить на 1, т. е.

$$\tilde{H}[\lambda_0, \lambda(t), x(t), u] = \sum_{k=0}^m \lambda_k(t) \Phi_k[x(t), u] \quad (\text{VII}, 165)$$

Другими словами, для функции $\tilde{H}$, описываемой выражением (VII, 165), по-прежнему справедливо утверждение о равенстве нулю на оптимальной траектории (VII, 90), поскольку слагаемое $\lambda_{m+1}\Phi_{m+1}$ на основании условия (VII, 164) тождественно равно нулю.

Когда пределы интегрирования в выражении функционала (VII, 67) заданы, согласно соотношениям (VII, 117), значение постоянной интегрирования C_{m+1} (VII, 162) отличается от нуля и равно некоторой константе q_{m+1} . При этом слагаемое $\lambda_{m+1}\Phi_{m+1}$, входящее в выражение для функции $\tilde{H}$ (VII, 92), может быть также отлично от нуля. Однако в соответствии с выражением (VII, 162) оно постоянно вдоль всей траектории и не оказывает влияния на выбор оптимального управления из соотношения максимума (VII, 91). Поэтому данное слагаемое можно исключить из анализа, хотя при этом может и не выполняться условие ра-

венства нулю функции $\hat{H}$ на оптимальной траектории, если ее определять соотношением (VII, 165).

Если же правые части уравнений математического описания оптимизируемого процесса зависят явно от t , то λ_{m+1} не является константой и для нахождения $\lambda_{m+1}(t)$ необходимо интегрировать уравнение (VII, 160) при соответствующих граничных условиях.

Пример VII-3. Математическое описание процесса задано в виде уравнения

$$\frac{dx_1}{dt} = u \quad (\text{VII, 166})$$

с граничным условием:

$$x_1(0) = x_1^{(0)} \quad (\text{VII, 167})$$

Определить оптимальное управление $u_{\text{опт}}(t)$, минимизирующее функционал

$$I = \frac{1}{2} \int_0^{t(k)} (x_1^2 + u^2) d\tau \quad (\text{VII, 168})$$

для двух случаев:

а) задана величина $t(k) = \tau_k$ и конечное значение переменной не фиксировано, т. е. $x_1(\tau_k)$ не задано;

б) задано значение $x_1(\tau_k) = x_1^{(k)}$ и величина τ_k не определена.

Решение. Рассмотрим сначала общую часть вычислительной процедуры, которая справедлива в обоих случаях.

Введем дополнительную переменную $x_2 = t$ и добавим к уравнению (VII, 166) уравнение для переменной x_2 :

$$\frac{dx_2}{dt} = 1 \quad (\text{VII, 169})$$

Составим функцию $\hat{H}$ (VII, 92):

$$\tilde{H} = \lambda_0 \Phi_0 + \lambda_1 \Phi_1 + \lambda_2 \Phi_2 = \frac{1}{2} \lambda_0 (x_1^2 + u^2) + \lambda_1 u + \lambda_2 \quad (\text{VII, 170})$$

В выражении для функции $\hat{H}$ (VII, 170) величины λ_0 и λ_2 являются константами, а для λ_1 можно вывести уравнение:

$$\frac{d\lambda_1}{dt} = -\frac{\partial \tilde{H}}{\partial x_1} = -\lambda_0 x_1 \quad (\text{VII, 171})$$

Найдем оптимальное управление из условия, что $\hat{H}$ при этом управлении имеет максимальное значение, для чего воспользуемся условием

$$\frac{\partial \tilde{H}}{\partial u} = \lambda_0 u + \lambda_1 = 0 \quad (\text{VII, 172})$$

откуда следует

$$u_{\text{опт}} = -\frac{\lambda_1}{\lambda_0} \quad (\text{VII, 173})$$

Управление (VII, 173) действительно максимизирует функцию $\hat{H}$, так как

$$\frac{\partial^2 \tilde{H}}{\partial u^2} = \lambda_0 < 0 \quad (\text{VII, 174})$$

по определению константы λ_0 .

Подставляя оптимальное управление $\bar{u}$ (VII, 173) в выражение для функции H (VII, 170), получим:

$$\tilde{H}[\lambda_0, \lambda(t), x(t), u_{\text{опт}}(t)] = \frac{1}{2} \lambda_0 \left[x_1^2 - \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_0} \right)^2 \right] + \lambda_2 \quad (\text{VII, 175})$$

Для того чтобы определить $x_1(t)$ при оптимальном управлении (VII, 173), подставим его в уравнение (VII, 166), в результате чего найдем выражение

$$\frac{dx_1}{dt} = - \frac{\lambda_1}{\lambda_0} \quad (\text{VII, 176})$$

которое должно интегрироваться совместно с уравнением (VII, 171).

Дифференцируя уравнение (VII, 176) по t и подставляя в него значение $d\lambda_1/dt$ из выражения (VII, 171), получим уравнение:

$$\frac{d^2 x_1}{dt^2} = x_1 \quad (\text{VII, 177})$$

решением которого будет функция:

$$x_1(t) = C_1 \exp t + C_2 \exp(-t) \quad (\text{VII, 178})$$

где C_1 и C_2 — постоянные интегрирования.

Воспользовавшись уравнением (VII, 176), теперь можно определить:

$$\lambda_1(t) = -\lambda_0 [C_1 \exp t - C_2 \exp(-t)] \quad (\text{VII, 179})$$

С учетом выражения (VII, 179) из соотношения (VII, 173) найдем оптимальное управление $u_{\text{опт}}$ как функцию переменной t :

$$u_{\text{опт}}(t) = C_1 \exp t - C_2 \exp(-t) \quad (\text{VII, 180})$$

Подставим выражения (VII, 178) и (VII, 179) в соотношение (VII, 175), определяющее значение функции H на оптимальной траектории. Тогда после упрощений получим:

$$\tilde{H}[\lambda_0, \lambda(t), x(t), u_{\text{опт}}(t)] = 2\lambda_0 C_1 C_2 + \lambda_2 \quad (\text{VII, 181})$$

Поскольку все величины, через которые определяется значение H (VII, 181), являются константами, тем самым доказано, что H постоянна на оптимальной траектории.

Рассмотрим теперь различные варианты постановки оптимальной задачи.

а) Для случая, когда задано значение $t^{(k)} = \tau_k$, имеем следующий набор граничных условий:

$$x_1(0) = x_1^{(0)} \quad (\text{VII, 182})$$

$$\lambda_1(\tau_k) = 0 \quad (\text{VII, 183})$$

$$\lambda_2(\tau_k) = q_2 \neq 0 \quad (\text{VII, 184})$$

С учетом граничных условий (VII, 182) и (VII, 183) и выражений (VII, 178) и (VII, 179) находим следующую систему уравнений для определения постоянных интегрирования C_1 и C_2

$$C_1 + C_2 = x_1^{(0)}$$

$$C_1 \exp \tau_k - C_2 \exp(-\tau_k) = 0 \quad (\text{VII, 185})$$

решением которой будет:

$$C_1 = \frac{x_1^{(0)}}{1 + \exp(2\tau_k)} \quad C_2 = \frac{x_1^{(0)} \exp(2\tau_k)}{1 + \exp(2\tau_k)} \quad (\text{VII, 186})$$

Условие, что $H \equiv 0$ на оптимальной траектории, позволяет найти из соотношения (VII, 181) значение константы λ_2 , которое с учетом выражений (VII, 186) составит:

$$\lambda_2 = -2\lambda_0 C_1 C_2 = -\frac{1}{2} \lambda_0 \frac{(x_1^{(0)})^2}{ch^2 \tau_k} \quad (\text{VII, 187})$$

Поскольку функции $\lambda_i(t)$ при интегрировании описывающей их системы уравнений находятся с точностью до произвольного постоянного множителя, можно положить $\lambda_0 = -1$, тогда

$$\lambda_2 = \frac{1}{2} \frac{(x_1^{(0)})^2}{ch^2 \tau_k} \quad (\text{VII, 188})$$

Подставляя значения C_1 и C_2 из выражений (VII, 186) в соотношения (VII, 178) и (VII, 179), получим:

$$x_1(t) = x_1^{(0)} \frac{ch(t - \tau_k)}{ch \tau_k} \quad (\text{VII, 189})$$

$$u_{\text{опт}}(t) = x_1^{(0)} \frac{sh(t - \tau_k)}{ch(\tau_k)} \quad (\text{VII, 190})$$

С учетом найденных зависимостей (VII, 189) и (VII, 190) можно определить минимальное значение функционала (VII, 168):

$$I = \frac{1}{2} \left(\frac{x_1^{(0)}}{ch \tau_k} \right)^2 \int_0^{\tau_k} [ch^2(\tau - \tau_k) + sh^2(\tau - \tau_k)] d\tau = \frac{1}{2} (x_1^{(0)})^2 th \tau_k \quad (\text{VII, 191})$$

б) Для случая, когда задано значение $x_1^{(k)}$ граничные условия запишутся в виде:

$$x_1(0) = x_1^{(0)} \quad x_1(\tau_k) = x_1^{(k)} \quad (\text{VII, 192})$$

Кроме того, в соответствии с соотношениями (VII, 164) в рассматриваемом случае имеем:

$$\lambda_2 \equiv 0 \quad (\text{VII, 193})$$

С учетом граничных условий (VII, 192) и выражения (VII, 178) получим систему уравнений для определения постоянных интегрирования C_1 и C_2

$$\begin{aligned} C_1 + C_2 &= x_1^{(0)} \\ C_1 \exp t^{(k)} + C_2 \exp(-t^{(k)}) &= x_1^{(k)} \end{aligned} \quad (\text{VII, 194})$$

решение которой будет:

$$C_1 = \frac{x_1^{(k)} - x_1^{(0)} + \exp(-t^{(k)})}{\exp t^{(k)} - \exp(-t^{(k)})} \quad C_2 = \frac{x_1^{(0)} \exp t^{(k)} - x_1^{(k)}}{\exp t^{(k)} - \exp(-t^{(k)})} \quad (\text{VII, 195})$$

С учетом условия (VII, 193) из выражения функции H (VII, 181) найдем уравнение для расчета значения τ_k :

$$2\lambda_0 C_1 C_2 = 0 \quad (\text{VII, 196})$$

откуда следует, что

$$C_1 = 0 \quad (\text{VII, 197})$$

либо

$$C_2 = 0 \quad (\text{VII, 198})$$

Условие (VII, 197) приводит к соотношению:

$$\tau_k = \ln \frac{x_1^{(0)}}{x_1^{(k)}} \quad (\text{VII, 199})$$

которое вследствие положительности значения τ_k справедливо только, если

$$x_1^{(0)} > x_1^{(k)} \quad (\text{VII, 200})$$

При этом из уравнений (VII, 194) находим, что

$$C_2 = x_1^{(0)} \quad (\text{VII, 201})$$

и соотношения (VII, 178) и (VII, 180) принимают вид:

$$x_1(t) = x_1^{(0)} \exp(-t) \quad (\text{VII, 202})$$

$$u_{\text{опт}}(t) = -x_1^{(0)} \exp(-t) \quad (\text{VII, 203})$$

Если вместо условия (VII, 200) выполняется неравенство

$$x_1^{(0)} < x_1^{(k)} \quad (\text{VII, 204})$$

то $C_1 \neq 0$ и справедливо равенство (VII, 198), из которого с учетом выражения для постоянной интегрирования C_2 (VII, 195) определяем:

$$\tau_k = \ln \frac{x_1^{(k)}}{x_1^{(0)}} \quad (\text{VII, 205})$$

а из уравнений (VII, 194) находим:

$$C_1 = x_1^{(0)} \quad (\text{VII, 206})$$

Теперь соотношения (VII, 178) и (VII, 180), описывающие оптимальные траекторию и управление, могут быть представлены как

$$x_1(t) = x_1^{(0)} \exp t \quad (\text{VII, 207})$$

$$u_{\text{опт}}(t) = x_1^{(0)} \exp t \quad (\text{VII, 208})$$

С использованием выражений (VII, 202) и (VII, 203) можно вычислить минимальное значение функционала (VII, 168):

$$I = \frac{1}{2} [(x_1^{(0)})^2 - (x_1^{(k)})^2] \quad (\text{VII, 209})$$

Выше был рассмотрен ряд примеров применения принципа максимума к задачам оптимизации, где конечное решение можно получить в аналитическом виде. При решении подавляющего большинства практических задач, как правило, аналитическое решение найти нельзя из-за сложности правых частей уравнений математического описания оптимизируемого процесса. Вследствие этого становится невозможным определить общие интегралы систем уравнений, характеризующие переменные $x(t)$ и $\lambda(t)$ для любого t .

Поэтому приходится использовать численные методы интегрирования данных систем уравнений.

Специфической особенностью систем уравнений (VII,1) и (VII,48), которые необходимо интегрировать совместно для отыскания оптимального управления с помощью соотношения максимума (VII,47), является то, что граничные условия для них всегда задаются в двух точках траектории — начальной и конечной. При этом, независимо от того, заданы указанные условия как фиксированные значения переменных состояния x_i или имеют вид соотношений, определяемых условиями трансверсальности, число граничных условий для начальной точки оптимальной траектории всегда равно числу граничных условий для конечной точки.

В простейшем случае, когда начальная и конечная точки оптимальной траектории фиксированы заданием значений всех переменных состояния x_i , граничные величины для функций $\lambda_i(t)$ не заданы [см. соотношения (VII,117)]. Следовательно, в начале и конце траектории задано по m значений для всех переменных x_i ($i = 1, \dots, m$).

Если некоторые из переменных состояния x_i не определены в начале и конце траектории, то отсутствие их значений компенсируется заданием нулевых значений для соответствующих функций $\lambda_i(t)$ в той точке траектории (начальной или конечной), где не заданы величины переменных x_i [см. соотношения (VII,118)].

Аналогично, если все или некоторые переменные состояния x_i в начале или конце траектории не определены, но должны удовлетворять заданным условиям типа (VII,104) или (VII,111), то вместо недостающих значений x_i или λ_i используется соответствующее число соотношений (VII,110), определяемых условиями трансверсальности.

В любом случае в начальной и конечной точках траектории будут всегда заданы m условий соответственно на начальные и конечные значения функций $x_i(t)$ и $\lambda_i(t)$. Другими словами, при решении систем уравнений (VII,1) и (VII,48) приходится решать краевую задачу для системы $2m$ уравнений с m граничными условиями в начальной точке траектории и m граничными условиями для конечной точки.

Выше (см. стр. 225) уже обсуждались трудности, возникающие при численном интегрировании уравнений с двухточечными граничными условиями. Очевидно, что все сказанное ранее справедливо и в рассматриваемом случае.

При численном интегрировании систем уравнений для начала процедуры нужно задать начальные значения всех без исключения неизвестных функций. Поскольку для систем уравнений (VII,1) и (VII,48) на любом конце траектории заданы только m значений функций $x_i(t)$ и $\lambda_i(t)$ при общем их числе $2m$, недостающие m значений должны задаваться до некоторой степени произвольно и затем уточняться по заданным значениям функций $x_i(t)$ и $\lambda_i(t)$ в конечной точке траектории.

Предположим для определенности, что граничные условия оптимальной задачи заданы в виде соотношений

$$x_i(t^{(0)}) = x_i^{(0)} \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{VII}, 210)$$

$$x_i(t^{(k)}) = x_i^{(k)} \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{VII}, 211)$$

т. е. решается задача с фиксированными концами траектории.

В этом случае и начальные и конечные значения функций $\lambda_i^{(0)}$ и $\lambda_i^{(k)}$ неизвестны и для интегрирования систем уравнений (VII, 1) и (VII, 48) нужно задаваться величинами $\lambda_i^{(0)}$ ($i = 1, \dots, m$) при интегрировании от начальной точки траектории к конечной или значениями $\lambda_i^{(k)}$ при обратном направлении интегрирования.

Допустим, что интегрирование осуществляется в направлении от начальной точки траектории к конечной. Следовательно, для начала интегрирования используются условия (VII, 210) совместно с заданными произвольным образом значениями $\lambda_i^{(0)}$:

$$\lambda_i(t^{(0)}) = \lambda_i^{(0)} \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{VII}, 212)$$

После того как начальные значения для функций $x_i(t)$ и $\lambda_i(t)$ заданы, из условия максимума можно определить оптимальное управление, отвечающее начальному значению независимой переменной t :

$$H[\lambda(t^{(0)}), x(t^{(0)}), u_{\text{опт}}(t^{(0)})] = \max_{u \in U} H[\lambda(t^{(0)}), x(t^{(0)}), u] \quad (\text{VII}, 213)$$

Максимизация в соотношении (VII, 213) может проводиться любым известным методом, учитывающим наличие ограничений на допустимые значения управляющих воздействий u_l ($l = 1, \dots, r$). В частном случае, когда ограничения на управляющие воздействия отсутствуют, их оптимальные значения находятся решением системы уравнений:

$$\frac{\partial H}{\partial u_l} = 0 \quad l = 1, \dots, r \quad (\text{VII}, 214)$$

После того как оптимальное управление в начальный момент определено $u_{\text{опт}}(t^{(0)})$, становится возможным с применением любого численного метода интегрирования системы дифференциальных уравнений сделать один шаг интегрирования, т. е. найти значения функций $x(t)$ и $\lambda(t)$ при $t = t^{(0)} + \Delta t$. Например, при использовании простейшего метода интегрирования — метода Эйлера получим:

$$x_i(t^{(0)} + \Delta t) = x_i(t^{(0)}) + \Delta t \varphi_i[x(t^{(0)}), u_{\text{опт}}(t^{(0)})] \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{VII}, 215)$$

$$\lambda_i(t^{(0)} + \Delta t) = \lambda_i(t^{(0)}) - \Delta t \sum_{k=1}^m \frac{\partial \varphi_k[x(t^{(0)}), u_{\text{опт}}(t^{(0)})]}{\partial x_i} \lambda_k(t^{(0)}) \quad (\text{VII}, 216)$$

$$i = 1, \dots, m$$

Теперь определяется оптимальное управление при $t = t^{(0)} + \Delta t$ из условия максимума, которое записывается как

$$\begin{aligned} H[\lambda(t^{(0)} + \Delta t), x(t^{(0)} + \Delta t), u_{\text{опт}}(t^{(0)} + \Delta t)] = \\ = \max_{u \in U} H[\lambda(t^{(0)} + \Delta t), x(t^{(0)} + \Delta t), u] \end{aligned} \quad (\text{VII}, 217)$$

После нахождения оптимального управления $u_{\text{опт}}(t + \Delta t)$ делается следующий шаг интегрирования и определяются значения $x(t^{(0)} + 2\Delta t)$ и $\lambda(t^{(0)} + 2\Delta t)$. Затем снова вычисляется оптимальное управление $u_{\text{опт}}(t^{(0)} + 2\Delta t)$ и т. д.

В результате находится некоторое решение системы уравнений (VII, 1), определяющее траекторию $x(t)$, которая, вообще говоря, не проходит через заданную конечную точку (VII, 211). При этом важно установить момент прекращения численного интегрирования для принятой совокупности значений $\lambda_i^{(0)}$ (VII, 212), поскольку оно становится бесполезным после того, как траектория достигла минимального рассогласования с конечной точкой, заданной условиями (VII, 211), и это рассогласование начинает увеличиваться. Поэтому в процессе численного интегрирования нужен контроль за степенью приближения получаемой траектории к заданной конечной точке.

Разумеется, что если момент окончания интегрирования задан, то нет необходимости предусматривать специальные меры контроля за этим удалением, так как для оценки несоответствия найденной конечной точки траектории с заданной можно применить соотношение:

$$r = \sum_{i=1}^m [x_i(\tau_k) - x_i^{(k)}]^2 \quad (\text{VII}, 218)$$

Если же значение $t^{(k)}$ не определено, то в качестве оценки удаления получаемой траектории от заданной конечной точки следует использовать выражение

$$r = \min_t \sum_{i=1}^m [x_i(t) - x_i^{(k)}]^2 \quad (\text{VII}, 219)$$

где минимум ищется по значениям независимой переменной t .

В обоих случаях величина r может служить оценкой того, насколько удачно выбраны начальные значения $\lambda_i^{(0)}$ (VII, 212). При этом величина r , рассматриваемая как функция $\lambda_i^{(0)}$ ($i = 1, \dots, m$), должна быть минимизирована выбором подходящей совокупности значений $\lambda_i^{(0)}$ ($i = 1, \dots, m$), т. е. необходимо решить задачу отыскания минимума:

$$\min_{\lambda^{(0)}} r(\lambda^{(0)}) = 0 \quad (\text{VII}, 220)$$

Некоторые приемы решения таких задач описаны в главе IX.

В результате решения задачи минимизации (VII, 220) находятся граничные значения $\lambda_i^{(0)}$ ($i = 1, \dots, m$) и, следовательно, определяется оптимальное управление $u_{\text{опт}}(t)$. Кроме того, если в исходной постановке оптимальной задачи значение $t^{(k)}$ не фиксировано, то оно также рассчитывается при решении задачи минимизации (VII, 219).

В тех случаях, когда граничные условия исходной оптимальной задачи имеют вид, отличный от приведенных выше условий (VII, 210) и (VII, 211), рассмотренная вычислительная процедура изменяется незначительно. Разница состоит лишь в том, что для начала интегрирования нужно задаваться также некоторыми переменными состояниями x_i или находить их значения из условий трансверсальности (VII, 110).

2. РАЗЛИЧНЫЕ ВАРИАНТЫ ПОСТАНОВКИ ОПТИМАЛЬНЫХ ЗАДАЧ ДЛЯ УПРАВЛЯЕМЫХ ПРОЦЕССОВ

Ниже в компактной форме представлены в виде правил использования математического аппарата принципа максимума для решения конкретных оптимальных задач основные результаты, полученные в предыдущем разделе.

Рассматривается управляемый процесс, описываемый системой дифференциальных уравнений:

$$\frac{dx_i}{dt} = \varphi_i(x, u) \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{VII, 221})$$

Задача 1. Требуется определить оптимальное управление $u_{\text{опт}}(t)$, переводящее процесс из заданного начального состояния

$$x(t^{(0)}) = x^{(0)} \quad (\text{VII, 222})$$

в заданное конечное

$$x(t^{(k)}) = x^{(k)} \quad (\text{VII, 223})$$

за минимальное время $\tau_k = t^{(k)} - t^{(0)}$.

Схема решения. Составляется функция H

$$H \left[\lambda(t), x(t), u_{\text{опт}} \right] = \sum_{k=1}^m \lambda_k(t) \varphi_k[x(t), u] \quad (\text{VII, 224})$$

и записывается система уравнений для функций $\lambda_i(t)$:

$$\frac{d\lambda_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_i} = -\sum_{k=1}^m \lambda_k(t) \frac{\partial \varphi_k[x(t), u]}{\partial x_i} \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{VII, 225})$$

Оптимальное управление при интегрировании систем уравнений (VII, 221) и (VII, 225) выбирается из условия:

$$H[\lambda(t), x(t), u_{\text{опт}}(t)] = \max_{u \in U} H[\lambda(t), x(t), u] \quad (\text{VII, 226})$$

Для оптимальной траектории при этом выполняется соотношение:

$$H[\lambda(t), x(t), u_{\text{опт}}(t)] = \text{const} \geq 0 \quad (\text{VII}, 227)$$

При совместном интегрировании систем уравнений (VII, 221) и (VII, 225), в процессе которого из соотношения (VII, 226) находится оптимальное управление $u_{\text{опт}}$, начальные значения $\lambda_i^{(0)}$ ($i = 1, \dots, m$) выбираются таким образом, чтобы получаемая траектория попала в заданное конечное состояние (VII, 223). Для этого решается задача минимизации

$$\min_{\lambda_i^{(0)}} \min_t \sum_{i=1}^m [x_i(t) - x_i^{(k)}]^2 \quad (\text{VII}, 228)$$

откуда определяются искомая совокупность значений $\lambda_i^{(0)}$ ($i = 1, \dots, m$) и величина $t^{(k)}$.

Задача 2. Требуется найти оптимальное управление $u_{\text{опт}}(t)$, переводящее процесс за минимальное время $\tau_k = t^{(k)} - t^{(0)}$ из начального состояния, заданного неполным набором значений переменных $x_i(t^{(0)})$:

$$x_i(t^{(0)}) = x_i^{(0)} \quad i = 1, \dots, m_1^{(0)} \quad m_1^{(0)} < m \quad (\text{VII}, 229)$$

в конечное, которое также задано неполным набором значений переменных $x_i(t^{(k)})$:

$$x_i(t^{(k)}) = x_i^{(k)} \quad i = 1, \dots, m_1^{(k)} \quad m_1^{(k)} < m \quad (\text{VII}, 230)$$

Схема решения. Общая процедура получения и использования соотношений (VII, 224) — (VII, 227) остается такой же, как и в задаче 1.

Для интегрирования систем уравнений (VII, 221) и (VII, 225) в данном случае вместо $2m$ имеется $m_1^{(0)} + m_1^{(k)}$ граничных условий, определяемых соотношениями (VII, 229) и (VII, 230). Недостающие граничные условия получают заданием граничных значений для функций $\lambda_i(t)$, наводимых с учетом условий трансверсальности по следующему правилу.

Для переменной $x_i(t)$, у которой условиями (VII, 229) и (VII, 230) не фиксируются начальное или конечное значение или оба вместе, начальное или конечное значение или оба вместе для функции $\lambda_i(t)$ полагаются равными нулю, что непосредственно следует из условий трансверсальности (см. стр. 329). При этом к системе $m_1^{(0)} + m_1^{(k)}$ граничных условий (VII, 229) и (VII, 230) для $x_i(t)$ добавляется система $2m - m_1^{(0)} - m_1^{(k)}$ граничных условий для функций $\lambda_i(t)$:

$$\lambda_i(t^{(0)}) = 0 \quad i = m_1^{(0)} + 1, \dots, m \quad (\text{VII}, 231)$$

$$\lambda_i(t^{(k)}) = 0 \quad i = m_1^{(k)} + 1, \dots, m \quad (\text{VII}, 232)$$

В дальнейшем при интегрировании систем уравнений (VII, 221) и (VII, 225) подбираются начальные значения для функций $x_i(t)$:

$$x_i^{(0)} \quad i = m_1^{(0)} + 1, \dots, m \quad (\text{VII, 233})$$

и функций $\lambda_i(t)$:

$$\lambda_i^{(0)} \quad i = 1, \dots, m_1^{(0)} \quad (\text{VII, 234})$$

чтобы обеспечить выполнение условий (VII, 230) и (VII, 232) для конечного состояния процесса.

Как и в задаче 1, в начальной точке интегрирования необходимо производить подбор m значений для функций $x_i(t)$ и $\lambda_i(t)$.

Задача 3. Требуется найти оптимальное управление $u_{\text{опт}}(t)$, переводящее процесс за минимальное время $\tau_h = t^{(h)} - t^{(0)}$ из начального состояния, описываемого условиями

$$x_i(t^{(0)}) = x_i^{(0)} \quad i = 1, \dots, m_1^{(0)} \quad (\text{VII, 235})$$

$$F_f^{(0)}(x_{m_1^{(0)}+1}, \dots, x_{m_2^{(0)}}) = 0 \quad j = 1, \dots, p^{(0)} \quad (\text{VII, 236})$$

$$p_1^{(0)} < m_2^{(0)} - m_1^{(0)}$$

$$x_i(t^{(0)}) - \text{не определено} \quad i = m_2^{(0)} + 1, \dots, m \quad (\text{VII, 237})$$

в конечное состояние, заданное аналогичными соотношениями:

$$x_i(t^{(k)}) = x_i^{(k)} \quad i = 1, \dots, m_1^{(k)} \quad (\text{VII, 238})$$

$$F_f^{(k)}(x_{m_1^{(k)}+1}, \dots, x_{m_2^{(k)}}) = 0$$

$$j = 1, \dots, p^{(k)}, \quad p^{(k)} < m_2^{(k)} - m_1^{(k)} \quad (\text{VII, 239})$$

$$x_i(t^{(k)}) - \text{не определено} \quad i = m_2^{(k)} + 1, \dots, m \quad (\text{VII, 240})$$

Схема решения. Рассмотрим порядок нахождения полного набора граничных условий для начального состояния процесса. В конечном состоянии методика определения недостающих граничных условий аналогична.

Для группы переменных $x_i(t)$ (VII, 237) начальные значения для функций $\lambda_i(t)$ находятся так же, как и в задаче 2, т. е.

$$\lambda_i(t^{(0)}) = 0 \quad i = m_2^{(0)} + 1, \dots, m \quad (\text{VII, 241})$$

Для группы переменных

$$x_i(t) \quad i = m_1^{(0)} + 1, \dots, m_2^{(0)} \quad (\text{VII, 242})$$

на начальные значения которых наложены ограничения (VII, 236), воспользуемся условиями трансверсальности (VII, 110):

$$\lambda_i(t^{(0)}) = \sum_{j=1}^{p^{(0)}} q_j \frac{\partial F_f^{(0)}[x_{m_1^{(0)}+1}(t^{(0)}), \dots, x_{m_2^{(0)}}(t^{(0)})]}{\partial x_i} \quad i = m_1^{(0)} + 1, \dots, m_2^{(0)} \quad (\text{VII, 243})$$

Из системы уравнений (VII, 243) принципиально можно определить $m_2^{(0)} - m_1^{(0)}$ значений $z_i(t^{(0)})$ ($i = m_1^{(0)} + 1, \dots, m_2^{(0)}$) как функции величин $\lambda_i^{(0)}$ ($i = m_1^{(0)} + 1, \dots, m_2^{(0)}$) и q_j ($j = 1, \dots, p^{(0)}$), т. е.

$$x_i(t^{(0)}) = \psi_i(\lambda_{m_1^{(0)}+1}^{(0)}, \dots, \lambda_{m_2^{(0)}}^{(0)}, q_1, \dots, q_{p^{(0)}}) \quad /$$

$$i = m_1^{(0)} + 1, \dots, m_2^{(0)} \quad (\text{VII, 244})$$

Соотношения (VII, 244) совместно с условиями (VII, 236) можно рассматривать как систему $m_2^{(0)} - m_1^{(0)} + p^{(0)}$ уравнений, из которой находятся значения параметров q_j ($j = 1, \dots, p^{(0)}$) как функции значений $\lambda_i^{(0)}$ ($i = m_1^{(0)} + 1, \dots, m_2^{(0)}$):

$$q_i = q_i(\lambda_{m_1^{(0)}+1}^{(0)}, \dots, \lambda_{m_2^{(0)}}^{(0)}) \quad (\text{VII, 245})$$

С учетом зависимостей (VII, 245) соотношения (VII, 244) теперь могут быть представлены в виде:

$$x_i(t^{(0)}) = \psi_i^*(\lambda_{m_1^{(0)}+1}^{(0)}, \dots, \lambda_{m_2^{(0)}}^{(0)}) \quad (\text{VII, 246})$$

Соотношения (VII, 246) устанавливают связь между начальными значениями функций $\lambda_i(t)$:

$$\lambda_i^{(0)} \quad i = m_1^{(0)} + 1, \dots, m_2^{(0)} \quad (\text{VII, 247})$$

и значениями $x_i^{(0)}$ группы переменных (VII, 242), для которых заданы условия (VII, 236). Поэтому при подборе начальных значений для функции $\lambda_i(t)$ ($i = m_1^{(0)} + 1, \dots, m_2^{(0)}$) необходимо соответствующим образом изменять начальные значения $x_i^{(0)}$ ($i = m_1 + 1, \dots, m_2^{(0)}$).

Таким образом, при интегрировании систем уравнений (VII, 221) и (VII, 225) подбору для начального состояния процесса подлежат начальные значения

$$\lambda_i^{(0)} \quad i = 1, \dots, m_1^{(0)} \quad (\text{VII, 248})$$

отвечающие заданным значениям $x_1^{(0)}$ (VII, 235); начальные значения

$$\lambda_i^{(0)} \quad i = m_1^{(0)} + 1, \dots, m_2^{(0)} \quad (\text{VII, 249})$$

определяющие, согласно соотношениям (VII, 246), начальные значения $x_i^{(0)}$ переменных состояния (VII, 242), и начальные значения

$$x_i^{(0)} \quad i = m_2^{(0)} + 1, \dots, m \quad (\text{VII, 250})$$

для которых соответствующие значения функций $\lambda_i(t)$ описываются условиями (VII, 241). Всегда подбору в начальной точке

интегрирования подлежат, как и в приведенных выше задачах, m неизвестных начальных условий. В остальном процедура нахождения оптимального управления остается такой же, как и выше.

Рассмотрим методику использования условий трансверсальности для конкретного случая, когда ограничение (VII, 236) задано для переменных x_1 и x_2 соотношением:

$$F^{(0)}(x_1, x_2) = \exp x_1 - \exp x_2 - 1 = 0 \quad (\text{VII, 251})$$

Система уравнений (VII, 243) при этом имеет вид

$$\lambda_1^{(0)} = q \exp x_1^{(0)} \quad \lambda_2^{(0)} = -q \exp x_2^{(0)} \quad (\text{VII, 252})$$

откуда соотношения (VII, 244) можно вывести в аналитической форме

$$x_1^{(0)} = \ln \frac{\lambda_1^{(0)}}{q} \quad x_2^{(0)} = \ln \left(-\frac{\lambda_2^{(0)}}{q} \right) \quad (\text{VII, 253})$$

Подставляя выражения (VII, 253) в соотношение (VII, 251), из полученного уравнения находим:

$$q = \lambda_1^{(0)} + \lambda_2^{(0)} \quad (\text{VII, 254})$$

С учетом выражения (VII, 254) соотношения (VII, 253) теперь могут быть записаны в виде

$$x_1^{(0)} = \ln \frac{\lambda_1^{(0)}}{\lambda_1^{(0)} + \lambda_2^{(0)}} \quad x_2^{(0)} = \ln \left(-\frac{\lambda_2^{(0)}}{\lambda_1^{(0)} + \lambda_2^{(0)}} \right) \quad (\text{VII, 255})$$

Соотношения (VII, 255) применяются при подборе величин $\lambda_1^{(0)}$ и $\lambda_2^{(0)}$ для расчета соответствующих значений $x_1^{(0)}$ и $x_2^{(0)}$.

Задача 4. Требуется найти оптимальное управление $u_{\text{опт}}(t)$, переводящее процесс из заданного некоторым образом начального состояния в конечное так, чтобы функционал

$$I = \int_{t^{(0)}}^{t^{(k)}} \Phi_0[x(t), u(t)] dt \quad (\text{VII, 256})$$

принимал минимальное значение.

Схема решения. Составляется функция

$$\tilde{H}[\lambda_0, \lambda(t), x(t), u] = \sum_{k=0}^m \lambda_k(t) \Phi_k[x(t), u] \quad (\text{VII, 257})$$

и записывается система уравнений для функций $\lambda_i(t)$:

$$\frac{d\lambda_i}{dt} = -\frac{\partial \tilde{H}}{\partial x_i} = -\sum_{k=0}^m \lambda_k(t) \frac{\partial \Phi_k[x(t), u]}{\partial x_i} \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{VII, 258})$$

Значение $\lambda_0(t)$ равно неположительной константе, и вследствие того, что функции $\lambda_i(t)$ рассчитываются с точностью до произвольного постоянного множителя, можно положить:

$$\lambda_0 = -1 \quad (\text{VII, 259})$$

Оптимальное управление определяется из соотношения максимума:

$$\tilde{H}[\lambda_0, \lambda(t), x(t), u_{\text{опт}}(t)] = \max_{u \in U} \tilde{H}[\lambda_0, \lambda(t), x(t), u] \quad (\text{VII, 260})$$

Выбор начальных условий для интегрирования систем уравнений (VII, 221) и (VII, 258) осуществляется так же, как и в задачах 1—3.

Если конечное значение независимой переменной t фиксировано, то на оптимальной траектории соблюдается условие:

$$\tilde{H}[\lambda_0, \lambda(t), x(t), u_{\text{опт}}(t)] = \text{const} \geq 0 \quad (\text{VII, 261})$$

Если же значение $t^{(h)}$ не задано, то вместо неравенства (VII, 261) выполняется условие:

$$\tilde{H}[\lambda_0, \lambda(t), x(t), u_{\text{опт}}(t)] = 0 \quad (\text{VII, 262})$$

Задача 5. Математическое описание процесса имеет вид системы уравнений

$$\frac{dx_i}{dt} = \varphi_i(x, u, t) \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{VII, 263})$$

в правые части которых входит явно независимая переменная t .

Система (VII, 263) представляется системой (VII, 221), если дополнить ее еще одним уравнением для новой переменной состояния x_{m+1} :

$$x_{m+1} = t \quad (\text{VII, 264})$$

для которой можно записать дифференциальное уравнение

$$\frac{dx_{m+1}}{dt} = \varphi_{m+1} = 1 \quad (\text{VII, 265})$$

При этом уравнение (VII, 265) совместно с системой (VII, 263) составит систему $m + 1$ уравнений

$$\frac{dx_i}{dt} = \varphi_i(\tilde{x}, u) \quad i = 1, \dots, m + 1 \quad (\text{VII, 266})$$

в правые части которых уже не входит в явном виде переменная t .

Для решения оптимальных задач с системой уравнений (VII, 266) могут быть использованы все полученные в задачах 1—4 выводы и соотношения, если заменить в них m на $m' = m + 1$. Отметим лишь некоторые варианты постановки задачи о быстродействии.

Задача 5а. Требуется найти оптимальное управление, переводящее процесс, который описывается системой уравнений (VII, 263), из заданного при $t = t^{(0)}$ начального состояния, характеризуемого условиями (VII, 235)—(VII, 237) задачи 3, в конечное, определенное условиями (VII, 238)—(VII, 240), за минимальное время $\tau_h = t^{(h)} - t^{(0)}$.

Схема решения. В дополнение к граничным условиям задачи 3 в этом случае для функций $x_{m+1}(t)$ и $\lambda_{m+1}(t)$ имеем следующие:

$$x_{m+1}(t^{(0)}) = t^{(0)} \quad \lambda_{m+1}(t^{(k)}) = 0 \quad (\text{VII}, 267)$$

В остальном схема решения аналогична использованной в задаче 3.

Задача 5б. То же, что и в задаче 5а, только требуется выбрать начальное значение независимой переменной $t^{(0)}$ при заданном значении $t^{(k)}$.

Схема решения. Дополнительные условия для функций $x_{m+1}(t)$ и $\lambda_{m+1}(t)$ будут:

$$x_{m+1}(t^{(k)}) = t^{(k)} \quad \lambda_{m+1}(t^{(0)}) = 0 \quad (\text{VII}, 268)$$

В остальном схема решения не отличается от примененной в задаче 3.

Задача 5в. То же, что и в задаче 5а, только в исходной постановке оптимальности задачи не определены оба значения $t^{(0)}$ и $t^{(k)}$.

Схема решения. Граничные условия задаются только для функции $\lambda_{m+1}(t)$:

$$\lambda_{m+1}(t^{(0)}) = 0 \quad \lambda_{m+1}(t^{(k)}) = 0 \quad (\text{VII}, 269)$$

Начальное и конечное значения независимой переменной x_{m+1} при этом находятся в результате подбора не заданных $m+1$ начальных условий для функций $x_i(t)$, $\lambda_i(t)$, куда относится и переменная $x_{m+1}(t)$, определяющая значения $t^{(0)}$ и $t^{(k)}$.

Задача 6. Для процесса, описываемого системой уравнений (VII, 263), требуется найти оптимальное управление $u_{\text{опт}}(t)$, минимизирующее функционал

$$I = \int_{t^{(0)}}^{t^{(k)}} \Phi_0[x(t), u(t), t] dt \quad (\text{VII}, 270)$$

при переводе процесса из заданного некоторым образом начального состояния в конечное.

Схема решения. Введением дополнительной переменной x_{m+1} (VII, 264) эта задача сводится к задаче 4, в соотношениях которой следует лишь заменить m на $m' = m + 1$. Относительно выбора граничных значений для $x_{m+1}(t)$ и $\lambda_{m+1}(t)$ см. задачу 5.

Задача 7. Математическое описание процесса имеет вид системы уравнений

$$\frac{dx_i}{dt} = \Phi_i(x) + \sum_{j=1}^r \Psi_{ij}(x) u_j \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{VII}, 271)$$

в которой $\Phi_i(x)$ и $\Psi_{ij}(x)$ — заданные функции переменных состояния x_i .

Требуется найти оптимальное управление $u_{\text{опт}}(t)$, переводящее процесс из заданного некоторым образом начального состояния в конечное за минимальное время $\tau_h = t^{(h)} - t^{(0)}$.

Схема решения. Особенностью исследуемого случая является то, что управляющие воздействия входят в правые части уравнений математического описания процесса в форме линейных соотношений. Это позволяет определить ряд общих свойств оптимального управления, знание которых может оказаться полезным при решении подобных задач.

Составим функцию H и запишем ее в виде:

$$H[\lambda(t), x(t), u] = \sum_{k=1}^m \lambda_k(t) \varphi_k[x(t)] + \sum_{k=1}^m \lambda_k(t) \cdot \sum_{j=1}^r \psi_{kj}[x(t)] u_j \quad (\text{VII, 272})$$

Максимум функции H (VII, 272), рассматриваемой как функция управляющих воздействий u_j , совпадает с максимумом второго слагаемого в выражении (VII, 272), которое можно представить как

$$\sum_{k=1}^m \lambda_k(t) \sum_{j=1}^r \psi_{kj}[x(t)] u_j = \sum_{j=1}^r u_j \sum_{k=1}^m \lambda_k(t) \psi_{kj}[x(t)] \quad (\text{VII, 273})$$

Очевидно, что максимальное значение выражения (VII, 273) и, следовательно, функции H (VII, 272) достигается, если при выборе управляющих воздействий u_j руководствоваться правилом

$$u_j = \begin{cases} u_{j \max}, & \text{если } \sum_{k=1}^m \lambda_k(t) \psi_{kj}[x(t)] > 0 \\ u_{j \min}, & \text{если } \sum_{k=1}^m \lambda_k(t) \psi_{kj}[x(t)] < 0 \end{cases} \quad (\text{VII, 274})$$

$j = 1, \dots, r$

когда в задаче отсутствуют так называемые особые управления.

Таким образом при выборе оптимального управления из условия максимума функции H (VII, 272) для процессов, описываемых системами уравнений типа (VII, 271), используются только предельные значения управляющих воздействий, которые они могут принимать в заданной области U их изменения, когда она определена неравенствами вида:

$$u_{j \min} \leq u_j \leq u_{j \max} \quad (\text{VII, 275})$$

При этом оптимальное управление $u_{\text{опт}}(t)$, заданное в виде соотношений (VII, 274), может иметь точки разрыва, в которых происходит переключение с одного предельного значения на другое при изменении знаков выражений (см. пример VII-2):

$$\sum_{k=1}^m \lambda_k(t) \psi_{kj}[x(t)] \quad j = 1, \dots, r \quad (\text{VII, 276})$$

Задача 8. Математическое описание процесса характеризуется системой уравнений:

$$\frac{dx_i}{dt} = \varphi_i(x) \quad i = 1, \dots, m-1 \quad (\text{VII, 277})$$

$$\frac{dx_m}{dt} = \varphi_m(x, u) \quad (\text{VII, 278})$$

Требуется определить оптимальное управление $u_{\text{опт}}(t)$, переводящее процесс из заданного некоторым образом начального состояния в конечное за минимальное время $\tau_k = t^{(k)} - t^{(0)}$.

Схема решения. Здесь имеется только одно управляющее воздействие u , которое к тому же входит только в одно уравнение (VII, 278) полной системы уравнений математического описания процесса. С подобными случаями можно встретиться при решении оптимальных задач, когда управление не оказывает прямого воздействия на все параметры, а только приводит к изменению одного из них, через который и осуществляется управление процессом.

При этом функция H может быть представлена в виде

$$H[\lambda(t), x(t), u] = \sum_{k=1}^{m-1} \lambda_k(t) \varphi_k[x(t)] + \lambda_m(t) \varphi_m[x(t), u] \quad (\text{VII, 279})$$

а ее максимум совпадает с максимумом произведения

$$\lambda_m(t) \varphi_m[x(t), u] \quad (\text{VII, 280})$$

В зависимости от знака функции $\lambda_m(t)$ оптимальное управление определяется соотношениями:

$$\text{если } \lambda_m(t) > 0, \text{ то } \varphi_m[x(t), u_{\text{опт}}(t)] = \max_{u \in U} \varphi_m[x(t), u] \quad (\text{VII, 281})$$

$$\text{если } \lambda_m(t) < 0, \text{ то } \varphi_m[x(t), u_{\text{опт}}(t)] = \min_{u \in U} \varphi_m[x(t), u] \quad (\text{VII, 282})$$

Если функция φ_m к тому же является монотонной функцией управляющего воздействия, как это часто бывает при решении практических задач, то оптимальное управление определяется кусочно-постоянной функцией, принимающей лишь предельные значения из допустимого диапазона изменения управляющего воздействия $[u_{\text{min}}, u_{\text{max}}]$.

Некоторые варианты постановки оптимальных задач для реактора идеального вытеснения. Математическое описание реактора идеального вытеснения (см. главу II) может представляться системой дифференциальных уравнений:

$$\frac{dx_i}{dt} = \varphi_i(x, u) \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{VII, 283})$$

Система (VII, 283) характеризует изменение по длине реактора основных параметров процесса (концентрации реагирующих веществ и продуктов реакции, температура, давление и т. д.). В ка-

честве управляющих воздействий при этом могут применяться, например, температура теплоносителя, распределенная по длине реактора подпитка некоторыми реагентами и т. п.

Когда управление ведется температурой теплоносителя, что особенно интересно при решении практических задач проектирования, и управляющее воздействие входит только в одно из уравнений системы (VII, 283) — уравнение теплового баланса реактора, возникает задача 8, приведенная выше. Для сравнения с результатами, получающимися, если обеспечить оптимальные температурные условия для химической реакции, можно рассмотреть задачу с использованием в качестве управляющего воздействия температуры реагирующей смеси. При этом система уравнений (VII, 283) может приниматься как система уравнений материальных балансов реагентов, куда температура входит через константы скорости реакции.

Задача 9. Для реактора идеального вытеснения, математическое описание которого имеет вид системы уравнений (VII, 283) с начальными условиями

$$x_i(0) = x_i^{(0)} \quad (\text{VII, 284})$$

требуется определить оптимальное управление $u_{\text{опт}}(t)$, максимизирующее значение $x_j(\tau_k)$ на выходе реактора с заданными размерами, т. е. при заданном значении τ_k .

Схема решения. Эта задача возникает, когда нужно, например, получить какой-либо продукт с максимальным выходом в реакторе вытеснения заданных размеров. Изменение концентрации указанного продукта по длине аппарата описывается одним из уравнений системы (VII, 283):

$$\frac{dx_j}{dt} = \varphi_j(x, u) \quad (\text{VII, 284a})$$

Задача максимизации значения $x_j(\tau_k)$ [см. уравнения (VII, 68) и (VII, 69)] может быть сведена к задаче минимизации функционала

$$I = \int_0^{\tau_k} \varphi_0[x(t), u(t)] dt \quad (\text{VII, 285})$$

если положить, что

$$\varphi_0(x, u) = -\varphi_j(x, u) \quad (\text{VII, 286})$$

Таким образом решаемая задача сведена к задаче 4, рассмотренной выше. В соответствии с общей схемой решения последней введем функцию $\tilde{H}$, которую представим как

$$\tilde{H}(\lambda_0, \lambda, x, u) = \lambda_0 \varphi_0(x, u) + \lambda'_j \varphi_j(x, u) + \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^m \lambda_k \varphi_k(x, u) \quad (\text{VII, 287})$$

Функции $\lambda'_j(t)$, $\lambda_i(t)$ ($i = 1, \dots, m$; $i \neq j$) удовлетворяют системе уравнений (VII, 258) задачи 4 и, кроме того, $\lambda_0 = -1$ (VII, 259). Граничные условия для выхода реактора имеют вид (см. задачу 2):

$$\lambda'_j(\tau_k) = 0 \quad (\text{VII, 288})$$

$$\lambda_i(\tau_k) = 0 \quad i = 1, \dots, m \quad i \neq j \quad (\text{VII, 289})$$

поскольку значения $x_i(\tau_k)$ ($i = 1, \dots, m$) не заданы.

Принимая во внимание соотношение (VII, 286) и что $\lambda_0 = -1$, выражение для функции $\tilde{H}$ (VII, 287) можно записать как

$$\tilde{H} = (\lambda'_j + 1)\varphi_j + \sum_{k \neq j}^m \lambda_k \varphi_k \quad (\text{VII, 290})$$

Введем вместо функции $\lambda'_j(t)$ новую функцию

$$\lambda_j(t) = \lambda'_j(t) + 1 \quad (\text{VII, 291})$$

для которой согласно соотношению (VII, 288) граничным условием будет

$$\lambda_j(\tau_k) = 1 \quad (\text{VII, 292})$$

Теперь выражение (VII, 290) может быть представлено в форме

$$H[\lambda(t), x(t), u] = \sum_{k=1}^m \lambda_k(t) \varphi_k[x(t), u] \quad (\text{VII, 293})$$

и система уравнений для функций λ_i (VII, 258) приводится к виду

$$\frac{d\lambda_i}{dt} = - \frac{\partial H}{\partial x_i} = - \sum_{k=1}^m \lambda_k(t) \frac{\partial \varphi_k[x(t), u]}{\partial x_i} \quad (\text{VII, 294})$$

с граничными условиями

$$\lambda_i(\tau_k) = 0 \quad \lambda_j(\tau_k) = 1 \quad i = 1, \dots, m \quad i \neq j \quad (\text{VII, 295})$$

Таким образом рассматриваемая оптимальная задача сведена к интегрированию систем уравнений (VII, 283) и (VII, 294) в заданном интервале изменения независимой переменной $0 \leq t \leq \tau_k$, в процессе которого необходимо подобрать начальные значения для функций $\lambda_i(t)$ ($i = 1, \dots, m$), чтобы удовлетворить заданным конечным значениям (VII, 295).

В случае, если значение τ_k не задано, т. е. размеры реактора не определены, схема нахождения оптимального управления совпадает с описанной в задаче 2.

Задача 10. То же, что и в задаче 9, только в качестве критерия оптимальности используется выражение:

$$R = \sum_{j=1}^m c_j x_j(\tau_k) \quad (\text{VII, 296})$$

в котором c_j — заданные постоянные коэффициенты, положительные или отрицательные (некоторые из них могут быть равны нулю).

С такими задачами можно встретиться при оптимизации реактора с использованием экономического критерия оптимальности, когда эффективность работы аппарата выражается соотношением (VII, 296), в котором величины c_i являются соответствующими стоимостными оценками продуктов реакции.

Схема решения. Рассматриваемая задача может быть сведена к задаче минимизации функционала (VII, 285), если положить:

$$\Phi_0(x, u) = - \sum_{j=1}^m c_j \Phi_j(x, u) \quad (\text{VII, 297})$$

Выражение для функции H в данном случае можно представить в виде:

$$\tilde{H} = \lambda_0 \Phi_0 + \sum_{j=1}^m \lambda'_j \Phi_j \quad (\text{VII, 298})$$

При этом функции $\lambda'_j(t)$ ($j = 1, \dots, m$), удовлетворяющие системе уравнений задачи 4, имеют граничные условия

$$\lambda'_j(\tau_k) = 0 \quad (\text{VII, 299})$$

поскольку значения $x_i(\tau_k)$ ($i = 1, \dots, m$) не определены.

Принимая во внимание соотношение (VII, 297), выражение (VII, 298) можно записать как

$$H[\lambda(t), x(t), u] = \sum_{j=1}^m \lambda_j(t) \Phi_j[x(t), u] \quad (\text{VII, 300})$$

где новые функции $\lambda_j(t)$ связаны с прежними λ'_j соотношениями

$$\lambda_j(t) = \lambda'_j(t) + c_j \quad (\text{VII, 301})$$

С учетом выражений (VII, 299) граничными условиями для функций $\lambda_i(t)$ будут:

$$\lambda_j(\tau_k) = c_j \quad (\text{VII, 302})$$

причем функции $\lambda_j(t)$ ($j = 1, \dots, m$) удовлетворяют системе уравнений (VII, 294). Заметим, что задача 9 является частным случаем приведенной задачи с критерием (VII, 296), если среди коэффициентов c_j только один отличен от нуля и равен 1.

Поскольку граничные значения заданы для всех функций $\lambda_i(t)$ (VII, 302), функция H (VII, 300) может быть определена вследствие ее постоянства на оптимальной траектории как

$$H[\lambda(t), x(t), u_{\text{опт}}(t)] = \sum_{j=1}^m c_j \Phi_j[x(\tau_k), u_{\text{опт}}(\tau_k)] \quad (\text{VII, 303})$$

При этом для реактора фиксированных размеров (см. стр. 353) будет справедливо соотношение:

$$H[\lambda(t), x(t), u_{\text{опт}}(t)] = \sum_{j=1}^m c_j \varphi_j[x(\tau_k), u_{\text{опт}}(\tau_k)] = \text{const} \geq 0 \quad (\text{VII}, 304)$$

Если же размеры реактора не заданы условиями оптимальной задачи, то вместо соотношения (VII, 304) должно выполняться тождество:

$$H[\lambda(t), x(t), u_{\text{опт}}(t)] = \sum_{j=1}^m c_j \varphi_j[x(\tau_k), u_{\text{опт}}(\tau_k)] = 0 \quad (\text{VII}, 305)$$

Задача 11. То же, что и в задаче 10, но на конечные значения переменных x_i наложено условие

$$\sum_{j=1}^m d_j x_j(\tau_k) = d_0 \quad (\text{VII}, 306)$$

в котором d_j — заданные постоянные коэффициенты, положительные или отрицательные (некоторые из них могут быть равны нулю).

Задачи такого типа могут встретиться, когда требуется найти оптимальный режим при заданном выходе продукта реакции или заданной степени превращения исходного реагента и т. д.

Схема решения. Для функций λ'_j граничные условия уже не будут нулевыми, как в задачах 9 и 10, поскольку на значения $x_j(\tau_k)$ наложено условие (VII, 306), и определяются они условиями трансверсальности (VII, 101), имеющими в данном случае вид:

$$\lambda'_j(\tau_k) = q d_j \quad j = 1, \dots, m \quad (\text{VII}, 307)$$

Согласно соотношениям (VII, 307), граничные условия для функций $\lambda_j(t)$ запишутся как

$$\lambda_j(\tau_k) = c_j + q d_j \quad j = 1, \dots, m \quad (\text{VII}, 308)$$

Отсюда, исключая параметр q , можно получить следующую систему соотношений:

$$\frac{\lambda_1(\tau_k) - c_1}{d_1} = \frac{\lambda_2(\tau_k) - c_2}{d_2} = \dots = \frac{\lambda_m(\tau_k) - c_m}{d_m} \quad (\text{VII}, 309)$$

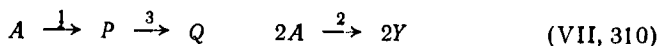
Эта система должна быть выполнена для конечных значений функций $\lambda_j(t)$, вычисляемых совместным интегрированием систем уравнений (VII, 283) и (VII, 294) с учетом соотношения максимума для функции H (VII, 300), и вместе с условием (VII, 306) составляет систему m соотношений, заданных для выхода реактора.

3. ПРИМЕРЫ ЗАДАЧ ОПТИМИЗАЦИИ, РЕШАЕМЫХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПРИНЦИПА МАКСИМУМА

В этом разделе приведено несколько оптимальных задач из области химической технологии, которые могут дать представление о возможностях применения математического аппарата принципа максимума.

Оптимальное распределение подпитки исходным веществом в реакторах идеального вытеснения

Рассмотрим в несколько упрощенной форме задачу оптимального распределения подпитки исходным реагентом A для реакции



проводимой в изотермическом реакторе идеального вытеснения. При этом скорости соответствующих стадий реакции определяются уравнениями:

$$w_A = -k_1 x_A - 2k_2 x_A^2 \quad (\text{VII}, 311a)$$

$$w_P = k_1 x_A - k_3 x_P \quad (\text{VII}, 311b)$$

$$w_Q = k_3 x_P \quad w_Y = 2k_2 x_A^2 \quad (\text{VII}, 311b)$$

В качестве критерия оптимальности в данном случае принимается выражение

$$R = x_P - x_Q - x_Y \quad (\text{VII}, 312)$$

которое должно достигать максимального значения при оптимальном режиме.

Если предположить, что исходный реагент A выделяется из реакторного остатка и возвращается обратно в систему, то максимум выражения (VII, 312) может означать наибольший выход вещества P при минимальном содержании примесей продуктов Q и Y .

В общем случае использования подпитки реактора следует принимать во внимание, что количество реагирующей смеси изменяется по длине аппарата. Поэтому в систему уравнений математического описания должно быть включено уравнение, характеризующее это изменение. Однако в решаемой задаче будем считать, что реакция проводится при малых концентрациях исходного реагента A и что изменением количества реагирующей смеси по длине реактора можно пренебречь. Разумеется, что можно рассмотреть также случай, когда количество смеси изменяется по длине аппарата. Однако для этого варианта не представляется возможным получить аналитические решения, что снижает ценность задачи как иллюстративного примера.

Математическое описание реактора с учетом сделанных выше допущений может быть представлено в виде системы уравнений (II, 171):

$$\frac{dx_1}{dt} = k_1 x_4 - k_3 x_1 \quad (\text{VII, 313a})$$

$$\frac{dx_2}{dt} = 2k_2 x_4^2 \quad (\text{VII, 313б})$$

$$\frac{dx_3}{dt} = k_3 x_1 \quad (\text{VII, 313в})$$

$$\frac{dx_4}{dt} = -k_1 x_4 - 2k_2 x_4^2 + g(t) \quad (\text{VII, 314})$$

где введены следующие обозначения для концентраций продуктов реакции и исходного вещества

$$x_P = x_1 \quad x_Y = x_2 \quad x_Q = x_3 \quad x_A = x_4 \quad (\text{VII, 315})$$

Кроме того, в уравнение (VII, 314), описывающее изменение концентрации реагента A , добавлен член

$$g(t) = \frac{G(t)}{S} \quad (\text{VII, 316})$$

учитывающий наличие распределенной подпитки. В нем обозначены: $G(t)$ — количество реагента A , вводимого в единицу времени в сечении, которое отстоит на расстоянии t от входа в реактор (t измеряется также в единицах времени пребывания реагентов); S — сечение реактора.

Решение сформулированной выше задачи оптимизации удобнее провести в два этапа. На первом этапе можно определить, как должна изменяться концентрация x_4 реагента A по длине реактора для того, чтобы обеспечить максимум выражения (VII, 312), которое с учетом обозначений (VII, 315) может быть записано как

$$R = x_1 - x_2 - x_3 \quad (\text{VII, 317})$$

На втором этапе решения по известной зависимости $x_4(t)$ с применением уравнения (VII, 314) уже нетрудно найти закон изменения распределенной подпитки по длине реактора, т. е. функцию $G(t)$.

Для решения задачи на первом этапе необходимо воспользоваться уравнениями (VII, 313), где величина x_4 — управляющее воздействие. Вводя обозначение

$$x_4 = u \quad (\text{VII, 318})$$

перепишем эту систему уравнений в виде:

$$\frac{dx_1}{dt} = k_1 u - k_3 x_1 \quad (\text{VII, 319a})$$

$$\frac{dx_2}{dt} = 2k_2 u^2 \quad (\text{VII, 319б})$$

$$\frac{dx_3}{dt} = k_3 x_1 \quad (\text{VII, 319в})$$

Начальные условия для системы уравнений (VII, 319) будут:

$$x_i(0) = 0 \quad i = 1, 2, 3 \quad (\text{VII}, 320)$$

т. е. предполагается, что продукты реакции на входе в реактор отсутствуют.

Таким образом, в рассматриваемой постановке имеем задачу 10 (см. стр. 358). Составим функцию H (VII, 300):

$$H = \lambda_1 \varphi_1 + \lambda_2 \varphi_2 + \lambda_3 \varphi_3 = \lambda_1 (k_1 u - k_3 x_1) + 2\lambda_2 k_2 u^2 + \lambda_3 k_3 x_1 \quad (\text{VII}, 321)$$

и запишем систему уравнений (VII, 294) для функций $\lambda_i(t)$ ($i = 1, 2, 3$):

$$\frac{d\lambda_1}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_1} = (\lambda_1 - \lambda_3) k_3 \quad (\text{VII}, 322a)$$

$$\frac{d\lambda_2}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_2} = 0 \quad (\text{VII}, 322б)$$

$$\frac{d\lambda_3}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_3} = 0 \quad (\text{VII}, 322в)$$

Граничные условия для функций λ_i (VII, 302), согласно выражению (VII, 317), определяются как

$$\lambda_1(t_k) = 1 \quad (\text{VII}, 323a)$$

$$\lambda_2(t_k) = -1 \quad (\text{VII}, 323б)$$

$$\lambda_3(t_k) = -1 \quad (\text{VII}, 323в)$$

Решениями уравнений (VII, 322 б) и (VII, 322 в) являются константы, значения которых описываются граничными условиями (VII, 323 б) и (VII, 323 в):

$$\lambda_2 = -1 \quad (\text{VII}, 324)$$

$$\lambda_3 = -1 \quad (\text{VII}, 325)$$

Подставляя значение λ_3 (VII, 325) в уравнение (VII, 322 а) и интегрируя его, получим:

$$\lambda_1(t) = C_1 \exp k_3 t - 1 \quad (\text{VII}, 326)$$

Постоянная интегрирования C_1 в соотношении (VII, 326) определяется из граничного условия (VII, 323 а)

$$C_1 = 2 \exp(-k_3 \tau_k) \quad (\text{VII}, 327)$$

после чего выражение (VII, 326) принимает окончательный вид

$$\lambda_1(t) = 2 \exp k_3(t - \tau_k) - 1 \quad (\text{VII}, 328)$$

Теперь можно найти оптимальное управление из условия максимизации функции H , определяемой соотношением (VII, 321). Дифференцируя H по u и приравнявая производную нулю, получим уравнение:

$$\frac{\partial H}{\partial u} = \lambda_1 k_1 + 4\lambda_2 k_2 u = 0 \quad (\text{VII}, 329)$$

Отсюда

$$u_{\text{опт}}(t) = -\frac{k_1 \lambda_1}{4k_2 \lambda_2} = -\frac{k_1}{4k_2} [2 \exp k_3(t - \tau_k) - 1] \quad (\text{VII}, 330)$$

Нетрудно проверить, что управление (VII, 330) действительно максимизирует функцию H . Для этого достаточно вычислить вторую производную

$$\frac{\partial^2 H}{\partial u^2} = 4\lambda_2 k_2 \quad (\text{VII}, 331)$$

которая согласно выражению (VII, 324) отрицательна. Следовательно, найден максимум H .

Оптимальное значение τ_k , определяющее размеры реактора, можно найти из условия (VII, 305) задачи 10, откуда следует, что при оптимальном управлении $u_{\text{опт}}(t)$ (VII, 330) функция H (VII, 321) тождественно равна нулю при любом значении t .

Подставляя в выражение для функции H (VII, 321) величины λ_1 , λ_2 , λ_3 и $u_{\text{опт}}$ из соотношений (VII, 324), (VII, 325), (VII, 328) и (VII, 330) и полагая $t = 0$, получим уравнение

$$H = \frac{k_1^2}{8k_2} [2 \exp(-k_3 \tau_k) - 1]^2 = 0 \quad (\text{VII}, 332)$$

из которого находим оптимальное значение τ_k :

$$\tau_k = \frac{1}{k_3} \ln 2 \quad (\text{VII}, 333)$$

С учетом значения τ_k (VII, 333) зависимость оптимального управления от t (VII, 330) теперь может быть записана как

$$u_{\text{опт}}(t) = \frac{k_1}{4k_2} (\exp k_3 t - 1) \quad (\text{VII}, 334)$$

откуда, в частности, следует, что

$$u_{\text{опт}}(0) = 0 \quad (\text{VII}, 335)$$

т. е. при оптимальном распределении подпитки концентрация исходного реагента A на входе реактора должна быть равна нулю.

С использованием зависимости (VII, 334) можно найти значения $x_1(t)$, $x_2(t)$ и $x_3(t)$ интегрированием системы уравнений (VII, 319) при граничных условиях (VII, 320). В результате получим соотношения, характеризующие значения концентраций продуктов реакции при оптимальном распределении подпитки:

$$x_1(t) = \frac{k_1^2}{8k_2 k_3} [\exp k_3 t + \exp(-k_3 t) - 2] \quad (\text{VII}, 336a)$$

$$x_2(t) = \frac{k_1^2}{16k_2 k_3} [\exp 2k_3 t - 4 \exp k_3 t + 2k_3 t + 3] \quad (\text{VII}, 336b)$$

$$x_3(t) = \frac{k_1^2}{8k_2 k_3} [\exp k_3 t - \exp(-k_3 t) - 2k_3 t] \quad (\text{VII}, 336b)$$

Поскольку для реакции (VII, 310) общее количество реагента A , идущее на образование продуктов реакции, составляет

$$G_A = v[x_1(\tau_k) + x_2(\tau_k) + x_3(\tau_k)] \quad (\text{VII, 337})$$

применяя соотношения (VII, 336), можно оценить выход продукта P по отношению к прореагировавшему количеству реагента A по формуле:

$$\Psi_P = \frac{x_1(\tau_k)}{x_1(\tau_k) + x_2(\tau_k) + x_3(\tau_k)} \quad (\text{VII, 338})$$

Подставляя в нее соотношения (VII, 336) и полагая $t = \tau_k$, где τ_k определяется выражением (VII, 333), найдем:

$$\begin{aligned} \Psi_P &= \frac{\frac{k_1^2}{8k_2k_3} \left[2 + \frac{1}{2} - 2 \right]}{\frac{k_1^2}{8k_2k_3} \left[2 + \frac{1}{2} - 2 \right] + \frac{k_1^2}{16k_2k_3} [4 - 4 \cdot 2 + 2 \ln 2 + 3] +} = \\ &\quad + \frac{k_1^2}{8k_2k_3} \left[2 - \frac{1}{2} - 2 \ln 2 \right] \\ &= \frac{1}{3 - 2 \ln 2} \approx 0,62 \end{aligned} \quad (\text{VII, 339})$$

т. е. независимо от значений констант скорости реакции (VII, 310) выход продукта P , считая на прореагировавший продукт A , равен приблизительно 62 %.

С применением уравнения (VII, 314) можно также найти закон оптимального распределения подпитки по длине реактора. Подставляя в это уравнение $x_4(t) = u_{\text{опт}}(t)$ (VII, 334), получим:

$$g(t) = \frac{du}{dt} + k_1 u + 2k_2 u^2 = \frac{k_1^2}{8k_2} \left[\exp 2k_3 t + 2 \frac{k_3}{k_1} \exp k_3 t - 1 \right] \quad (\text{VII, 340})$$

Пример VII-4. Рассмотреть случай, когда все количество реагента A , вводимого с подпиткой, подается на вход реактора идеального вытеснения, размеры которого определяются формулой (VII, 333). Значения констант скорости реакции (VII, 310) принять равными

$$k_1 = k_3 = 1 \text{ мин}^{-1} \quad k_2 = 7 \text{ мин}^{-1} \quad (\text{VII, 341})$$

а концентрацию реагента A на входе аппарата без распределенной подпитки считать соответствующей общему количеству реагента A , подаваемого с подпиткой, при этом для ее расчета можно воспользоваться соотношением:

$$x_4^{(0)} = x_1(\tau_k) + x_2(\tau_k) + x_3(\tau_k) + x_4(\tau_k) \quad (\text{VII, 342})$$

где $x_i(\tau_k)$ — значения концентраций реагентов на выходе реактора с распределенной подпиткой.

Решение. Воспользовавшись выражениями (VII, 334) и (VII, 336), а также значениями констант скорости реакции (VII, 341), можно вычислить следующие

значения концентраций на выходе реактора с оптимальным распределением подпитки:

$$x_1(\tau_k) = \frac{1}{8 \cdot 7} \left[2 + \frac{1}{2} - 2 \right] = 0,0089 \quad (\text{VII, 343a})$$

$$x_2(\tau_k) = \frac{1}{16 \cdot 7} [2 \ln 2 - 1] = 0,0034 \quad (\text{VII, 343б})$$

$$x_3(\tau_k) = \frac{1}{8 \cdot 7} \left[2 - \frac{1}{2} - 2 \ln 2 \right] = 0,0021 \quad (\text{VII, 343в})$$

$$x_4(\tau_k) = \frac{1}{4 \cdot 7} [2 - 1] = 0,0357 \quad (\text{VII, 343г})$$

Таким образом, для реактора без подпитки значение концентрации реагента A на входе согласно выражению (VII, 342) следует принять равным:

$$x_4^{(0)} = 0,0089 + 0,0034 + 0,0021 + 0,0357 = 0,0501 \quad (\text{VII, 344})$$

Для реактора идеального вытеснения без распределенной подпитки концентрация реагента A в любом сечении определится интегрированием уравнения (VII, 314) с начальным условием (VII, 344) и при $g(t) \equiv 0$:

$$x_4(t) = \frac{k_1 x_4^{(0)}}{(2k_2 x_4^{(0)} + k_1) \exp k_1 t - 2k_2 x_4^{(0)}} \quad (\text{VII, 345})$$

Подставляя зависимость (VII, 345) в уравнение (VII, 313а), в результате интегрирования этого уравнения с граничным условием $x_1(0) \equiv 0$ и при $k_1 = k_3$ получим:

$$x_1(t) = \frac{k_1 x_4^{(0)}}{k_1 + 2k_2 x_4^{(0)}} \exp(-k_1 t) \ln \left[\left(1 + \frac{2k_2}{k_1} x_4^{(0)} \right) \exp k_1 t - \frac{2k_2}{k_1} x_4^{(0)} \right] \quad (\text{VII, 346})$$

Из выражений (VII, 345) и (VII, 346) с учетом значения, равного

$$\tau_k = \frac{1}{k_3} \ln 2 = \ln 2 \quad (\text{VII, 347})$$

можно найти:

$$x_4(\tau_k) = \frac{0,0501}{(2 \cdot 7 \cdot 0,0501 + 1) \cdot 2 - 2 \cdot 7 \cdot 0,0501} = 0,9185 \quad (\text{VII, 348})$$

$$x_1(\tau_k) = \frac{0,0501}{1 + 2 \cdot 7 \cdot 0,0501} \cdot \frac{1}{2} \ln [(1 + 2 \cdot 7 \cdot 0,0501) \cdot 2 - 2 \cdot 7 \cdot 0,0501] = 0,0147 \quad (\text{VII, 349})$$

Для реактора без распределенной подпитки значение концентрации (VII, 349) оказывается выше, чем для реактора с распределенной подпиткой (VII, 343а). Однако выход продукта P , который для реактора без подпитки оценивается выражением

$$\Psi_P = \frac{x_1(\tau_k)}{x_4^{(0)} - x_4(\tau_k)} \quad (\text{VII, 350})$$

при этом составляет:

$$\Psi_P = \frac{0,0147}{0,0501 - 0,9185} = 0,465 \quad (\text{VII, 351})$$

Сравнивая значения выходов для обоих случаев (VII, 339) и (VII, 351), приходим к выводу, что распределение подпитки приводит к довольно существен-

ному увеличению выхода продукта P для реакции (VII, 310). В данном примере при использовании распределенной подпитки указанный выход возрастает более чем в 1,3 раза.

Оптимальные температурные профили в реакторах идеального вытеснения для последовательных реакций

Рассмотрим задачу нахождения оптимального температурного профиля в реакторе идеального вытеснения для реакций первого порядка:



Скорости соответствующих стадий определяются выражениями:

$$\omega_A = -k_1(T) x_A \quad \omega_P = k_1(T) x_A - k_2(T) x_P \quad (\text{VII, 353})$$

в которых константы k_1 и k_2 зависят от температуры согласно уравнению Аррениуса (II, 92):

$$k_1(T) = k_{1,\infty} \exp\left(-\frac{E_1}{R_T T}\right) \quad k_2(T) = k_{2,\infty} \exp\left(-\frac{E_2}{R_T T}\right) \quad (\text{VII, 354})$$

Математическое описание реактора идеального вытеснения для реакций (VII, 352) может быть представлено системой уравнений (II, 180) и (II, 181):

$$\frac{dx_1}{dt} = \varphi_1(x_1, x_2, T) = -k_1(T) x_1 \quad (\text{VII, 355a})$$

$$\frac{dx_2}{dt} = \varphi_2(x_1, x_2, T) = k_1(T) x_1 - k_2(T) x_2 \quad (\text{VII, 355b})$$

Для этой системы граничные условия записываются в виде

$$x_1(0) = x_1^{(0)} \quad x_2(0) = x_2^{(0)} \quad (\text{VII, 356})$$

где введены обозначения для концентраций:

$$x_A = x_1 \quad x_P = x_2 \quad (\text{VII, 357})$$

Оптимальная задача формулируется как задача отыскания оптимального температурного профиля в реакторе $T(t)$, при котором на выходе аппарата концентрация продукта реакции P будет максимальной. Рассмотрим общий случай, когда на выбор оптимального значения температуры наложены ограничения:

$$T_1 \leq T \leq T_2 \quad (\text{VII, 358})$$

Относительно размеров реактора, т. е. значения τ_h , не делается никаких предположений. Поэтому особенности вариантов при заданном и неизвестном значении τ_h отмечаются в решении задачи.

Описываемая постановка оптимальной задачи является частным случаем задачи 9 (см. стр. 357) с тем отличием, что анализируется также вариант, когда значение τ_h в исходных условиях не определено.

Согласно общей процедуре использования принципа максимума оптимальная температура в каждом сечении реактора находится из условия максимума для функции H (VII, 293):

$$H = \lambda_1 \varphi_1 + \lambda_2 \varphi_2 = -\lambda_1 k_1 x_1 + \lambda_2 (k_1 x_1 - k_2 x_2) = k_1 x_1 (\lambda_2 - \lambda_1) - k_2 x_2 \lambda_2 \quad (\text{VII, 359})$$

Здесь функции $\lambda_1(t)$ и $\lambda_2(t)$ удовлетворяют системе уравнений

$$\frac{d\lambda_1}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_1} = k_1 (\lambda_1 - \lambda_2) \quad (\text{VII, 360a})$$

$$\frac{d\lambda_2}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_2} = k_2 \lambda_2 \quad (\text{VII, 360б})$$

с граничными условиями (VII, 295):

$$\lambda_1(\tau_k) = 0 \quad (\text{VII, 361a})$$

$$\lambda_2(\tau_k) = 1 \quad (\text{VII, 361б})$$

Если значение τ_k фиксировано исходными условиями оптимальной задачи, то для функции H (VII, 359) выполняется условие (VII, 304):

$$H[\lambda(t), x(t), T_{\text{опт}}(t)] = h_0 = \text{const} \geq 0 \quad (\text{VII, 362})$$

Если же значение τ_k не определено, то:

$$H[\lambda(t), x(t), T_{\text{опт}}(t)] = 0 \quad (\text{VII, 363})$$

Максимум функции H (VII, 359) находится как максимум функции одной переменной T , поэтому оптимальное значение $T_{\text{опт}}$ может удовлетворять уравнению:

$$\frac{\partial H(T)}{\partial T} = \frac{1}{R_g T^2} [E_1 k_1 x_1 (\lambda_2 - \lambda_1) - E_2 k_2 x_2 \lambda_2] = 0 \quad (\text{VII, 364})$$

При этом следует также иметь в виду, что возможны случаи, когда в допустимой области изменения температуры, определяемой неравенствами (VII, 358), функция $H(T)$ (VII, 359) не имеет стационарных точек, в которых производная (VII, 364) обращается в нуль, или же эта функция вообще не имеет таких точек.

Проанализируем возможный вид зависимости $H(T)$, для чего введем обозначения

$$\alpha = x_1 (\lambda_2 - \lambda_1) \quad (\text{VII, 365a})$$

$$\beta = x_2 \lambda_2 \quad (\text{VII, 365б})$$

с использованием которых функция H (VII, 359) и ее производная (VII, 364) могут быть записаны как

$$H = k_1 \alpha - k_2 \beta \quad (\text{VII, 366})$$

$$\frac{\partial H}{\partial T} = \frac{1}{R_g T^2} (E_1 k_1 \alpha - E_2 k_2 \beta) \quad (\text{VII, 367})$$

Очевидно, характер зависимости $H(T)$ определяется значениями энергий активаций E_1 и E_2 , величинами предэкспоненциальных

множителей $k_{1,\infty}$ и $k_{2,\infty}$ (VII, 354), а также значениями α и β , характеризруемыми выражениями (VII, 365).

Можно показать, что величины α и β всегда положительны. С этой целью рассмотрим уравнения (VII, 360) для функций $\lambda_1(t)$ и $\lambda_2(t)$. Из уравнения (VII, 360 б) следует, что знак функции $\lambda_2(t)$ совпадает со знаком ее производной $d\lambda_2/dt$, т. е. функция $\lambda_2(t)$ является монотонной функцией t , сохраняющей один и тот же знак. Из граничного условия (VII, 361 б) видно, что $\lambda_2(\tau_k) = 1$, а значит $\lambda_2(t) > 0$ для любого значения t , и, кроме того, $\lambda_2(t)$ является возрастающей функцией t . Отсюда вытекает, что значение β , определяемое выражением (VII, 365), также положительно, поскольку величина x_2 , как концентрация продукта реакции P , естественно, всегда положительна.

При оптимальном температурном профиле выполняется условие (VII, 362) или (VII, 363). Поэтому, принимая во внимание выражение для функции H (VII, 366), можно найти:

$$k_1 [T_{\text{опт}}(t)] \alpha(t) = H[\lambda(t), x(t), T_{\text{опт}}(t)] + k_2 [T_{\text{опт}}(t)] \cdot \beta(t) > 0 \quad (\text{VII, 368})$$

Неравенство (VII, 368) показывает, что величина $\alpha(t)$ также имеет положительное значение при любом t . Следовательно, согласно выражению (VII, 365 а) для любого значения t :

$$\lambda_2(t) > \lambda_1(t) \quad (\text{VII, 369})$$

поскольку величина x_1 всегда положительна, как концентрация исходного реагента A .

Из соотношения (VII, 369) следует, что правая часть уравнения (VII, 360 а) отрицательна. Это означает, что функция $\lambda_1(t)$ монотонно убывает с увеличением t , а так как ее граничное значение при $t = \tau_k$ (VII, 316 а) равно нулю, то значение $\lambda_1(t)$ всегда положительно.

Таким образом, установлено, что величины α и β , определяемые выражениями (VII, 365), всегда положительны, т. е. функция $H(T)$ может иметь стационарные точки, в которых ее производная обращается в нуль. Нетрудно показать, что функция $H(T)$ (VII, 366) может иметь не более чем одну стационарную точку, где ее производная обращается в нуль. С этой целью представим выражение для производной (VII, 367) в виде:

$$\frac{\partial H}{\partial T} = \frac{k_1}{R_T T^2} \left(E_1 \alpha - E_2 \beta \frac{k_2}{k_1} \right) \quad (\text{VII, 370})$$

Выражение, стоящее в скобках в соотношении (VII, 370), с учетом формул (VII, 354) можно записать как

$$E_1 \alpha - E_2 \beta \frac{k_{2,\infty}}{k_{1,\infty}} \exp \left(\frac{E_1 - E_2}{R_T T^2} \right) \quad (\text{VII, 371})$$

Поскольку функция

$$\exp \left(\frac{E_1 - E_2}{R_T T^2} \right) \quad (\text{VII, 372})$$

является монотонной функцией температуры T , соотношение (VII, 371) может не более одного раза обращаться в нуль при изменении T в интервале от 0 до $+\infty$. Последнее означает, что производная (VII, 370) может иметь только одно значение T_c , при котором она обращается в нуль, и, следовательно, функция $H(T)$ имеет не более чем одну стационарную точку.

Значение температуры, при котором производная (VII, 370) обращается в нуль, можно найти по формуле

$$T_c = \frac{E_1 - E_2}{R_T \ln \frac{E_1 k_{1, \infty \alpha}}{E_2 k_{2, \infty \beta}}} \quad (\text{VII, 373})$$

откуда условия существования стационарной точки для функции $H(T)$ (VII, 366) будут:

$$E_1 > E_2 \text{ и } \frac{E_1 k_{1, \infty \alpha}}{E_2 k_{2, \infty \beta}} > 1 \quad (\text{VII, 374})$$

$$E_1 < E_2 \text{ и } \frac{E_1 k_{1, \infty \alpha}}{E_2 k_{2, \infty \beta}} < 1 \quad (\text{VII, 375})$$

Если соотношения (VII, 374) или (VII, 375) не выполняются, то для положительных значений температуры T стационарной точки у функции $H(T)$ не существует. При отсутствии данной точки функция $H(T)$ монотонно изменяется при изменении температуры T . При $T \rightarrow 0$ функция $H(T) \rightarrow 0$, так как константы скорости реакции $k_1(T)$ и $k_2(T)$ обращаются в нуль при $T \rightarrow 0$.

Рассмотрим случай, когда $E_1 > E_2$. Функция (VII, 372) при этом монотонно убывает от $+\infty$ до 1 с изменением температуры от 0 до $+\infty$. Следовательно, при выполнении условия (VII, 374) выражение (VII, 371) и производная (VII, 367) меняют знак с (—) на (+) при температуре, определяемой формулой (VII, 373). При указанной температуре функция $H(T)$ имеет минимальное значение $H(T_c)$, причем оно отрицательно (рис. VII-13, кривая 1). Для температур выше T_c функция $H(T)$ уже будет возрастать и при температуре T_0 , определяемой формулой

$$T_0 = \frac{E_1 - E_2}{R \ln \frac{k_{1, \infty \alpha}}{k_{2, \infty \beta}}} \quad (\text{VII, 376})$$

функция $H(T_0) = 0$; при более высоких температурах значение $H(T)$ становится положительным.

Если условие (VII, 374) не выполняется, то производная dH/dT отрицательна при любых значениях температуры и функция $H(T)$ монотонно убывает при увеличении T (рис. VII-13, кривая 2).

Для случая $E_1 < E_2$ функция (VII, 372) монотонно возрастает от 0 до 1 при изменении температуры от 0 до $+\infty$. Следовательно, при соблюдении условия (VII, 375) выражение (VII, 371) и производная dH/dT (VII, 367) изменяют знак с (+) на (—). Поэтому функция $H(T)$ при температуре, характеризуемой формулой

(VII, 373), имеет максимальное значение, причем оно положительно (рис. VII-14, кривая 1). Температура T_0 , при которой величина $H(T_0)$ равна нулю, при этом также определяется формулой (VII, 376).

Если условие (VII, 375) не выполняется, то производная dH/dT положительна при любых значениях температуры и функция $H(T)$ монотонно возрастает при увеличении T (рис. VII-14, кривая 2).

Проведенный анализ показывает, что функция $H(T)$ может иметь стационарную точку максимума лишь при выполнении условий (VII, 375). В противном случае максимальное значение $H(T)$ достигается при одном из предельных значений температуры (VII, 358) T_1 или T_2 .

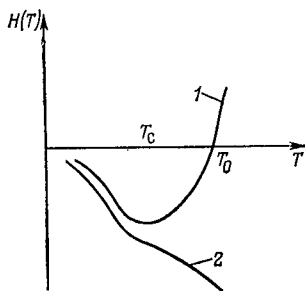


Рис. VII-13. Характер зависимости $H(T)$ при $E_1 > E_2$.

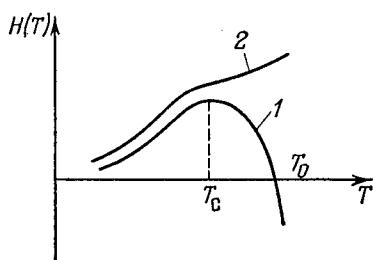


Рис. VII-14. Характер зависимости $H(T)$ при $E_1 < E_2$.

Рассмотрим теперь различные варианты постановки оптимальной задачи, которые могут представиться при расчете оптимального температурного профиля в реакторе.

Вариант 1. Пусть $E_1 < E_2$ и значение τ_h не задано в условиях оптимальной задачи. Согласно условию (VII, 363) значение функции H (VII, 366) должно быть тождественно равно нулю при оптимальной температуре:

$$H(T_{\text{опт}}) = k_1(T_{\text{опт}})\alpha - k_2(T_{\text{опт}})\beta = 0 \quad (\text{VII, 377})$$

Тогда, определяя из соотношения (VII, 377) величину $k_1\alpha$ как

$$k_1\alpha = k_2\beta \quad (\text{VII, 378})$$

и подставляя ее в выражение для производной dH/dT (VII, 367), получим:

$$\frac{\partial H}{\partial T} = \frac{k_2\beta}{R_1 T^2} (E_1 - E_2) \quad (\text{VII, 379})$$

Отсюда вследствие положительности величины β и условия $E_1 < E_2$ при любом значении температуры T производная dH/dT всегда отрицательна:

$$\frac{\partial H}{\partial T} < 0 \quad (\text{VII, 380})$$

Следовательно, оптимальным температурным режимом реактора будет изотермический режим при минимальном значении температуры T_1 , допустимом ограничениями (VII, 358). Оптимальное значение τ_k при этом можно найти по формуле (III, 109):

$$\tau_k = \frac{\ln k_2(T_1) - \ln k_1(T_1)}{k_2(T_1) - k_1(T_1)} \quad (\text{VII, 381})$$

Вариант II. Пусть $E_1 < E_2$ и величина τ_k задана. Согласно условию (VII, 362) значение функции H (VII, 366) должно быть равно при оптимальной температуре неотрицательной константе:

$$H(T_{\text{опт}}) = k_1(T_{\text{опт}})\alpha - k_2(T_{\text{опт}})\beta = h_0 = \text{const} \geq 0 \quad (\text{VII, 382})$$

Тогда, представляя величину $k_1\alpha$ как

$$k_1\alpha = h_0 + k_2\beta \quad (\text{VII, 383})$$

и подставляя ее в выражение для производной $\partial H/\partial T$ (VII, 367), получим:

$$\frac{\partial H}{\partial T} = \frac{1}{R_1 T^2} [E_1 h_0 - (E_2 - E_1) k_2 \beta] \quad (\text{VII, 384})$$

Производная (VII, 384) уже может быть равна нулю при отличном от нуля значении h_0 и определяет оптимальную температуру, при которой функция $H(T)$ имеет максимальное значение:

$$T_{\text{опт}} = \frac{E_2}{R_1 \ln \frac{(E_2 - E_1) k_2 \infty \beta}{E_1 h_0}} \quad (\text{VII, 385})$$

Очевидно, что если условие

$$\frac{(E_2 - E_1) k_2 \infty \beta}{E_1 h_0} > 1 \quad (\text{VII, 386})$$

которое в несколько иной форме записи соответствует условию (VII, 375), не выполняется, то производная (VII, 384) не может обратиться в нуль ни при каком значении температуры (см. рис. VII-14, кривая 2) и, следовательно, оптимальным значением температуры будет наибольшее значение T_2 , допускаемое ограничениями (VII, 358).

Соотношение (VII, 384) позволяет найти изменение оптимального значения температуры по длине реактора, для чего необходимо определить вид зависимости $T_{\text{опт}}(t)$. С этой целью найдем производную:

$$\frac{d\beta}{dt} = \frac{d}{dt} (\lambda_2 x_2) = \lambda_2 \frac{dx_2}{dt} + x_2 \frac{d\lambda_2}{dt} \quad (\text{VII, 387})$$

Подставляя значения производных dx_2/dt и $d\lambda_2/dt$ из уравнений (VII, 355б) и (VII, 360б) в соотношение (VII, 387), получим:

$$\frac{d\beta}{dt} = \lambda_2 (k_1 x_1 - k_2 x_2) + x_2 k_2 \lambda_2 = \lambda_2 k_1 x_1 \quad (\text{VII, 388})$$

Следовательно, ввиду положительности величин λ_2 и x_1 производная $d\beta/dt$ оказывается также положительной, а поскольку само значение β всегда положительно, то $\beta(t)$ является монотонно возрастающей положительной функцией t .

Таким образом, для того, чтобы производная dH/dT , определяемая выражением (VII, 384), сохраняла постоянное и равное нулю значение при увеличении t , температура должна уменьшаться с возрастанием t .

Нетрудно получить также закон изменения оптимальной температуры по длине реактора в форме дифференциального уравнения. При этом учтем, что функция H при оптимальной температуре постоянна по длине реактора. Для расчета константы в выражении (VII, 382) найдем из условия равенства нулю производной $\partial H/\partial T$ (VII, 367) величину

$$k_1(T_{\text{опт}}) \alpha = \frac{E_2}{E_1} k_2(T_{\text{опт}}) \beta \quad (\text{VII, 389})$$

и подставим ее в выражение (VII, 382). В результате получим:

$$H(T_{\text{опт}}) = \frac{E_2 - E_1}{E_1} k_2(T_{\text{опт}}) \beta = h_0 \quad (\text{VII, 390})$$

Дифференцирование выражения (VII, 390) дает

$$\frac{dH(T_{\text{опт}})}{dt} = \frac{E_2 - E_1}{E_1} \left[\frac{E_2 k_2(T_{\text{опт}})}{R_r T_{\text{опт}}^2} \beta \frac{dT_{\text{опт}}}{dt} + k_2(T_{\text{опт}}) \frac{d\beta}{dt} \right] = 0 \quad (\text{VII, 391})$$

откуда с учетом выражения для производной $d\beta/dt$ (VII, 388) найдем дифференциальное уравнение

$$\frac{dT_{\text{опт}}}{dt} = - \frac{R_r T_{\text{опт}}^2}{E_2} k_1(T_{\text{опт}}) \frac{x_1}{x_2} \quad (\text{VII, 392})$$

которое описывает изменение оптимальной температуры по длине реактора.

При расчете оптимального температурного профиля реактора уравнение (VII, 392) должно интегрироваться совместно с уравнениями (VII, 355), для которых граничные условия заданы (VII, 356). Однако для уравнения (VII, 392) соответствующего граничного условия нет. Тем не менее, это граничное условие для уравнения (VII, 392) может быть получено для конца реактора, если принять во внимание, что при $t = \tau_k$ выполняется условие (VII, 361) и производная dH/dT (VII, 364) обращается в нуль. Тогда соотношение

$$\left[\frac{\partial H(T_{\text{опт}})}{\partial T} \right]_{t=\tau_k} = E_1 k_1[T_{\text{опт}}(\tau_k)] x_1(\tau_k) - E_2 k_2[T_{\text{опт}}(\tau_k)] x_2(\tau_k) = 0 \quad (\text{VII, 393})$$

и будет выполнять роль недостающего граничного условия для уравнения (VII, 392), определяющего $T_{\text{опт}}(t)$.

При этом процедура расчета оптимального температурного профиля в реакторе сводится к подбору такого значения температуры на входе в аппарат

$$T_{\text{опт}}(0) = T_{\text{вх}} \quad (\text{VII}, 394)$$

при котором совместное интегрирование системы уравнений (VII, 355) с граничными условиями (VII, 356) и уравнения (VII, 392) при $t = \tau_k$ определяют значения $x_1(\tau_k)$, $x_2(\tau_k)$ и $T_{\text{опт}}(\tau_k)$, удовлетворяющие условию (VII, 393).

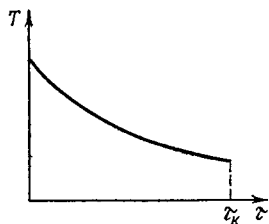


Рис. VII-15. Оптимальный температурный профиль при $x_2^{(0)} \neq 0$, рассчитанный без учета ограничений на температуру реакции.

Возможный оптимальный температурный профиль, рассчитанный этим способом без учета ограничений (VII, 358), показан на рис. VII-15.

Таким образом, в процессе интегрирования системы уравнений (VII, 355) и (VII, 392) необходимо контролировать значение функции

$$f(t) = E_1 k_1 [T_{\text{опт}}(t)] x_1(t) - E_2 k_2 [T_{\text{опт}}(t)] x_2(t) \quad (\text{VII}, 395)$$

и выбором начального значения температуры (VII, 394) добиваться того, чтобы

$$f(\tau_k) = 0 \quad (\text{VII}, 396)$$

Можно показать, что если начальные условия системы уравнений (VII, 355) $x_1^{(0)}$ и $x_2^{(0)}$ удовлетворяют соотношению

$$f(0) = E_1 k_1 (T_{\text{вх}}) x_1^{(0)} - E_2 k_2 (T_{\text{вх}}) x_2^{(0)} > 0 \quad (\text{VII}, 397)$$

то функция $f(t)$ (VII, 395) монотонно убывает с увеличением t . Это следует из выражения для производной df/dt , которая, как доказывается непосредственным вычислением, равна

$$\frac{df}{dt} = -k_2 \left[\left(1 + \frac{k_1}{k_2} + \frac{E_1 k_1 x_1}{E_2 k_2 x_2} \right) f + E_2 k_1 x_1 \right] \quad (\text{VII}, 398)$$

Если условие (VII, 397) выполняется, то правая часть выражения (VII, 398) отрицательная величина и, следовательно, функция $f(t)$ будет убывающей функцией t до тех пор, пока правая часть выражения не обратится в нуль в некоторый момент времени t^* . При этом $f(t^*)$ должна быть отрицательной величиной. Таким образом, в интервале изменения переменной t от 0 до t^* функция $f(t)$ обязательно изменяет знак, т. е. проходит через нулевое значение, и тем самым условие (VII, 396) всегда можно удовлетворить.

Условие (VII, 397) может быть использовано, кроме того, для определения ограничения при выборе $T_{\text{вх}}$ (VII, 394)

$$T_{\text{вх}} < \frac{E_2 - E_1}{R_{\Gamma} \ln \frac{E_2 k_{2, \infty} x_2^{(0)}}{E_1 k_{1, \infty} x_1^{(0)}}} \quad (\text{VII, 399})$$

которое, естественно, справедливо лишь при выполнении неравенства

$$\frac{E_2 k_{2, \infty} x_2^{(0)}}{E_1 k_{1, \infty} x_1^{(0)}} > 1 \quad (\text{VII, 400})$$

При нарушении соотношения (VII, 400) максимальное значение входной температуры ограничивается только величиной T_2 в условиях (VII, 358).

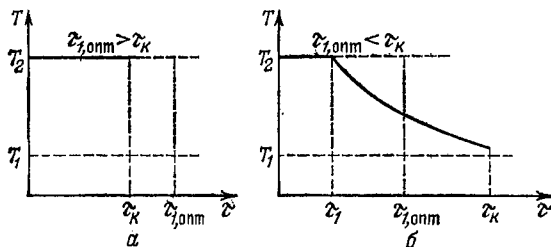


Рис. VII-16. Возможные типы оптимальных температурных профилей без ограничения нижнего предела температуры.

Если в процессе выбора температуры $T_{\text{вх}}$, удовлетворяющей условию (VII, 396), оказывается, что найденное значение $T_{\text{опт}}(0)$ превышает предельно допустимое T_2 , то начальный участок реактора $[0, \tau_1]$ при оптимальном температурном режиме должен работать в изотермических условиях с температурой T_2 . Размеры этого участка, т. е. значение τ_1 , должны определяться также при расчете оптимального температурного профиля в аппарате.

Величины $x_1(\tau_1)$ и $x_2(\tau_1)$, полученные в конце изотермического участка при температуре T_2 , могут рассматриваться как начальные условия для системы уравнений (VII, 355), совместное интегрирование которой с уравнением (VII, 392) при условии

$$T(\tau_1) = T_2 \quad (\text{VII, 401})$$

дает оптимальный температурный профиль в интервале $[\tau_1, \tau_k]$.

Таким образом, задача расчета оптимального температурного профиля сводится к подбору такой величины τ_1 , чтобы при интегрировании системы уравнений (VII, 355) до τ_1 при $T = T_2$ и далее уже совместно с уравнением (VII, 392) при условии (VII, 401) в момент $t = \tau_k$ выполнялось условие (VII, 393). Возможный температурный профиль в реакторе показан на рис. VII-16, б.

Следует отметить, что при этом имеется возможность обеспечения оптимального температурного режима реактора, который будет также удовлетворять условию (VII, 393) и целиком состоять из изотермического участка при температуре T_2 . Этот случай может представиться, когда заданное значение τ_k оказывается меньше значения $\tau_{1, \text{опт}}$, определяемого для изотермических условий реакции при температуре T_2 по формуле (III, 109) (рис. VII-16, а).

Рассмотрим теперь влияние ограничения на минимальное значение температуры в реакторе. Поскольку уравнение (VII, 392) характеризует убывание температуры по длине аппарата, возможен случай, когда температура $T_{\text{опт}}(t)$ при некоторой величине $t = \tau_2$ окажется равной минимальному допустимому значению T_1 (VII, 358).

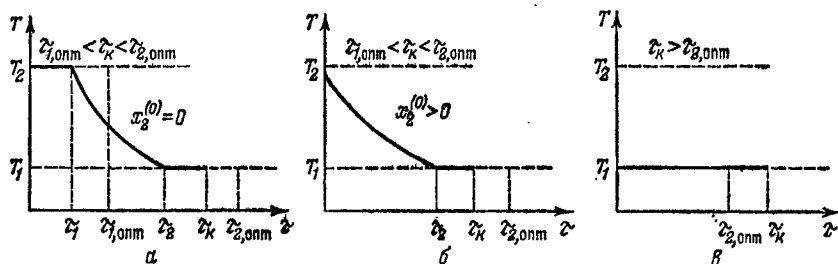


Рис. VII-17. Возможные типы оптимальных температурных профилей с ограничением нижнего предела температуры.

Очевидно, что конечный участок реактора при этом должен работать в изотермических условиях при температуре $T = T_1$. Возможные типы соответствующих профилей показаны на рис. VII-17.

Вариант III. Пусть теперь $E_1 > E_2$. Для этого варианта производная, определяемая выражением (VII, 379), всегда положительна. Следовательно, оптимальным температурным режимом, при котором функция $H(T)$ имеет максимальное значение, будет режим при максимальной температуре T_2 (VII, 358). Оптимальное значение при этом можно рассчитать по формуле (III, 109):

$$\tau_k = \frac{\ln k_2(T_2) - \ln k_1(T_2)}{k_2(T_2) - k_1(T_2)} \quad (\text{VII, 402})$$

Синтез оптимальных регуляторов

Математический аппарат принципа максимума позволяет найти оптимальный закон управления, что может быть использовано для определения структуры регулятора, реализующего этот закон, т. е. при решении задачи синтеза оптимального регулятора для системы автоматического управления.

На примере управления простейшим технологическим объектом ниже рассмотрена задача синтеза регулятора, оптимального по быстродействию.

В качестве объекта управления простейшего типа принята цилиндрическая емкость C (рис. VII-18), в которой происходит смешение вещества входящего потока v_1 . Из емкости непрерывно отбирается некоторое количество v_2 находящейся в ней смеси. Задачей управления является поддержание заданного значения уровня h_0 в емкости C при возможных изменениях величины отбираемого потока v_2 . Регулирование осуществляется изменением величины входящего потока v_1 , для чего на линии его подачи установлен регулирующий орган P , представляющий собой заслонку, привод которой перемещается с помощью электродвигателя D . Скорость и направление вращения электродвигателя D определяются величиной и знаком приложенного к нему напряжения U .

В результате решения задачи оптимального управления следует найти закон изменения величины напряжения $U(t)$, приложенного к электродвигателю D , при котором любое отклонение уровня в емкости C , вызываемое изменением потока v_2 , устраняется за минимальное время.

Уравнение, описывающее изменение уровня в емкости C , может быть записано в виде

$$S \frac{dh}{dt} = v_1 - v_2 \quad (\text{VII, 403})$$

где через S обозначено сечение емкости C , а v_1 и v_2 представляют собой объемные расходы поступающего и отводимого потоков.

Предположим, что скорость вращения электродвигателя пропорциональна величине и знаку приложенного напряжения U и что величина потока изменяется линейно при постоянной скорости вращения электродвигателя. Тогда уравнение, описывающее закон изменения величины v_1 в зависимости от приложенного к электродвигателю напряжения U , можно представить в виде:

$$\frac{dv_1}{dt} = kU \quad (\text{VII, 404})$$

где параметр k включает совокупное влияние характеристик электродвигателя, привода и заслонки.

На допустимую величину напряжения U естественно наложить ограничения

$$-U_0 \leq U \leq U_0 \quad (\text{VII, 405})$$

которые обусловлены типом используемого электродвигателя.

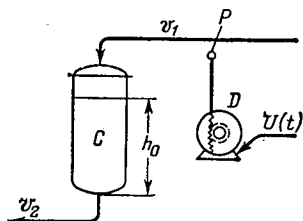


Рис. VII-18. Объект управления.

Очевидно, что в стационарном режиме переменные объекта должны быть связаны соотношениями:

$$h = h_0 \quad v_{10} = v_{20} \quad U = 0 \quad (\text{VII}, 406)$$

При изменении потока v_2 на величину Δv_2 в новом стационарном состоянии поток v_1 также изменится на величину Δv_1 , равную Δv_2 , т. е. должно выполняться равенство:

$$\Delta v_1 = \Delta v_2 \quad (\text{VII}, 407)$$

Уровень h , который может изменяться в течение переходного процесса, должен возвращаться к заданному значению:

$$h = h_0 \quad (\text{VII}, 408)$$

Если же принять за характеристику уровня его отклонение от заданного значения Δh , то для стационарного состояния всегда будет выполняться условие:

$$\Delta h = 0 \quad (\text{VII}, 409)$$

С введением новых переменных

$$x_1 = \Delta v_1 \quad x_2 = S \Delta h \quad \xi = \Delta v_2 \quad u = kU \quad (\text{VII}, 410)$$

систему уравнений (VII, 403) и (VII, 404) можно записать как

$$\frac{dx_2}{dt} = \varphi_2 = x_1 - \xi \quad (\text{VII}, 411a)$$

$$\frac{dx_1}{dt} = \varphi_1 = u \quad (\text{VII}, 411b)$$

При этом ограничения (VII, 405) будут:

$$-u_0 \leq u \leq u_0 \quad (\text{VII}, 412)$$

Сформулируем теперь задачу оптимального управления, которую решим с использованием принципа максимума. В приведенной выше постановке задачи регулирования она эквивалентна следующей.

Для процесса, описываемого системой уравнений (VII, 411) при наличии ограничений (VII, 412) на управляющее воздействие u , найти закон изменения $u(t)$, при применении которого процесс из произвольного начального состояния

$$x_1(0) = x_1^{(0)} \quad x_2(0) = x_2^{(0)} \quad (\text{VII}, 413)$$

переходит в конечное состояние

$$x_1(\tau_k) = \xi \quad x_2(\tau_k) = 0 \quad (\text{VII}, 414)$$

за минимальное время τ_k .

В рассматриваемой формулировке эта задача является частным случаем задачи 1 (см. стр. 348).

Функция H (VII, 224) задачи 1 с учетом системы уравнений (VII, 411) имеет вид:

$$H = \lambda_1 \varphi_1 + \lambda_2 \varphi_2 = \lambda_1 u + \lambda_2 (x_1 - \xi) \quad (\text{VII}, 415)$$

Управляющее воздействие u входит линейно в уравнения процесса (VII, 411) и функцию H (VII, 415). Следовательно (см. задачу 7, стр. 354), оптимальное управление будет кусочно-постоянной функцией $u(t)$, принимающей в интервалах постоянства предельные значения управляющего воздействия из ограничений (VII, 412). При этом максимальное значение функции H (VII, 415) получается, если при выборе знака управляющего воздействия соблюдается правило:

$$u_{\text{опт}} = \begin{cases} u_0, & \text{если } \lambda_1 > 0 \\ -u_0, & \text{если } \lambda_1 < 0 \end{cases} \quad (\text{VII, 416})$$

которое может быть также записано в виде:

$$u_{\text{опт}} = u_0 \operatorname{sgn} \lambda_1 \quad (\text{VII, 417})$$

Здесь sgn — функция знака:

$$\operatorname{sgn} x = \begin{cases} +1 & x > 0 \\ 0 & x = 0 \\ -1 & x < 0 \end{cases} \quad (\text{VII, 418})$$

Система уравнений для функций $\lambda_1(t)$ и $\lambda_2(t)$ (VII, 225) в данном случае будет:

$$\frac{d\lambda_1}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_1} = -\lambda_2 \quad (\text{VII, 419a})$$

$$\frac{d\lambda_2}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_2} = 0 \quad (\text{VII, 419б})$$

причем граничные значения для функций $\lambda_1(t)$ и $\lambda_2(t)$ не определены, так как условиями (VII, 413) и (VII, 414) заданы значения всех переменных состояния x_1 и x_2 в исходном и конечном состояниях процесса.

Уравнения (VII, 419) могут быть проинтегрированы, в результате чего получим:

$$\lambda_1(t) = -C_2 t + C_1 \quad (\text{VII, 420a})$$

$$\lambda_2(t) = C_2 \quad (\text{VII, 420б})$$

В соотношениях (VII, 420) C_1 и C_2 — постоянные интегрирования.

Из выражения (VII, 420a) следует, что функция $\lambda_1(t)$ является линейной функцией t и, таким образом, может менять свой знак не более одного раза при изменении переменной t . Поэтому оптимальное управление, характеризуемое выражением (VII, 417), также может иметь не более одной точки переключения с одного предельного значения на другое.

В интервалах постоянства величины управляющего воздействия систему уравнений (VII, 411), описывающую изменение перемен-

ных x_1 и x_2 , можно проинтегрировать, откуда находим:

$$x_1(t) = ut + C_3 \quad (\text{VII, 421a})$$

$$x_2(t) = \frac{1}{2} ut^2 + C_3 t + C_4 \quad (\text{VII, 421b})$$

Если процесс переводится из заданного начального состояния (VII, 413) в конечное (VII, 414) при постоянном управлении одного знака, система соотношений (VII, 421) должна удовлетворять обоим условиям. При этом определению подлежат значения постоянных интегрирования C_3 и C_4 , а также конечный момент времени τ_k , т. е. всего три величины, тогда как условия (VII, 413) и (VII, 414) дают четыре соотношения, которым должны удовлетворять три неизвестные — C_3 , C_4 и τ_k .

Очевидно, что в общем случае нельзя так определить три неизвестных, чтобы они удовлетворяли четырем уравнениям. Поэтому можно прийти к выводу, что оптимальное управление в данном случае должно содержать точку переключения с одного предельного значения на другое (VII, 412). Однако тот частный вариант, когда процесс переводится из некоторого начального состояния $x^{(0)}$ в конечное при использовании постоянного управления, представляет особый интерес и в дальнейшем также подробно рассмотрен.

Для того чтобы получить изображение траектории процесса на фазовой плоскости переменных x_1 и x_2 , можно исключить из уравнений (VII, 421) переменную t , что дает искомое уравнение траектории в виде зависимости $x_2 = x_2(x_1)$. Однако проще найти уравнение траектории интегрированием дифференциального уравнения

$$\frac{dx_2}{dx_1} = \frac{1}{u} (x_1 - \xi) \quad (\text{VII, 422})$$

которое можно получить делением одного из уравнений системы (VII, 411) на другое.

Интегрируя уравнение (VII, 422), получим:

$$x_2 = \frac{1}{2u} x_1^2 - \frac{1}{u} \xi x_1 + C \quad (\text{VII, 423})$$

причем C — постоянная интегрирования.

В результате преобразования соотношения (VII, 423) оно может быть представлено в более удобном виде:

$$x_2 = \frac{1}{2u} (x_1 - \xi)^2 + C - \frac{\xi^2}{2u} \quad (\text{VII, 424})$$

Постоянная интегрирования в уравнении (VII, 424) находится из условия, что траектория, определяемая этим уравнением, проходит через заданную точку $(x_1^{(0)}, x_2^{(0)})$ фазовой плоскости. В результате получим:

$$C = x_2^{(0)} - \frac{1}{2u} (x_1^{(0)} - \xi)^2 + \frac{\xi^2}{2u} \quad (\text{VII, 425})$$

После подстановки значения C (VII, 425) в уравнение (VII, 424) найдем:

$$x_2 = \frac{1}{2u} (x_1 - \xi)^2 + C^* \quad (\text{VII, 426})$$

где

$$C^* = x_2^{(0)} - \frac{1}{2u} (x_1^{(0)} - \xi)^2 \quad (\text{VII, 427})$$

Уравнение (VII, 426) характеризует на фазовой плоскости траекторию, проходящую через произвольную точку с координатами $x_1^{(0)}$ и $x_2^{(0)}$, в том числе и траекторию, проходящую через конечную точку, координаты которой заданы условиями (VII, 414). Поэтому, подставляя значения координат конечной точки траектории из условий (VII, 414) в выражение (VII, 427), получим уравнение траектории, по которой можно попасть в конечное состояние:

$$x_2 = \frac{1}{2u} (x_1 - \xi)^2 \quad (\text{VII, 428})$$

Уравнение (VII, 428) определяет совокупность точек фазовой плоскости, из которых переход в конечное состояние, заданное условиями (VII, 414), возможен при использовании постоянного управления.

До сих пор не принималось во внимание действительное значение управляющего воздействия, которое считалось только постоянным. Если значение u в уравнении (VII, 428) положительно, т. е.

$$u = u_0 \quad (\text{VII, 429})$$

то это уравнение описывает параболу

$$x_2 = \frac{1}{2u_0} (x_1 - \xi)^2 \quad (\text{VII, 430})$$

изображенную на рис. VII-19 (кривая 1), которая обращена выпуклостью вниз.

Из уравнения (VII, 411б) при этом следует, что при $u > 0$ величина x_1 возрастает. Таким образом, движение по траектории, описываемой уравнением (VII, 430), происходит в направлении увеличения значения x_1 , т. е. в направлении, указанном стрелкой на рис. VII-19 для кривой 1. Следовательно, в конечное состояние (VII, 414) при движении под действием управления (VII, 429) процесс может перейти только при движении по левой ветви параболы, определяемой на фазовой плоскости уравнением (VII, 430).

Аналогичным рассуждением можно показать, что если перевод процесса в конечное состояние по траектории (VII, 428) производится под действием управления

$$u = -u_0 \quad (\text{VII, 431})$$

которому соответствует на фазовой плоскости парабола

$$x_2 = -\frac{1}{2u_0} (x_1 - \xi)^2 \quad (\text{VII, 432})$$

представленная на рис. VII-19 (кривая 2), то движение по этой траектории происходит в направлении уменьшения значения x_1 , и в конечном состоянии (VII, 414) процесс перейдет только при движении по правой ветви этой параболы.

Итак, установлено, что левая и правая ветви парабол 1 и 2, изображенных на рис. VII-19, определяют совокупность точек фазовой плоскости, из которых процесс можно перевести в конечное состояние (VII, 414) под действием управления только одного зна-

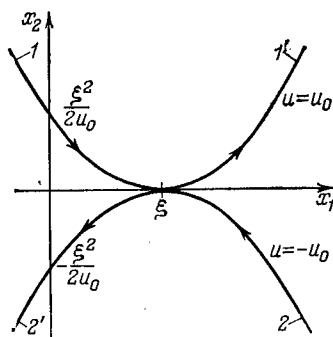


Рис. VII-19. Характер траектории при постоянном положительном (1) и отрицательном (2) управлении.

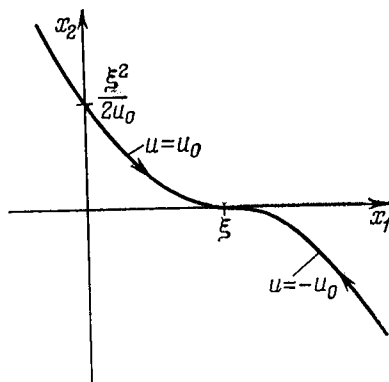


Рис. VII-20. Область начальных состояний, из которых переход в заданное конечное состояние возможен при использовании управления одного знака.

ка (рис. VII-20). Из любых других точек фазовой плоскости $x_1^{(0)}$ и $x_2^{(0)}$, не расположенных на кривой (рис. VII-20), процесс может быть переведен в конечное состояние (VII, 414) лишь при применении управляющего воздействия $u(t)$, имеющего точку переключения с одного предельного значения ограничений (VII, 412) на другое. Нетрудно записать общее уравнение этой кривой, если воспользоваться функцией знака, определяемой соотношениями (VII, 418):

$$x_2 = \frac{1}{2u_0} (x_1 - \xi)^2 \operatorname{sgn} (\xi - x_1) \quad (\text{VII, 433})$$

Поскольку, как было показано выше, оптимальное управление может иметь не более чем одну точку переключения, кривая (VII, 433) (рис. VII-20) является геометрическим местом точек переключения оптимального управления.

Таким образом, любая траектория процесса, для которой линией переключения служит ветвь 1, в начальный момент должна

иметь отрицательное значение управляющего воздействия. Причем она пересекается с этой ветвью только в том случае, если значение постоянной C (VII, 427) в выражении (VII, 426) положительно, т. е. для начального состояния процесса $x_1^{(0)}$ и $x_2^{(0)}$ справедливо соотношение:

$$x_2^{(0)} + \frac{1}{2u_0} (x_1^{(0)} - \xi)^2 > 0 \quad (\text{VII, 434})$$

Движение по траектории (VII, 426) при $u = -u_0$ происходит в направлении уменьшения величины x_1 , причем целесообразно рассматривать лишь участок траектории (VII, 426), по которому перемещение осуществляется в направлении к линии переключения, представленной на рис. VII-20. С использованием соотношения (VII, 433) условие расположения точки с координатами x_1 и x_2 выше линии переключения может быть записано как

$$x_2 - \frac{1}{2u_0} (x_1 - \xi)^2 \operatorname{sgn} (\xi - x_1) > 0 \quad (\text{VII, 435})$$

Очевидно, что для любой точки фазовой плоскости (x_1, x_2) , удовлетворяющей условию (VII, 435), всегда найдется траектория, проходящая через точку (x_1, x_2) , двигаясь по которой под действием управления $u = -u_0$ можно попасть на ветвь 1 линии переключения.

Аналогично можно показать, что и для точек фазовой плоскости, расположенных ниже линии переключения, т. е. удовлетворяющих условию

$$x_2 - \frac{1}{2u_0} (x_1 - \xi)^2 \operatorname{sgn} (\xi - x_1) < 0 \quad (\text{VII, 436})$$

всегда найдется траектория (VII, 426), двигаясь по которой под действием управления $u = u_0$ можно попасть на ветвь 2 линии переключения, откуда процесс уже под действием управления $u = -u_0$ переводится в конечное состояние.

Полученные траектории совместно с линией переключения и являются искомыми оптимальными траекториями, по которым процесс переводится из произвольного начального состояния (x_1, x_2) в заданное конечное (VII, 414) за минимальное время τ_h . На рис. VII-21 показаны семейства таких траекторий, покрывающие всю фазовую плоскость. Оптимальное управление для любой точки фазовой плоскости определяется условиями (VII, 435) и (VII, 436). Если начальное состояние (x_1, x_2) удовлетворяет условию (VII, 435) или (VII, 436), то начальное значение управления должно быть равно $u \equiv -u_0$ (или $u = u_0$) вплоть до момента

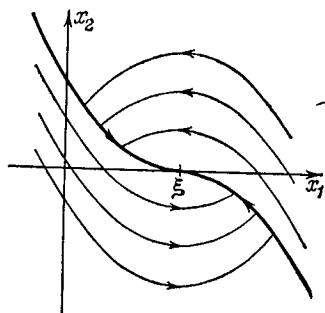


Рис. VII-21. Общая картина фазовых траекторий при оптимальном управлении.

времени τ_s , когда траектория попадет на линию переключения, где знак управления изменится на обратный.

Аналитическое выражение оптимального закона управления при этом может быть представлено в виде:

$$u_{\text{опт}} = u_0 \operatorname{sgn} \left[\frac{1}{2u_0} (x_1 - \xi)^2 \operatorname{sgn} (\xi - x_1) - x_2 \right] \quad (\text{VII}, 437)$$

Таким образом выведено аналитическое выражение оптимального закона управления (VII, 437), в соответствии с которым про-

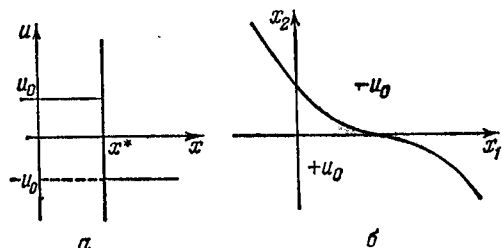


Рис. VII-22. Переключательные характеристики линейного (а) и нелинейного (б) реле.

исходит переключение управляющего воздействия u с одного предельного значения на другое.

Обычные, или линейные, переключатели, как правило, имеют переключательную характеристику, изображенную на рис. VII-22, а, и срабатывают при достижении соответствующего значения входной величины x^* . Такие переключатели в теории автоматического

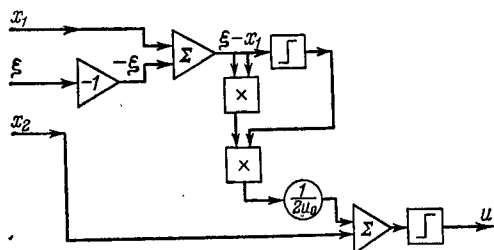


Рис. VII-23. Реализация нелинейного реле на аналоговых элементах.

управления называют линейными *релейными элементами*. Соотношение (VII, 437) определяет закон переключения, который может рассматриваться как закон переключения некоторого *нелинейного реле* с характеристикой, показанной на рис. VII-22, б. Нелинейное реле в отличие от линейного имеет входным сигналом не одно значение регулируемой величины, а несколько (x_1 , x_2 и ξ), совокупность которых в данном случае полностью описывает состояние процесса и позволяет найти оптимальное управление, требуемое в данный момент времени.

Практическая реализация нелинейного реле, характеризуемого соотношением (VII, 437), не вызывает трудностей. Для этого необходимы два обычных линейных реле и схема, которая выполняет арифметические операции в соотношении (VII, 437). Возможная

схема реализации нелинейного реле, описываемого выражением (VII, 437), на аналоговых элементах изображена на рис. VII-23, где использованы обозначения, принятые в аналоговой технике.

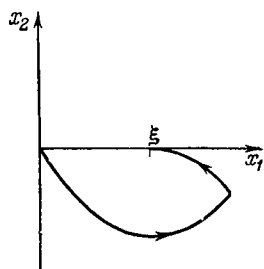


Рис. VII-24. Оптимальная траектория процесса регулирования при ступенчатом изменении величины отбора.

Итак, при применении оптимального регулятора для управления процессом (рис. VII-18) нужно замерять значения всех переменных, определяющих состояние процесса в каждый момент времени, т. е. уровня h в емкости C (переменная x_2), величины отбираемого потока v_2 (переменная ξ) и величины подаваемого в емкость C потока v_1 (переменная x_1). Знание всех этих величин позволяет при использовании закона управления (VII, 437) получить оптимальные в смысле быстродействия переходные процессы в рассматриваемом объекте регулирования.

На рис. VII-24 приведена траектория процесса на фазовой плоскости при оптимальном переходном процессе для ступенчатого изменения отбора из емкости v_1 на величину ξ . На рис. VII-25 показаны также соответствующие кривые изменения во времени всех переменных процесса.

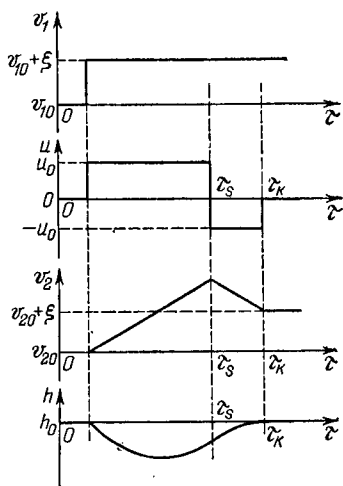


Рис. VII-25. Временной характер изменения параметров в процессе регулирования.

Характерные временные точки процесса регулирования, т. е. момент переключения τ_s и общее время переходного процесса τ_k , могут быть найдены совместным решением уравнений (VII, 421) с уравнением линии переключения (VII, 433):

$$\tau_s = A + \sqrt{\frac{1}{u_0} \left| x_2^{(0)} + \frac{1}{2} (x_1^{(0)} - \xi) A \right|} \quad (\text{VII, 438})$$

$$\tau_k = A + 2 \sqrt{\frac{1}{u_0} \left| x_2^{(0)} + \frac{1}{2} (x_1^{(0)} - \xi) A \right|} \quad (\text{VII, 439})$$

где

$$A = \frac{x_1^{(0)} - \xi}{u_0} \operatorname{sgn} \left[x_2^{(0)} - \frac{(x_1^{(0)} - \xi)^2}{2u_0} \operatorname{sgn}(\xi - x_1^{(0)}) \right] \quad (\text{VII, 440})$$

Для случая, показанного на рис. VII-24 и VII-25, имеем $x_1^{(0)} = 0$ и $x_2^{(0)} = 0$, откуда из выражений (VII, 438) — (VII, 440) получим:

$$\tau_s = \frac{\xi}{u_0} \left(\frac{\sqrt{2}}{2} + 1 \right) \quad \tau_k = \frac{\xi}{u_0} (\sqrt{2} + 1) \quad (\text{VII, 441})$$

В задаче 7 (см. стр. 354) был рассмотрен целый класс задач, когда оптимальное управление является кусочно-постоянной функцией, принимающей предельные значения в интервалах своего постоянства. Очевидно, что если тем или иным способом получают закон оптимального управления в аналитической форме, всегда с помощью линейных элементов можно реализовать этот закон в виде схемы, выполняющей роль оптимального регулятора. В общем же случае, когда явная форма закона оптимального управления не может быть найдена, для оптимального управления необходимо использовать вычислительную машину, которая должна непрерывно решать оптимальную задачу по известным в данный момент времени параметрам состояния процесса и определять для этого момента оптимальное управление.

4. ПРИНЦИП МАКСИМУМА ДЛЯ ДИСКРЕТНЫХ ПРОЦЕССОВ

Вообще говоря, принцип максимума в той формулировке, которая была получена для непрерывных процессов, к дискретным процессам неприменим [7, 14]. Однако, несмотря на некоторое различие в конечных соотношениях оптимальности, представляется целесообразным все же сохранить название «принцип максимума» и для дискретных процессов, поскольку математический аппарат решения оптимальной задачи в обоих случаях имеет некоторое сходство.

При оптимизации дискретных многостадийных процессов использование математического аппарата принципа максимума зачастую оказывается более эффективным, чем применение метода динамического программирования. В особенности это относится к решению оптимальных задач, где размерность отдельных стадий затрудняет использование вычислительной процедуры динамического программирования [11].

Вывод общих соотношений

Рассмотрим вывод основных соотношений принципа максимума для дискретного многостадийного процесса, математическое описание которого задано в виде системы уравнений:

$$\left. \begin{aligned} x_k^{(i)} &= \varphi_k^{(i)}(x_1^{(i-1)}, \dots, x_m^{(i-1)}, u_1^{(i)}, \dots, u_r^{(i)}) \\ k &= 1, \dots, m \quad i = 1, \dots, N \end{aligned} \right\} \quad (\text{VII, 442})$$

или в векторной форме:

$$x^{(i)} = \varphi^{(i)}(x^{(i-1)}, u^{(i)}) \quad (\text{VII, 443})$$

Здесь $x^{(i)}$ — вектор переменных состояния i -й стадии:

$$x^{(i)} = (x_1^{(i)}, x_2^{(i)}, \dots, x_m^{(i)}) \quad (\text{VII, 444})$$

а величина $u^{(i)}$ — вектор управляющих воздействий i -й стадии:

$$u^{(i)} = (u_1^{(i)}, u_2^{(i)}, \dots, u_r^{(i)}) \quad (\text{VII, 445})$$

Предполагается, что исходное состояние потока, поступающего на первую стадию, задано:

$$x^{(0)} = (x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \dots, x_m^{(0)}) \quad (\text{VII, 446})$$

причем $x_k^{(0)}$ — известные величины.

Допустим, что результат, достигаемый на каждой стадии процесса, оценивается некоторой скалярной величиной r_i , заданной в виде функциональной зависимости

$$r_i = r_i(x^{(i-1)}, u^{(i)}) \quad (\text{VII, 447})$$

и что критерий оптимальности для N -стадийного процесса может быть записан как аддитивная функция критериев (VII, 447), определенных для каждой стадии:

$$R = \sum_{i=1}^N r_i(x^{(i-1)}, u^{(i)}) \quad (\text{VII, 448})$$

В частном случае, когда все r_i , за исключением r_N , равны нулю, может возникнуть задача, в которой критерий оптимальности R зависит только от состояния выхода последней стадии x^N :

$$R = R(x^{(N)}) \quad (\text{VII, 449})$$

Можно также показать, что оптимальная задача с критерием оптимальности вида (VII, 448) всегда может быть сведена к задаче с критерием, заданным в форме (VII, 449). Для этого нужно ввести дополнительную переменную состояния стадии $x_{m+1}^{(i)}$, определяемую как

$$x_{m+1}^{(i)} = x_{m+1}^{(i-1)} + r_i(x^{(i-1)}, u^{(i)}) \quad (\text{VII, 450})$$

Для переменной x_{m+1} , очевидно, будет выполняться условие:

$$x_{m+1}^{(0)} = 0 \quad (\text{VII, 451})$$

Из вида соотношения (VII, 450) следует, что

$$\sum_{i=1}^N x_{m+1}^{(i)} = \sum_{i=1}^N x_{m+1}^{(i-1)} + \sum_{i=1}^N r_i(x^{(i-1)}, u^{(i)}) \quad (\text{VII, 452})$$

а так как

$$\sum_{i=1}^N x_{m+1}^{(i)} - \sum_{i=1}^N x_{m+1}^{(i-1)} = x_{m+1}^{(N)}$$

то

$$R = x_{m+1}^{(N)} = \sum_{i=1}^N r_i(x^{(i-1)}, u^{(i)}) \quad (\text{VII, 453})$$

Таким образом оптимальная задача с критерием (VII, 448) свелась к задаче, в которой требуется получить максимальное или минимальное значение переменной $x_{m+1}^{(N)}$ на выходе последней стадии, т. е. найден критерий типа (VII, 449).

Не нарушая общности выводов, можно также считать, что критерий оптимальности задан в виде линейной функции переменных состояния последней стадии процесса:

$$R = \sum_{k=1}^m c_k x_k^{(N)} \quad (\text{VII, 454})$$

Критерий любого другого типа может быть сведен к виду (VII, 454) введением дополнительных переменных состояния. В частности, в случае критерия (VII, 449), если функция $R(x^{(N)})$ определена как нелинейная функция значений $x_k^{(N)}$ ($k = 1, \dots, m$), можно ввести дополнительную переменную x_{m+1} , для которой $x_{m+1}^{(i)} = 0$ ($i = 1, \dots, N-1$), и

$$x_{m+1}^{(N)} = R(x^{(N)}) \quad (\text{VII, 455})$$

При этом критерий оптимальности процесса можно представить в форме соотношения (VII, 454), если положить:

$$R = x_{m+1}^{(N)} \quad (\text{VII, 456})$$

В дальнейшем для упрощения формы записи математических выражений при выводе соотношений принципа максимума примем, что рассматривается многостадийный процесс, у которого векторы состояния стадий и управления имеют размерности, равные единице, т. е. $m = r = 1$, и математическое описание стадии определяется одним уравнением:

$$x^{(i)} = \varphi^{(i)}(x^{(i-1)}, u^{(i)}) \quad (\text{VII, 457})$$

Для вывода основных соотношений принципа максимума предположим, что оптимальные управления $u_{\text{опт}}^{(i)}$, максимизирующие критерий оптимальности

$$R = c x^{(N)} \quad (\text{VII, 458})$$

известны для всех стадий процесса.

Проанализируем теперь результат изменения оптимальных управлений $u_{\text{опт}}^{(i)}$ на всех стадиях процесса на произвольные, но бесконечно малые величины $\varepsilon \delta u^{(i)}$, где ε — бесконечно малый положительный параметр, а $\delta u^{(i)}$ — произвольная конечная величина, положительная или отрицательная. Другими словами, заменим на всех стадиях процесса оптимальные управления $u_{\text{опт}}^{(i)}$ на неоптимальные

$$u^{(i)} = u_{\text{опт}}^{(i)} + \varepsilon \delta u^{(i)} \quad (\text{VII, 459})$$

которые отличаются от оптимальных на бесконечно малые величины $\varepsilon \delta u^{(i)}$.

Это изменение управлений приведет к тому, что состояние выхода каждой стадии также изменится и будет отличаться от состояния $x_{\text{опт}}^{(i)}$, соответствующего оптимальным управлениям на всех стадиях, на бесконечно малую величину $\varepsilon \delta x^{(i)}$, т. е.

$$x^{(i)} = x_{\text{опт}}^{(i)} + \varepsilon \delta x^{(i)} \quad (\text{VII, 460})$$

Изменение $\varepsilon \delta x^{(i)}$ на каждой стадии вызывается не только изменением управления на ней, но также и изменением состояния входа этой стадии, обусловленным изменением управлений на предыдущих стадиях процесса. Таким образом, с учетом математического описания i -й стадии можно получить соотношение

$$x_{\text{опт}}^{(i)} + \varepsilon \delta x^{(i)} = \varphi^{(i)}(x_{\text{опт}}^{(i-1)} + \varepsilon \delta x^{(i-1)}, u_{\text{опт}}^{(i)} + \varepsilon \delta u^{(i)}) \quad (\text{VII, 461})$$

откуда в результате разложения правой части в ряд по степеням ε с точностью до членов первого порядка малости по ε находим:

$$x_{\text{опт}}^{(i)} + \varepsilon \delta x^{(i)} = \varphi^{(i)}(x_{\text{опт}}^{(i-1)}, u_{\text{опт}}^{(i)}) + \frac{\partial \varphi^{(i)}(x_{\text{опт}}^{(i-1)}, u_{\text{опт}}^{(i)})}{\partial x^{(i-1)}} \varepsilon \delta x^{(i-1)} + \\ + \frac{\partial \varphi^{(i)}(x_{\text{опт}}^{(i-1)}, u_{\text{опт}}^{(i)})}{\partial u^{(i)}} \varepsilon \delta u^{(i)} \quad (\text{VII, 462})$$

Поскольку при оптимальном управлении выполняется условие

$$x_{\text{опт}}^{(i)} = \varphi^{(i)}(x_{\text{опт}}^{(i-1)}, u_{\text{опт}}^{(i)}) \quad (\text{VII, 463})$$

из выражения (VII, 462) следует, что

$$\varepsilon \delta x^{(i)} = \frac{\partial \varphi^{(i)}(x_{\text{опт}}^{(i-1)}, u_{\text{опт}}^{(i)})}{\partial x^{(i-1)}} \varepsilon \delta x^{(i-1)} + \frac{\partial \varphi^{(i)}(x_{\text{опт}}^{(i-1)}, u_{\text{опт}}^{(i)})}{\partial u^{(i)}} \varepsilon \delta u^{(i)} \quad (\text{VII, 464})$$

Умножим левую и правую части полученного выражения (VII, 464) на вспомогательную величину $\lambda^{(i)}$

$$\varepsilon \lambda^{(i)} \delta x^{(i)} = \lambda^{(i)} \frac{\partial \varphi^{(i)}(x_{\text{опт}}^{(i-1)}, u_{\text{опт}}^{(i)})}{\partial x^{(i-1)}} + \lambda^{(i)} \frac{\partial \varphi^{(i)}(x_{\text{опт}}^{(i-1)}, u_{\text{опт}}^{(i)})}{\partial u^{(i)}} \varepsilon \delta u^{(i)} \quad (\text{VII, 465})$$

и определим последовательность величин $\lambda^{(i)}$ ($i = 0, 1, \dots, N$) для всего многостадийного процесса соотношениями:

$$\lambda^{(i-1)} = \lambda^{(i)} \frac{\partial \varphi^{(i)}(x_{\text{опт}}^{(i-1)}, u_{\text{опт}}^{(i)})}{\partial x^{(i-1)}} \quad i = 1, \dots, N \quad (\text{VII, 466})$$

Тогда с учетом соотношений (VII, 466) выражение (VII, 465) может быть также записано в виде:

$$\varepsilon \lambda^{(i)} \delta x^{(i)} = \varepsilon \lambda^{(i-1)} \delta x^{(i-1)} + \varepsilon \lambda^{(i)} \frac{\partial \varphi^{(i)}(x_{\text{опт}}^{(i-1)}, u_{\text{опт}}^{(i)})}{\partial u^{(i)}} \delta u^{(i)} \quad (\text{VII, 467})$$

Просуммируем левую и правую части выражения (VII, 467) от 1 до N :

$$\varepsilon (\lambda^{(N)} \delta x^{(N)} - \lambda^{(0)} \delta x^{(0)}) = \varepsilon \sum_{i=1}^N \lambda^{(i)} \frac{\partial \Phi^{(i)}(x_{\text{опт}}^{(i-1)}, u_{\text{опт}}^{(i)})}{\partial u^{(i)}} \delta u^{(i)} \quad (\text{VII, 468})$$

Принимая во внимание, что $\delta x^{(0)} = 0$, поскольку на значение $x^{(0)}$ изменение управляющих воздействий не оказывает влияния, из выражения (VII, 468) получим:

$$\varepsilon \lambda^{(N)} \delta x^{(N)} = \varepsilon \sum_{i=1}^N \lambda^{(i)} \frac{\partial \Phi^{(i)}(x_{\text{опт}}^{(i-1)}, u_{\text{опт}}^{(i)})}{\partial u^{(i)}} \delta u^{(i)} \quad (\text{VII, 469})$$

Если значение $x^{(N)}$ изменяется на величину $\varepsilon \delta x^{(N)}$, то критерий оптимальности R , описываемый в данном случае выражением (VII, 458), также изменится на величину $\varepsilon \delta R$, которая определится как

$$\varepsilon \delta R = \varepsilon c \delta x^{(N)} \quad (\text{VII, 470})$$

Учитывая, что для нахождения последовательности величин $\lambda^{(i)}$ ($i = 0, 1, \dots, N$) с использованием соотношения (VII, 466) необходимо задать какое-либо значение $\lambda^{(i)}$, отличное от нуля, положим:

$$\lambda^{(N)} = c \quad (\text{VII, 471})$$

Следовательно, из сравнения выражений (VII, 469) и (VII, 470) можно получить следующее соотношение:

$$\varepsilon \delta R = \varepsilon \sum_{i=1}^N \lambda^{(i)} \frac{\partial \Phi^{(i)}(x_{\text{опт}}^{(i-1)}, u_{\text{опт}}^{(i)})}{\partial u^{(i)}} \delta u^{(i)} \quad (\text{VII, 472})$$

Так как при отклонении от оптимального управления возможно только уменьшение критерия оптимальности R , то должно выполняться условие:

$$\varepsilon \delta R \leq 0 \quad (\text{VII, 473})$$

При этом из выражения (VII, 472) следует, что

$$\varepsilon \sum_{i=1}^N \lambda^{(i)} \frac{\partial \Phi^{(i)}(x_{\text{опт}}^{(i-1)}, u_{\text{опт}}^{(i)})}{\partial u^{(i)}} \delta u^{(i)} \leq 0 \quad (\text{VII, 474})$$

Величины $\delta u^{(i)}$ по определению произвольны, поэтому соотношение (VII, 474) может выполняться лишь в том случае, если все без исключения слагаемые суммы будут неположительными величинами, т. е.

$$\lambda^{(i)} \frac{\partial \Phi^{(i)}(x_{\text{опт}}^{(i-1)}, u_{\text{опт}}^{(i)})}{\partial u^{(i)}} \delta u^{(i)} \leq 0 \quad i = 1, \dots, N \quad (\text{VII, 475})$$

Полученные соотношения (VII, 475), где величины $\lambda^{(i)}$ ($i = 1, \dots, N$) удовлетворяют выражениям (VII, 466) при условии (VII, 471), и являются математическим выражением принципа максимума для одномерных дискретных многостадийных процессов. Проводя аналогичные выкладки для процесса с произвольными размерностями векторов состояния и управления, найдем следующие соотношения:

$$\sum_{j=1}^r \delta u_j^{(i)} \sum_{k=1}^m \lambda_k^{(i)} \frac{\partial \varphi_k^{(i)}(x_{\text{опт}}^{(i-1)}, u_{\text{опт}}^{(i)})}{\partial u_j^{(i)}} \leq 0 \quad i = 1, \dots, N \quad (\text{VII, 476})$$

Здесь величины $\lambda_k^{(i)}$ удовлетворяют уравнениям

$$\lambda_k^{(i-1)} = \sum_{l=1}^m \lambda_l^{(i)} \frac{\partial \varphi_l^{(i)}(x_{\text{опт}}^{(i-1)}, u_{\text{опт}}^{(i)})}{\partial x_k^{(i-1)}} \leq 0 \quad k = 1, \dots, m \quad i = 1, \dots, N \quad (\text{VII, 477})$$

и выполняются условия

$$\lambda_k^{(N)} = c_k \quad k = 1, \dots, m \quad (\text{VII, 478})$$

в которых c_k являются заданными коэффициентами в общем выражении критерия оптимальности (VII, 454).

Когда оптимальные управления $u_{\text{опт}}^{(i)}$ на стадиях процесса находятся внутри допустимой области их изменения U и величины $\delta u_j^{(i)}$ могут принимать положительные и отрицательные значения, соотношения (VII, 476) выполняются только при условии, что

$$\sum_{k=1}^m \lambda_k^{(i)} \frac{\partial \varphi_k^{(i)}(x_{\text{опт}}^{(i-1)}, u_{\text{опт}}^{(i)})}{\partial u_j^{(i)}} = 0 \quad i = 1, \dots, N \quad j = 1, \dots, r \quad (\text{VII, 479})$$

Если же среди оптимальных управляющих воздействий имеются такие, которые находятся на границе допустимой области U , то для них должно выполняться условие:

$$\delta u_j^{(i)} \sum_{k=1}^m \lambda_k^{(i)} \frac{\partial \varphi_k^{(i)}(x_{\text{опт}}^{(i-1)}, u_{\text{опт}}^{(i)})}{\partial u_j^{(i)}} \leq 0 \quad (\text{VII, 480})$$

При этом сумма в выражении (VII, 480) может быть как положительной, так и отрицательной в зависимости от знака в допустимой области вариации оптимального управления $\delta u_j^{(i)}$, определяемой выражением:

$$\delta u_j^{(i)} = u_j^{(i)} - u_{j, \text{опт}}^{(i)} \quad (\text{VII, 481})$$

Так, если оптимальное управление равно верхнему пределу ограничений

$$u_{j, \min}^{(i)} \leq u_j^{(i)} \leq u_{j, \max}^{(i)} \quad (\text{VII, 482})$$

то $\delta u_j^{(i)} < 0$ и, следовательно,

$$\sum_{k=1}^m \lambda_k^{(i)} \frac{\partial \varphi_k^{(i)}(x_{\text{опт}}^{(i-1)}, u_{\text{опт}}^{(i)})}{\partial u_j^{(i)}} \geq 0 \quad (\text{VII}, 483)$$

и наоборот.

Левую часть соотношения (VII, 476) можно считать дифференциалом некоторой функции H_i , определяемой как функция переменных $u_j^{(i)}$. При этом условие (VII, 476) означает, что дифференциал δH_i этой функции отрицателен или равен нулю при использовании оптимального управления $u_{\text{опт}}^{(i)}$ ($j = 1, \dots, r$) для многостадийного процесса.

Определим функцию H_i как

$$H_i = \sum_{k=1}^m \lambda_k^{(i)} \varphi_k^{(i)}(x^{(i-1)}, u^{(i)}) \quad (\text{VII}, 484)$$

Тогда с помощью данной функции условия (VII, 476) могут быть записаны как

$$\delta H_i(\lambda^{(i)}, x_{\text{опт}}^{(i-1)}, u_{\text{опт}}^{(i)}) \leq 0 \quad i = 1, \dots, N \quad (\text{VII}, 485)$$

При этом, если оптимальные значения управляющих воздействий находятся внутри допустимой области U , то выполняется условие:

$$\frac{\partial H_i}{\partial u_j^{(i)}} = 0 \quad i = 1, \dots, N \quad j = 1, \dots, r \quad (\text{VII}, 486)$$

а для случая, когда оптимальные значения управлений попадают на границу области U :

$$\frac{\partial H_i}{\partial u_j^{(i)}} \delta u_j^{(i)} \leq 0 \quad i = 1, \dots, N \quad j = 1, \dots, r \quad (\text{VII}, 487)$$

Введение функции H_i позволяет также записать в компактной форме соотношения (VII, 477) для величин $\lambda^{(i)}$:

$$\lambda_k^{(i-1)} = \frac{\partial H_i}{\partial x_k^{(i-1)}} \quad i = 1, \dots, N \quad k = 1, \dots, m \quad (\text{VII}, 488)$$

и представить математические описания стадий в виде

$$x_k^{(i)} = \frac{\partial H_i}{\partial \lambda_k^{(i)}} \quad i = 1, \dots, N \quad k = 1, \dots, m \quad (\text{VII}, 489)$$

Соотношения (VII, 486) и (VII, 487), представляющие собой необходимые условия оптимальности управления для дискретного многостадийного процесса, можно применять при определении этого управления, подобно тому как соотношения максимума используются для непрерывных процессов.

Вычислительные аспекты дискретного принципа максимума

Вычислительная процедура расчета оптимальных значений управляющих воздействий для всех стадий процесса во многом аналогична процедуре нахождения оптимального управления для непрерывных процессов (см. стр. 334).

В рассмотренном выше случае многостадийного процесса предполагалось, что состояние входа первой стадии задано условиями (VII, 446). Вспомогательные переменные $\lambda^{(N)}$ заданы в соответствии с условиями (VII, 478) для последней стадии процесса. Как и для непрерывных процессов, оптимальные управления для многостадийного процесса можно определять как в направлении от начала к его концу, так и в обратном направлении. В обоих случаях для начала расчета необходимо задаться значениями величин $\lambda_k^{(0)}$ ($k = 1, \dots, m$) при расчете от начала к концу процесса, или значениями переменных состояния $x_k^{(N)}$ ($k = 1, \dots, m$) при расчете от конца к началу.

Пусть решается оптимальная задача, для которой критерий оптимальности задан в виде выражения (VII, 448), и, следовательно, для ее решения вводится дополнительная переменная $x_{m+1}^{(t)}$, согласно соотношению (VII, 450). Тогда, как можно показать, из выражения (VII, 477) следует, что

$$\lambda_{m+1}^{(t-1)} = \lambda_{m+1}^{(t)} \quad (\text{VII, 490})$$

так как все

$$\frac{\partial \Phi_l^{(t)}}{\partial x_{m+1}^{(i-1)}} = 0 \quad l = 1, \dots, m \quad (\text{VII, 491})$$

и только

$$\frac{\partial \Phi_{m+1}^{(t)}}{\partial x_{m+1}^{(i-1)}} = 1 \quad (\text{VII, 492})$$

с учетом соотношения (VII, 450).

Таким образом, все величины $\lambda_{m+1}^{(i)}$ ($i = 0, 1, \dots, N$) равны одной и той же величине $\lambda_{m+1}^{(N)}$, которая, в свою очередь, принимая во внимание условия (VII, 478), будет равна:

$$\lambda_{m+1}^{(N)} = c_{m+1} \quad (\text{VII, 493})$$

где

$$c_{m+1} = 1 \quad (\text{VII, 494})$$

если ставится задача максимизации критерия (VII, 448), и

$$c_{m+1} = -1 \quad (\text{VII, 495})$$

если ставится задача минимизации.

Рассмотрим процедуру расчета оптимальных управлений в направлении от конца процесса к началу, т. е. от N -й стадии к первой:

1. Задаются значения величин $x_k^{(N)}$ ($k = 1, \dots, m$).

2. Из соотношений (VII, 442) находятся величины $x_k^{(N-1)}$, т. е. эти соотношения представляются в виде:

$$x_k^{(i-1)} = \psi_k^{(i)}(x^{(i)}, u^{(i)}) \quad (\text{VII, 496})$$

3. С использованием соотношений (VII, 496) функция H_N представляется как функция только управляющих воздействий $u_j^{(N)}$ на N -й стадии, поскольку величины $x_k^{(N)}$ и $\lambda_k^{(N)}$ заданы:

$$H_N = H_N(u_1^{(N)}, \dots, u_r^{(N)}) \quad (\text{VII, 497})$$

4. Из условий (VII, 486) или (VII, 487) определяются оптимальные управления $u_{j\text{ опт}}^{(N)}$ на N -й стадии.

5. Найденные оптимальные управления $u_{j\text{ опт}}^{(N)}$ характеризуют согласно соотношениям (VII, 496) значения $x_k^{(N-1)}$ ($k = 1, \dots, m$).

6. По уравнениям (VII, 477) рассчитываются значения $\lambda_k^{(N-1)}$.

7. Процедура расчета повторяется, начиная с п. 2 для всех предшествующих стадий процесса до тех пор, пока не будут получены значения $x_k^{(0)}$.

8. Если рассчитанные величины $x_k^{(0)}$ не совпадают с заданными условиями (VII, 446), расчет повторяется с п. 1 при других значениях $x_k^{(N)}$ ($k = 1, \dots, m$). Этот цикл расчетов повторяется до тех пор, пока вычисляемые значения $x_k^{(0)}$ не совпадут с заданными (VII, 446) с необходимой степенью точности. При этом можно использовать тот же метод оценки приближения, который был рассмотрен для непрерывных процессов (см. стр. 347).

Аналогично определяются оптимальные управления при расчете от начала процесса к концу. Данное направление счета может иногда даже оказаться более легким, чем расчет в обратном направлении, поскольку при этом отпадает необходимость представления математического описания стадий в виде соотношений (VII, 496), что может вызвать определенные трудности. В этом случае порядок расчета складывается из следующих этапов:

1. Задаются величины $\lambda_k^{(1)}$ ($k = 1, \dots, m$).

2. Составляется функция H_1 (VII, 484), которая при этом является функцией только управляющих воздействий $u_j^{(1)}$ на первой стадии, так как величины $x_k^{(0)}$ и $\lambda_k^{(1)}$ заданы:

$$H_1 = H_1(u_1^{(1)}, \dots, u_r^{(1)}) \quad (\text{VII, 498})$$

3. Из условий (VII, 486) или (VII, 487) находятся оптимальные управления на первой стадии.

4. Из соотношений (VII, 442) определяются значения $x_k^{(1)}$, соответствующие оптимальным управлениям $u_{j\text{ опт}}^{(1)}$ на первой стадии.

5. Решением системы линейных уравнений (VII, 477) рассчитываются величины $\lambda_k^{(2)}$ как функции управления на второй стадии:

$$\lambda_k^{(2)} = \psi_k^{(2)}(u_1^{(2)}, \dots, u_r^{(2)}) \quad (\text{VII, 499})$$

Во многих случаях решить эту систему уравнений в аналитическом виде значительно проще, чем определить вид соотношений (VII, 496) при расчете в обратном направлении.

6. Составляется функция H_2 для второй стадии и вычисляются оптимальные управления $u_{j, \text{опт}}^{(2)}$.

7. Процедура расчета повторяется с п. 4 для всех последующих стадий процесса, включая N -ю.

8. Если полученные в результате расчета значения $\lambda_k^{(N)}$ ($k = 1, \dots, m$) совпадают с заданными условиями (VII, 478) с необходимой степенью точности, то расчет закончен. В противном случае он повторяется с п. 2 для других значений $\lambda_k^{(1)}$ ($k = 1, \dots, m$).

Описанные алгоритмы обычно используются для выполнения расчетов на вычислительных машинах, применение которых особенно необходимо, если процесс характеризуется сложными уравнениями (VII, 442).

5. ПРИМЕРЫ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ДИСКРЕТНОГО ПРИНЦИПА МАКСИМУМА ДЛЯ РЕШЕНИЯ ОПТИМАЛЬНЫХ ЗАДАЧ

Значительное число примеров использования принципа максимума для решения оптимальных задач из области химической технологии приведено в литературе [9—12]. Там же рассмотрены некоторые вычислительные приемы, позволяющие значительно расширить возможности его применения для оптимизации сложных процессов.

Примеры, изложенные ниже, не являются сложными, однако на них можно познакомиться с основными приемами решения оптимальных задач для дискретных многостадийных процессов с использованием математического аппарата дискретного принципа максимума.

Оптимизация каскада реакторов идеального смешения для реакций произвольного порядка

Эта задача рассматривалась выше с применением метода неопределенных множителей Лагранжа и ее решение было сведено к использованию рекуррентного соотношения (IV, 180) для расчета оптимального распределения степеней превращения по всем реакторам каскада. Ниже рекуррентное соотношение (IV, 180) будет получено исходя из общих соотношений принципа максимума для дискретных процессов.

Математическое описание i -го реактора изотермического каскада для реакции $A \rightarrow P$, скорость которой определяется выражением

$$w_A = -k x_A^{n_A} \quad (\text{VII}, 500)$$

имеет вид материального баланса по реагенту A :

$$v x_A^{(i-1)} - v x_A^{(i)} - V_r^{(i)} k (x_A^{(i)})^{n_A} = 0 \quad (\text{VII}, 501)$$

или

$$x_1^{(i-1)} - x_1^{(i)} - u^{(i)} (x_1^{(i)})^{n_A} = 0 \quad (\text{VII}, 502)$$

где введены обозначения:

$$x_A^{(i)} = x_1^{(i)} \quad \frac{V_r^{(i)} k}{v} = u^{(i)} \quad (\text{VII}, 503)$$

Задача состоит в выборе величин $u^{(i)}$ ($i = 1, \dots, N$) так, чтобы для заданного значения $x_1^{(N)}$, т. е. для заданной степени превращения реагента A , величина

$$R^* = \sum_{i=1}^N u^{(i)} \quad (\text{VII}, 504)$$

была минимальной. Для решения задачи введем вспомогательную переменную $x_2^{(i)}$, которую в соответствии с выражением (VII, 450) определим как

$$x_2^{(i)} = x_2^{(i-1)} + u^{(i)} \quad x_2^{(0)} = 0 \quad i = 1, \dots, N \quad (\text{VII}, 505)$$

Тогда критерий оптимальности рассматриваемого многостадийного процесса будет:

$$R = c_2 x_2^{(N)} \quad (\text{VII}, 506)$$

где

$$c_2 = -1 \quad (\text{VII}, 507)$$

так как ищется минимальное значение $x_2^{(N)}$.

Функции H_i в соответствии с выражением (VII, 484) имеют вид:

$$H_i = \lambda_1^{(i)} \varphi_1^{(i)}(x_1^{(i-1)}, u^{(i)}) + \lambda_2^{(i)} \varphi_2^{(i)}(x_2^{(i-1)}, u^{(i)}) \quad (\text{VII}, 508)$$

где функция $\varphi_1^{(i)}(x_1^{(i-1)}, u^{(i)})$ должна быть найдена решением уравнения (VII, 502) относительно величины $x_1^{(i)}$. Очевидно, что в общем случае произвольного порядка реакции n_A вид этой функции нельзя определить в аналитической форме. Однако, как показано ниже, при этом не обязательно иметь выражение для $\varphi_1^{(i)}(x_1^{(i-1)}, u^{(i)})$ в явном виде.

Согласно соотношениям (VII, 490) и (VII, 493) все величины $\lambda_2^{(i)}$ равны:

$$\lambda_2^{(i)} = -1 \quad i = 0, 1, \dots, N \quad (\text{VII}, 509)$$

Подставим значения $\lambda_2^{(t)}$ выражения для функции H_i (VII, 508):

$$H_i = \lambda_1^{(i)} \varphi_1^{(i)}(x_1^{(i-1)}, u^{(i)}) - x_2^{(i-1)} - u^{(i)} \quad (\text{VII, 510})$$

Оптимальные значения $u_{\text{опт}}^{(i)}$ нужно вычислять из условия, что функции H_i (VII, 510) удовлетворяют условиям (VII, 485). Поскольку на выбор величин $u^{(i)}$ в данном случае не накладываются ограничения, оптимальные значения $u^{(i)}$ можно определить из условий (VII, 486), которые позволяют записать следующее уравнение для i -й стадии процесса:

$$\frac{\partial H_i}{\partial u^{(i)}} = \lambda_1^{(i)} \frac{\partial \varphi_1^{(i)}(x_1^{(i-1)}, u^{(i)})}{\partial u^{(i)}} - 1 = 0 \quad (\text{VII, 511})$$

Аналогично для $(i+1)$ -й стадии:

$$H_{i+1} = \lambda_1^{(i+1)} \varphi_1^{(i+1)}(x_1^{(i)}, u^{(i+1)}) - x_2^{(i)} - u^{(i+1)} \quad (\text{VII, 512})$$

$$\frac{\partial H_{i+1}}{\partial u^{(i+1)}} = \lambda_1^{(i+1)} \frac{\partial \varphi_1^{(i+1)}(x_1^{(i)}, u^{(i+1)})}{\partial u^{(i+1)}} - 1 = 0 \quad (\text{VII, 513})$$

Величина $\lambda_1^{(i)}$ может быть выражена через $\lambda_1^{(i+1)}$ с помощью соотношения (VII, 488), из которого с учетом выражения (VII, 512) найдем:

$$\lambda_1^{(i)} = \frac{\partial H_{i+1}}{\partial x_1^{(i)}} = \lambda_1^{(i+1)} \frac{\partial \varphi_1^{(i+1)}(x_1^{(i)}, u^{(i+1)})}{\partial x_1^{(i)}} \quad (\text{VII, 514})$$

Подставляя выражение для величины $\lambda_1^{(i)}$ (VII, 514) в условие (VII, 511), получим:

$$\lambda_1^{(i+1)} \frac{\partial \varphi_1^{(i+1)}(x_1^{(i)}, u^{(i+1)})}{\partial x_1^{(i)}} \cdot \frac{\partial \varphi_1^{(i)}(x_1^{(i-1)}, u^{(i)})}{\partial u^{(i)}} - 1 = 0 \quad (\text{VII, 515})$$

Теперь из уравнений (VII, 513) и (VII, 515) можно найти соотношение

$$\lambda_1^{(i+1)} \frac{\partial \varphi_1^{(i+1)}(x_1^{(i)}, u^{(i+1)})}{\partial u^{(i+1)}} = \lambda_1^{(i+1)} \frac{\partial \varphi_1^{(i+1)}(x_1^{(i)}, u^{(i+1)})}{\partial x_1^{(i)}} \cdot \frac{\partial \varphi_1^{(i)}(x_1^{(i-1)}, u^{(i)})}{\partial u^{(i)}} \quad (\text{VII, 516})$$

которое после сокращения на $\lambda_1^{(i+1)}$ запишется как

$$\frac{\partial \varphi_1^{(i+1)}(x_1^{(i)}, u^{(i+1)}) / \partial u^{(i+1)}}{\partial \varphi_1^{(i+1)}(x_1^{(i)}, u^{(i+1)}) / \partial x_1^{(i)}} = \frac{\partial \varphi_1^{(i)}(x_1^{(i-1)}, u^{(i)})}{\partial u^{(i)}} \quad (\text{VII, 517})$$

Соотношение (VII, 517) совместно с уравнениями (VII, 502) определяет зависимость между оптимальными значениями $u^{(i)}$ и $u^{(i+1)}$ для соседних реакторов каскада. Чтобы найти эту зависимость,

необходимо знать выражения для производных, входящих в соотношение (VII, 517). Указанные производные могут быть вычислены из уравнений (VII, 502) по правилу дифференцирования неявных функций, согласно которому производная $\partial y / \partial x_k$ от функции y , заданной в неявном виде

$$f(y, x_1, x_2) = 0 \quad (\text{VII, 518})$$

определяется по формуле

$$\frac{\partial y}{\partial x_k} = - \frac{\partial f(y, x_1, x_2) / \partial x_k}{\partial f(y, x_1, x_2) / \partial y} \quad (\text{VII, 519})$$

В рассматриваемом случае требуется вычислить производную

$$\frac{\partial \Phi_1^{(i)}(x_1^{(i-1)}, u^{(i)})}{\partial u^{(i)}} = \frac{\partial x_1^{(i)}}{\partial u^{(i)}} \quad (\text{VII, 520})$$

причем величина $x_1^{(i)}$ в неявном виде задана уравнением (VII, 502)

$$f^{(i)}(x_1^{(i)}, x_1^{(i-1)}, u^{(i)}) = x_1^{(i)} + u^{(i)}(x_1^{(i)})^{n_A} - x_1^{(i-1)} = 0 \quad (\text{VII, 521})$$

Дифференцируя выражение (VII, 521), находим

$$\frac{\partial f^{(i)}}{\partial u^{(i)}} = (x_1^{(i)})^{n_A} \quad (\text{VII, 522})$$

$$\frac{\partial f^{(i)}}{\partial x_1^{(i)}} = 1 + n_A u^{(i)} (x_1^{(i)})^{n_A-1} = 1 - n_A + n_A \frac{x_1^{(i-1)}}{x_1^{(i)}} \quad (\text{VII, 523})$$

и с учетом формулы (VII, 519) определяем

$$\frac{\partial \Phi_1^{(i)}(x_1^{(i-1)}, u^{(i)})}{\partial u^{(i)}} = - \frac{(x_1^{(i)})^{n_A}}{1 - n_A + n_A \frac{x_1^{(i-1)}}{x_1^{(i)}}} \quad (\text{VII, 524})$$

Аналогично можно также найти:

$$\frac{\partial \Phi_1^{(i+1)}(x_1^{(i)}, u^{(i+1)})}{\partial u^{(i+1)}} = - \frac{(x_1^{(i+1)})^{n_A}}{1 - n_A + n_A \frac{x_1^{(i)}}{x_1^{(i+1)}}} \quad (\text{VII, 525})$$

$$\frac{\partial \Phi_1^{(i+1)}(x_1^{(i)}, u^{(i+1)})}{\partial x_1^{(i)}} = \frac{1}{1 - n_A + n_A \frac{x_1^{(i)}}{x_1^{(i+1)}}} \quad (\text{VII, 526})$$

Подставляя выражения (VII, 524) — (VII, 526) в соотношение (VII, 517), получим:

$$(x_1^{(i+1)})^{n_A} = \frac{(x_1^{(i)})^{n_A}}{1 - n_A + n_A \frac{x_1^{(i-1)}}{x_1^{(i)}}} \quad (\text{VII, 527})$$

Если теперь ввести в рассмотрение величину

$$\eta_i = \frac{x_1^{(i)}}{x_1^{(i-1)}} \quad (\text{VII, 528})$$

которая определяет долю непревращенного реагента A в i -м реакторе, то с использованием обозначения (VII, 528) соотношение (VII, 527) может быть записано в виде

$$\eta_{i+1}^A = \frac{\eta_i}{n_A - (n_A - 1) \eta_i} \quad (\text{VII, 529})$$

или в иной форме

$$\eta_{i+1} = \left(\frac{\eta_i}{n_A - (n_A - 1) \eta_i} \right)^{\frac{1}{n_A}} \quad (\text{VII, 530})$$

Выражение (VII, 530) в точности совпадает с выведенным ранее рекуррентным соотношением (IV, 180), описывающим оптимальное соотношение между величинами η_i и η_{i+1} в соседних реакторах каскада.

Оптимизация процессов экстракции с перекрестным током

Схематическое изображение процесса экстракции с перекрестным током представлено на рис. II-22 (см. стр. 73). Ограничимся рассмотрением случая, когда рециркулируемый поток отсутствует, т. е. $L^r = 0$, и условия равновесия (II, 72) могут быть представлены линейным соотношением:

$$x_{1e}^{(i)} = \alpha x_1^{(i)} \quad (\text{VII, 531})$$

в котором α — некоторый постоянный коэффициент.

Математическое описание i -й стадии процесса (II, 73) при сделанных предположениях имеет вид выражения:

$$x_1^{(i)} = \frac{x_1^{(i-1)}}{1 + \frac{v^{(i)}}{F} \alpha} \quad (\text{VII, 532})$$

определяющего концентрацию извлекаемого из раствора вещества на выходе i -й стадии.

Допустим, что оптимальная задача формулируется как задача отыскания оптимального распределения заданного количества промывного раствора

$$V = \sum_{i=1}^N v^{(i)} \quad (\text{VII, 533})$$

при котором достигается максимальный эффект извлечения, т. е. концентрация извлекаемого вещества на выходе N -й стадии минимальна.

Для того чтобы в рассматриваемой постановке оптимальной задачи учесть наличие ограничения (VII, 533) на выбор значений $v^{(i)}$ ($i = 1, \dots, N$), введем дополнительную переменную $x_2^{(i)}$, которую определим соотношением:

$$x_2^{(i)} = x_2^{(i-1)} + v^{(i)} \quad (\text{VII, 534})$$

Составим выражение для функции H_i (VII, 484)

$$H_i = \lambda_1^{(i)} \Phi_1^{(i)} + \lambda_2^{(i)} \Phi_2^{(i)} = \lambda_1^{(i)} \frac{x_1^{(i-1)}}{1 + \frac{v^{(i)}}{F} \alpha} + \lambda_2^{(i)} (x_2^{(i-1)} + v^{(i)}) \quad (\text{VII, 535})$$

и запишем соотношения (VII, 488), характеризующие связь между величинами $\lambda_k^{(i)}$:

$$\lambda_1^{(i)} = \frac{\partial H_{i+1}}{\partial x_1^{(i)}} = \lambda_1^{(i+1)} \frac{1}{1 + \frac{v^{(i+1)}}{F} \alpha} \quad (\text{VII, 536})$$

$$\lambda_2^{(i)} = \frac{\partial H_{i+1}}{\partial x_2^{(i)}} = \lambda_2^{(i+1)} \quad (\text{VII, 537})$$

Запишем теперь уравнения (VII, 486), которым должны удовлетворять оптимальные значения $v^{(i)}$ для i -й стадии и $(i+1)$ -й:

$$\frac{\partial H_i}{\partial v^{(i)}} = -\frac{\alpha}{F} \lambda_1^{(i)} \frac{x_1^{(i-1)}}{\left(1 + \frac{v^{(i)}}{F} \alpha\right)^2} + \lambda_2^{(i)} = 0 \quad (\text{VII, 538})$$

$$\frac{\partial H_{i+1}}{\partial v^{(i+1)}} = -\frac{\alpha}{F} \lambda_1^{(i+1)} \frac{x_1^{(i)}}{\left(1 + \frac{v^{(i+1)}}{F} \alpha\right)^2} + \lambda_2^{(i+1)} = 0 \quad (\text{VII, 539})$$

С учетом соотношения (VII, 537) из выражений (VII, 538) и (VII, 539) можно найти уравнение

$$\lambda_1^{(i)} \frac{x_1^{(i-1)}}{\left(1 + \frac{v^{(i)}}{F} \alpha\right)^2} = \lambda_1^{(i+1)} \frac{x_1^{(i)}}{\left(1 + \frac{v^{(i+1)}}{F} \alpha\right)^2} \quad (\text{VII, 540})$$

подставляя в которое выражения (VII, 532) и (VII, 536), получим равенство

$$\lambda_1^{(i+1)} \frac{x_1^{(i-1)}}{\left(1 + \frac{v^{(i+1)}}{F} \alpha\right) \left(1 + \frac{v^{(i)}}{F} \alpha\right)^2} = \lambda_1^{(i+1)} \frac{x_1^{(i-1)}}{\left(1 + \frac{v^{(i+1)}}{F} \alpha\right)^2 \left(1 + \frac{v^{(i)}}{F} \alpha\right)} \quad (\text{VII, 541})$$

откуда следует, что

$$v^{(i)} = v^{(i+1)} \quad (\text{VII, 542})$$

Таким образом найдено, что при оптимальном распределении заданного количества промывного раствора V по всем стадиям процесса это количество должно быть поровну распределено между ними, т. е.

$$v^{(i)} = \frac{V}{N} \quad i = 1, \dots, N \quad (\text{VII}, 543)$$

что и является решением сформулированной выше оптимальной задачи.

6. СВЯЗЬ ПРИНЦИПА МАКСИМУМА С ДРУГИМИ МЕТОДАМИ ОПТИМИЗАЦИИ

Одна и та же оптимальная задача может быть решена с использованием различных методов оптимизации, поэтому представляет интерес рассмотреть взаимосвязь различных методов решения оптимальных задач.

Предположим, что математическое описание управляемого процесса задано в форме векторного уравнения:

$$\frac{dx}{dt} = \Phi(x, u) \quad (\text{VII}, 544)$$

Допустим также, что для процесса задан критерий оптимальности в виде функционала

$$I = \int_{t^{(0)}}^{t^{(k)}} \Phi_0(x, u) dt \quad (\text{VII}, 545)$$

минимальное значение которого требуется обеспечить выбором оптимального закона управления $u_{\text{опт}}(t)$.

Запишем сначала соотношения, к которым приводит использование математического аппарата принципа максимума. Согласно общей процедуре применения этого метода вводится функция $\tilde{H}$ (VII, 92) (ниже используется только векторная форма записи всех соотношений):

$$\tilde{H}(\lambda_0, \lambda, x, u) = \lambda_0 \Phi_0(x, u) + \lambda \Phi(x, u) \quad (\text{VII}, 546)$$

Здесь λ_0 — постоянная величина:

$$\lambda_0 = -1 \quad (\text{VII}, 547)$$

а функция $\lambda(t)$ удовлетворяет векторному уравнению

$$\frac{d\lambda}{dt} = -\lambda_0 \frac{\partial \Phi_0(x, u)}{\partial x} - \lambda \frac{\partial \Phi(x, u)}{\partial x} \quad (\text{VII}, 548)$$

Оптимальное управление $u_{\text{опт}}(t)$ при этом определяется из условия максимума функции $\tilde{H}$ (VII, 546), которое при отсутствии

ограничений на выбор управления может быть заменено условием

$$\frac{\partial H}{\partial u} = \lambda_0 \frac{\partial \varphi_0(x, u)}{\partial u} + \lambda \frac{\partial \varphi(x, u)}{\partial u} = 0 \quad (\text{VII}, 549)$$

Оптимальное управление находится совместным интегрированием уравнений (VII, 544) и (VII, 548) с учетом выбора управления $u(t)$ в каждый момент времени t из условия (VII, 549).

Получим теперь соотношения, к которым приводит применение метода неопределенных множителей Лагранжа (см. стр. 186). Рассматривая уравнение (VII, 544) как ограничение типа равенств, составим вспомогательную функцию Φ (IV, 210), которую представим в виде:

$$\Phi = \int_{t^{(0)}}^{t^{(k)}} \varphi_0(x, u) dt + \int_{t^{(0)}}^{t^{(k)}} \lambda [dx - \varphi(x, u) dt] \quad (\text{VII}, 550)$$

С учетом преобразования (IV, 211) выражение (VII, 550) может быть также записано как

$$\Phi = \lambda x \int_{t^{(0)}}^{t^{(k)}} + \int_{t^{(0)}}^{t^{(k)}} \left[\varphi_0(x, u) - x \frac{d\lambda}{dt} - \lambda \varphi(x, u) \right] dt \quad (\text{VII}, 551)$$

откуда дифференцированием по x и u получим соотношения

$$\frac{\partial \Phi}{\partial x} \rightarrow \frac{\partial \varphi_0(x, u)}{\partial x} - \frac{d\lambda}{dt} - \lambda \frac{\partial \varphi(x, u)}{\partial x} = 0 \quad (\text{VII}, 552)$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial u} \rightarrow \frac{\partial \varphi_0(x, u)}{\partial u} - \lambda \frac{\partial \varphi(x, u)}{\partial u} = 0 \quad (\text{VII}, 553)$$

Если теперь ввести в рассмотрение дополнительный множитель

$$\lambda_0 = -1 \quad (\text{VII}, 554)$$

то соотношения (VII, 552) и (VII, 553) можно представить как

$$\frac{\partial \lambda}{dt} = -\lambda_0 \frac{\partial \varphi_0(x, u)}{\partial x} - \lambda \frac{\partial \varphi(x, u)}{\partial x} \quad (\text{VII}, 555)$$

$$\lambda_0 \frac{\partial \varphi_0(x, u)}{\partial u} + \lambda \frac{\partial \varphi(x, u)}{\partial u} = 0 \quad (\text{VII}, 556)$$

и в точности совпадут с выражениями (VII, 548) и (VII, 549), найденными при помощи принципа максимума.

Выведем теперь соотношения, определяющие оптимальное управление, которые могут быть получены при использовании математического аппарата классического вариационного исчисления. В этом случае векторное уравнение математического описания процесса может рассматриваться как система неголономных связей (V, 121) для задачи отыскания условного экстремума функционала (VII, 545).

Введением новой функции (V, 124):

$$\Phi^* = \Phi_0(x, u) + \lambda \left[\frac{dx}{dt} - \varphi(x, u) \right] \quad (\text{VII, 557})$$

задача сводится к задаче отыскания безусловного экстремума функционала

$$I = \int_{t^{(0)}}^{t^{(k)}} \Phi^*(x, x', u) dt \quad (\text{VII, 558})$$

с двумя неизвестными функциями $x(t)$ и $u(t)$, для которого система уравнений Эйлера (V, 65) будет:

$$\frac{\partial \Phi^*}{\partial x} - \frac{d}{dt} \cdot \frac{\partial \Phi^*}{\partial x'} = 0 \quad (\text{VII, 559})$$

$$\frac{\partial \Phi^*}{\partial u} - \frac{d}{dt} \cdot \frac{\partial \Phi^*}{\partial u'} = 0 \quad (\text{VII, 560})$$

Воспользовавшись выражением (VII, 557) для функции Φ^* , можно записать уравнения (VII, 559) и (VII, 560) в виде:

$$\frac{\partial \Phi_0(x, u)}{\partial x} - \lambda \frac{\partial \varphi(x, u)}{\partial x} - \frac{d\lambda}{dt} = 0 \quad (\text{VII, 561})$$

$$\frac{\partial \Phi_0(x, u)}{\partial u} - \lambda \frac{\partial \varphi(x, u)}{\partial u} = 0 \quad (\text{VII, 562})$$

Уравнения (VII, 561) и (VII, 562) тождественно совпадают с уравнениями (VII, 552) и (VII, 553) и, следовательно, могут быть представлены в виде соотношений принципа максимума (VII, 548) и (VII, 549).

Наконец, при использовании динамического программирования оптимальное управление можно определить в результате решения уравнения Беллмана (VI, 146)

$$-\frac{\partial f}{\partial t} = \max_u \left\{ \Phi_0(x, u) + \frac{\partial f}{\partial x} \varphi(x, u) \right\} \quad (\text{VII, 563})$$

которое эквивалентно системе уравнений:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\Phi_0(x, u) - \frac{\partial f}{\partial x} \varphi(x, u) \quad (\text{VII, 564})$$

$$\frac{\partial \Phi_0(x, u)}{\partial u} + \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial \varphi(x, u)}{\partial u} = 0 \quad (\text{VII, 565})$$

Полагая

$$\lambda = -\frac{\partial f}{\partial x} \quad \lambda_0 = -1 \quad (\text{VII, 566})$$

найдем, что соотношения (VII, 564) и (VII, 565) эквивалентны системе уравнений

$$\frac{d\lambda}{dt} = -\lambda_0 \frac{\partial \Phi_0(x, u)}{\partial x} - \lambda \frac{\partial \varphi(x, u)}{\partial x} \quad (\text{VII, 567})$$

$$\lambda_0 \frac{\partial \Phi_0(x, u)}{\partial u} + \lambda \frac{\partial \varphi(x, u)}{\partial u} = 0 \quad (\text{VII, 568})$$

в точности совпадающей с уравнениями принципа максимума (VII, 548) и (VII, 549).

Таким образом, показано, что результаты, получаемые при применении метода множителей Лагранжа, вариационного исчисления и динамического программирования, можно представить в форме условий принципа максимума. Вместе с тем, соотношения принципа максимума, найденные независимо от этих методов, имеют более общий характер и позволяют решать задачи, которые не могут быть сформулированы в терминах этих методов или требуют специального обоснования возможности их применения.

Препятствием для использования, например, метода неопределенных множителей Лагранжа является наличие ограничений на управляющие воздействия или переменные состояния в форме неравенств. С этим же препятствием приходится сталкиваться при использовании вариационного исчисления, когда в случае ограничений типа неравенств невозможно записать уравнения Эйлера. Наконец, при выводе уравнения Беллмана в динамическом программировании (VI, 146) необходимо допущение о дифференцируемости функции f , для которой записывается это уравнение и которая связана с критерием оптимальности процесса, заданным в виде функционала (VII, 545) соотношением:

$$f(x^{(0)}, t^{(0)}) = \int_{t^{(0)}}^{t^{(k)}} \Phi_0(x_{\text{опт}}, u_{\text{опт}}) dt \quad (\text{VII, 569})$$

Естественно, что непрерывность производных функции f никак не следует из постановки оптимальной задачи как задачи максимизации или минимизации критерия (VII, 545). Более того, для целого ряда процессов (например, описываемых линейными дифференциальными уравнениями) можно показать [5], что функция $f(x, t)$ имеет разрывные производные, и, следовательно, решение таких задач, строго говоря, не может удовлетворять уравнению (VI, 146).

* * *

Математический аппарат принципа максимума, рассмотренный в настоящей главе, является весьма мощным средством решения задач оптимизации. Как правило, решение оптимальной задачи при этом сводится к решению краевой задачи для системы дифференциальных уравнений или для системы конечных уравнений, соответствующих математическому описанию многостадийного процесса. Само по себе решение краевой задачи также может представлять определенные трудности, однако их преодоление во многом компенсируется теми результатами, получение которых еще более осложняется при использовании иных методов оптимизации. В этом смысле принцип максимума оказывается одним из универсальных средств решения оптимальных задач для процессов, описываемых

системами дифференциальных уравнений, а также для многостадийных процессов, за исключением, вероятно, задач оптимизации многостадийных процессов с невысокой размерностью стадий, для которых наиболее эффективным оказывается метод динамического программирования.

ЛИТЕРАТУРА

1. Болтянский В. Г., Гамкрелидзе Р. В., Понтрягин Л. С. ДАН СССР, 1956, т. 110, № 1, с. 159.
2. Болтянский В. Г. ДАН СССР, 1958, т. 119, № 6, с. 192.
3. Гамкрелидзе Р. В. Изв. АН СССР. Математика, 1958, т. 22, № 4, с. 141.
4. Понтрягин Л. С., Болтянский В. Г., Гамкрелидзе Р. В., Мищенко Е. Ф. Математическая теория оптимальных процессов. М., Физматгиз, 1961. 382 с.
5. Болтянский В. Г. Математические методы оптимального управления. М., «Наука», 1966. 408 с.
6. Бутковский А. Г. Теория оптимального управления системами с распределенными параметрами. М., «Наука», 1965. 475 с.
7. Пропой А. И. Автоматика и телемеханика, 1965, № 7.
8. Волин Ю. М., Островский Г. М., Слинко М. Г. Кинетика и катализ, 1963, № 5, с. 798.
9. Островский Г. М., Волин Ю. М. Методы оптимизации химических реакторов. М., «Химия», 1967. 248 с.
10. Фан Л. Ц., Вань Ч. С. Дискретный принцип максимума. Пер. с англ. М., «Мир», 1967. 180 с.
11. Bertucci J. A., Lapidus Leon., AIChE Journal, 1973, v. 19, N. 3, p. 664—665.
12. Delancey G. B. Chem. Eng. Sci., 1973, v. 28, N. 1, p. 105—118.
13. Привалов И. И. Аналитическая геометрия. М., Физматгиз, 1957, 299 с.
14. Болтянский В. Г. Оптимальное управление дискретными системами. М., «Наука», 1973.

ЛИНЕЙНОЕ ПРОГРАММИРОВАНИЕ

Значительное число планово-производственных задач имеет выражение критерия оптимальности в виде линейной функции от входящих в него переменных. При этом на указанные переменные могут быть также наложены некоторые ограничивающие условия в форме линейных равенств и неравенств. Примером подобных задач является задача отыскания такого распределения ограниченного количества сырья между различными производствами, когда общая стоимость получаемой продукции заданного ассортимента максимальна. Другим примером служит транспортная задача, когда необходимо так организовать доставку товаров из различных складов к нескольким пунктам назначения, чтобы затраты на перевозку были минимальны.

Решение этих задач, математическая формулировка которых сводится к требованию максимизации или минимизации критерия оптимальности, заданного в виде линейной функции независимых переменных с линейными ограничениями на них, и составляет предмет специального раздела математики — *линейного программирования*.

Следует отметить, что значение линейного программирования не исчерпывается решением задач только указанных типов. Сообщается [1], что в методах решения задач так называемого выпуклого программирования существенным образом используется вычислительный аппарат линейного программирования. Кроме того, иногда при рассмотрении сложного нелинейного объекта иногда удается представить его математическое описание в некоторых локальных областях изменения независимых переменных приближенными линейными соотношениями. Это позволяет свести исходную задачу оптимизации к задаче линейного программирования. Тем самым становится возможным применять его математический аппарат, который в настоящее время разработан достаточно подробно и при наличии цифровой вычислительной машины обеспечивает решение оптимальных задач весьма высокой размерности.

Постановка задач линейного программирования и их геометрическая интерпретация

$$R = \sum_{j=1}^n c_j x_j \quad (\text{VIII}, 1)$$

На выбор оптимальных значений переменных x_j ($j = 1, \dots, n$) накладываются дополнительные условия, которые заключаются в том, что искомая совокупность значений независимых переменных должна удовлетворять системе линейных соотношений, включающей в общем случае как неравенства, так и равенства:

[illegible]

[illegible]

[illegible]

В задачах линейного программирования обычно предполагается, что независимые переменные x_j неотрицательны, т. е. вместе с условиями (VIII, 2) должны также выполняться условия неотрицательности значений величин x_j :

$$x_j \geq 0 \quad j = 1, \dots, n \quad (\text{VIII}, 3)$$

Условия неотрицательности (VIII, 3) обусловлены тем, что в подавляющем большинстве экономических задач, где линейное программирование находит наиболее широкое применение, независимые переменные, имеющие конкретный физический смысл единиц продукции, цены и т. д., как правило, не могут быть отрицательными.

В дальнейшем, не нарушая общности, будем считать, что все величины b_i в ограничениях (VIII, 2) отличны от нуля и положительны. Очевидно, что когда какое-либо из значений b_i отрицательно, например b_p , достаточно умножить соответствующее соотношение на -1 для того, чтобы представить его в виде, где правая часть уже является положительной величиной.

Если же какая-либо величина b_i равна нулю, то и этот случай легко свести к случаю, когда все b_i отличны от нуля и положительны, введением еще одной независимой переменной x_{n+1} . Так, например, если среди неравенств (VIII, 2a) имеется неравенство с $b_p = 0$, то можно положить

$$a_{p1}x_1 + a_{p2}x_2 + \dots + a_{pn}x_n + x_{n+1} \leq b'_p > 0 \quad (\text{VIII, 4a})$$

и добавить еще одно неравенство вида (VIII, 2a):

$$x_{n+1} \leq b'_p \quad (\text{VIII, 4б})$$

При этом можно считать, что переменная x_{n+1} также входит в выражение критерия оптимальности (VIII, 1), но только с нулевым коэффициентом ($c_{n+1} = 0$).

Аналогичным образом можно поступить с неравенством типа (VIII, 2б), у которого в исходной постановке оптимальной задачи правая часть равна нулю. При этом также предполагается

$$a_{p1}x_1 + a_{p2}x_2 + \dots + a_{pn}x_n + x_{n+1} \geq b'_p > 0 \quad (\text{VIII, 5a})$$

и добавляется неравенство типа (VIII, 2б)

$$x_{n+1} \geq b'_p \quad (\text{VIII, 5б})$$

Значение положительной константы b'_p в соотношениях (VIII, 4) и (VIII, 5) может быть выбрано произвольным.

Для сокращения записи условия (VIII, 2) можно представить в виде:

$$\sum_{j=1}^n a_{ij}x_j \leq b_i \quad i = 1, \dots, m_1 \quad (\text{VIII, 6a})$$

$$\sum_{j=1}^n a_{ij}x_j \geq b_i \quad i = m_1 + 1, \dots, m_2 \quad (\text{VIII, 6б})$$

$$\sum_{j=1}^n a_{ij}x_j = b_i \quad i = m_2 + 1, \dots, m \quad (\text{VIII, 6в})$$

Оптимальным решением задачи линейного программирования или, как его еще называют, *оптимальным планом* является такая совокупность неотрицательных значений независимых переменных

$$x_j = \lambda_j \quad j = 1, \dots, n \quad (\text{VIII, 7})$$

которая удовлетворяет условию (VIII, 2) и обеспечивает в зависимости от постановки задачи максимальное или минимальное значение линейной формы (VIII, 1). В дальнейших рассуждениях обычно подразумевается, что оптимум достигается при максимальном значении формы (VIII, 1). Случай, когда требуется найти минимальное значение линейной формы, может быть сведен к задаче максимизации простым изменением знаков у всех коэффициентов c_j ($j = 1, \dots, n$).

Пример VIII-1. Решить задачу максимизации критерия оптимальности, имеющего вид

$$R = x_1 + x_2 \quad (\text{VIII, 8})$$

при наличии ограничений на переменные x_1 и x_2 типа неравенств

$$2x_1 + x_2 \leq 1 \quad (\text{VIII, 9})$$

$$x_1 + 2x_2 \leq 1 \quad (\text{VIII, 10})$$

$$x_1 \geq 0 \quad x_2 \geq 0 \quad (\text{VIII, 11})$$

Решение. В рассматриваемом случае размерность решаемой задачи равна двум и для наглядного изображения процесса решения можно воспользоваться фазовой плоскостью переменных x_1 и x_2 .

Соотношения (VIII, 9)—(VIII, 11) на фазовой плоскости переменных x_1 и x_2 определяют область X возможных значений этих переменных, которая расположена в первом квадранте системы координат (рис. VIII-1) и ограничена прямыми линиями, соответствующими уравнениям:

$$2x_1 + x_2 = 1 \quad x_1 + 2x_2 = 1 \quad x_1 = 0 \quad x_2 = 0 \quad (\text{VIII, 12})$$

Поскольку производные от критерия оптимальности $\partial R / \partial x_1 = 1$ и $\partial R / \partial x_2 = 1$ непрерывны и нигде в области X не обращаются в нуль, экстремальное значение R (VIII, 8) может достигаться лишь на границе области X .

Критерий оптимальности R (VIII, 8) имеет лишь постоянное значение C вдоль линии l , определяемой уравнением:

$$x_1 + x_2 = C \quad (\text{VIII, 13})$$

На рис. VIII-1 эта линия изображена для случая $C = 0,4$. Если линию l перемещать на плоскости (x_1, x_2) параллельно самой себе, то величина C , а следовательно, значение критерия оптимальности R (VIII, 8) будет изменяться. Невозможно видеть, что увеличению R соответствует перемещение в направлении, указанном на рис. VIII-1 стрелкой. Очевидно, что максимальному значению R в данном случае отвечает предельное положение линии l в области X , когда она проходит через точку S , которая является вершиной многоугольника $OASB$, ограниченного соотношениями (VIII, 9)—(VIII, 11). При этом максимальное значение R определяется координатами вершины S , т. е. координатами точки пересечения линий, соответствующих двум первым уравнениям системы (VIII, 12), совместное решение которых позволяет найти:

$$x_{1, \text{опт}} = \lambda_1 = \frac{1}{3} \quad x_{2, \text{опт}} = \lambda_2 = \frac{1}{3} \quad (\text{VIII, 14})$$

Максимальное значение критерия оптимальности, которое может быть достигнуто в данной задаче, с учетом значений (VIII, 14) составляет:

$$R = \frac{2}{3} \quad (\text{VIII, 15})$$

В примере VIII-1 было найдено, что максимальное значение критерия оптимальности (VIII, 8) обеспечивается при некоторых конечных значениях переменных x_1 и x_2 (VIII, 15). В задачах линейного программирования возможны также случаи, когда решению задачи удовлетворяет бесконечный набор значений независимых переменных. Геометрически это соответствует варианту, когда одна из границ многоугольника области возможных значений пе-

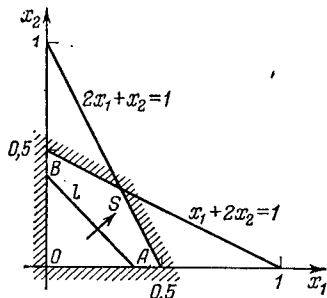


Рис. VIII-1. К примеру VIII-1.

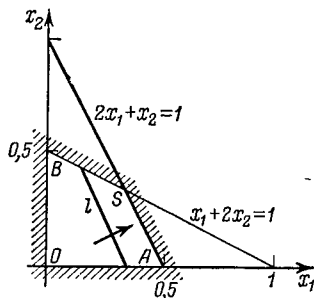


Рис. VIII-2. Случай, когда оптимальным решением являются любая точка отрезка AS.

ременных параллельна линии l , определяемой выражением критерия оптимальности. Если, например, при наличии ограничений (VIII, 9) — (VIII, 11) указанное выражение имеет вид

$$R = 2x_1 + x_2 \quad (\text{VIII, 16})$$

то максимальное значение R в этом случае достигается вдоль всей линии AS' (рис. VIII-2), любая точка которой максимизирует R . Следовательно, решению задачи максимизации R (VIII, 16) удовлетворяет бесконечный набор значений переменных x_1 и x_2 , соответствующий бесконечному множеству точек отрезка AS .

В примере VIII-1 система соотношений (VIII, 9) — (VIII, 11) описывает на фазовой плоскости замкнутую область возможных значений независимых переменных. Иногда система ограничений может определять и незамкнутую область, как, например, при ограничениях:

$$8x_1 - 4x_2 \leq 1 \quad 8x_1 - 2x_2 \leq 2 \quad (\text{VIII, 17})$$

Очевидно (рис. VIII-3), что максимальное значение критерия оптимальности (VIII, 8) при ограничениях (VIII, 17) обеспечивается при бесконечно больших значениях переменных x_1 и x_2 , так как возможность перемещения линии l , соответствующей критерию (VIII, 8), в направлении увеличения R не ограничена.

Существование незамкнутой области изменения независимых переменных еще не означает, что решение оптимальной задачи будет достигаться всегда при бесконечно больших значениях независимых переменных, как, например, в задаче максимизации критерия

$$R = 3x_1 - x_2 \quad (\text{VIII, 18})$$

при ограничениях (VIII, 17) (рис. VIII-4). Максимальное значение критерия (VIII, 18) при этом обеспечивается в точке S , отвечающей конечным значениям независимых переменных x_1 и x_2 .

Аналогично можно рассмотреть также вариант, когда число независимых переменных в задаче оптимизации равно трем. При этом вместо области изменения переменных, изображаемой для

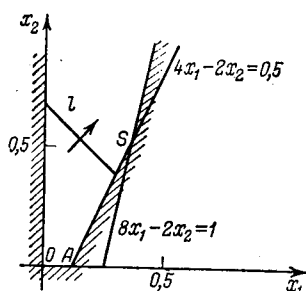


Рис. VIII-3. Пример задачи с незамкнутой областью изменения переменных и неограниченным значением критерия оптимальности.

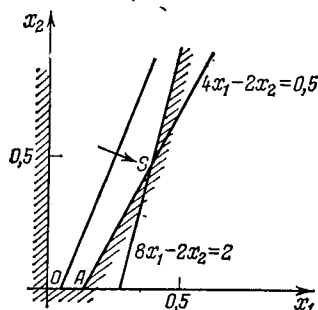


Рис. VIII-4. Пример задачи с незамкнутой областью изменения переменных и ограниченным значением критерия оптимальности.

двухмерной задачи на плоскости (x_1, x_2) замкнутой или незамкнутой многоугольником, будет область X в трехмерном пространстве переменных x_1, x_2 и x_3 , ограниченная соответствующим многогранником условий. В ряде случаев эта область может быть и незамкнутой, т. е. включать точки бесконечно больших значений некоторых независимых переменных.

Вместо линии l , вдоль которой критерий оптимальности двухмерной задачи принимает постоянное значение, в трехмерной задаче необходимо рассматривать уже плоскость.

Максимальное значение критерия оптимальности в трехмерной задаче также обеспечивается на границе допустимой области изменения независимых переменных, т. е. либо в одной из вершин многогранника условий, либо вдоль какого-либо ребра этого многогранника, или, наконец, на какой-нибудь его грани. Разумеется, при наличии незамкнутой области возможен также вариант, когда максимальное значение критерия оптимальности достигается при бесконечно больших значениях некоторых переменных.

В общем случае произвольного числа n независимых переменных наглядная геометрическая интерпретация решения задачи

линейного программирования отсутствует. При этом область допустимых значений независимых переменных в n -мерном пространстве является многогранником, ограниченным гиперплоскостями, уравнения которых задаются ограничениями (VIII, 6) на независимые переменные.

Поверхность, вдоль которой критерий оптимальности имеет в данном случае постоянное значение, также представляет собой гиперплоскость, определяемую конкретным выражением критерия оптимальности (VIII, 1).

Максимальное значение критерия оптимальности при этом достигается также на границе многогранника условий в n -мерном пространстве и может соответствовать как вершине этого многогранника, так и его граням, образованным различными пересечениями гиперплоскостей, составляющих этот многогранник. В последнем случае имеется бесконечный набор значений независимых переменных, при котором обеспечивается максимальное значение критерия оптимальности (VIII, 1).

Преобразование ограничений

Исключение ограничений типа равенств в исходной постановке задачи линейного программирования. Наличие $m - m_2$ ограничений типа равенств (VIII, 6в) в исходной постановке задачи линейного программирования позволяет исключить из рассмотрения $m - m_2$ независимых переменных x_j , поскольку соотношения (VIII, 6в) дают возможность при некоторых дополнительных условиях [линейная независимость уравнений, включенных в систему (VIII, 6в)] представить $m - m_2$ входящих в них независимых переменных как линейной функции всех остальных.

Предположим, что из системы равенств (VIII, 6в) найдены соотношения

$$x_k = b'_k - \sum_{j=1}^{n'} a'_{kj} x_j \quad k = n' + 1, \dots, n \quad n' = n - m + m_2 \quad (\text{VIII, 19})$$

Тогда, подставляя соотношения (VIII, 19) в выражение (VIII, 1), получим в результате, что критерий оптимальности R является функцией только переменных x_j ($j = 1, \dots, n'$). Вместе с тем, число ограничивающих условий (VIII, 6) по-прежнему, остается равным m , так как вместо ограничений типа равенств (VIII, 6в) теперь появляются условия неотрицательности для исключенных переменных x_j ($j = n' + 1, \dots, n$), которые согласно выражениям (VIII, 19) дают систему соотношений:

$$\sum_{j=1}^{n'} a'_{ij} x_j \leq b'_i \quad i = m_2 + 1, \dots, m \quad (\text{VIII, 20})$$

Следует отметить, что иногда описанный прием исключения части неизвестных дает возможность упростить и решение исходной оптимальной задачи.

Пример VIII-2. Найти максимум линейной формы

$$R = x_1 - 3x_2 + x_3 \quad (\text{VIII, 21})$$

при следующих ограничениях

$$x_1 + x_2 \leq 2 \quad (\text{VIII}, 22a)$$

$$2x_1 + 2x_2 + x_3 = \frac{3}{2} \quad (\text{VIII}, 22b)$$

$$x_1 - x_2 + x_3 = \frac{1}{2} \quad (\text{VIII}, 22b)$$

$$x_1 \geq 0 \quad x_2 \geq 0 \quad x_3 \geq 0 \quad (\text{VIII}, 23)$$

Решение. Наличие двух равенств в системе ограничений (VIII, 22) и (VIII, 23) позволяет исключить из рассмотрения две независимые переменные. Для этого выразим из уравнения (VIII, 22b) переменную x_3 :

$$x_3 = \frac{1}{2} - x_1 + x_2 \quad (\text{VIII}, 24)$$

После подстановки значения x_3 (VIII, 24) в соотношение (VIII, 21) получим новое выражение для критерия оптимальности:

$$R^* = -2x_2 + \frac{1}{2} \quad (\text{VIII}, 25)$$

Нетрудно видеть, что задача максимизации критерия (VIII, 25) эквивалентна задаче с критерием:

$$R = -x_2 \quad (\text{VIII}, 26)$$

Система ограничений (VIII, 22) и (VIII, 23) с использованием выражения (VIII, 24) может быть представлена в виде

$$x_1 + x_2 \leq 2 \quad (\text{VIII}, 27a)$$

$$x_1 + 3x_2 = 1 \quad (\text{VIII}, 27b)$$

$$x_1 - x_2 \leq \frac{1}{2} \quad (\text{VIII}, 27b)$$

$$x_1 \geq 0 \quad x_2 \geq 0 \quad (\text{VIII}, 28)$$

где неравенство (VIII, 27b) непосредственно вытекает из условия неотрицательности значения x_3 .

Из оставшегося равенства (VIII, 27b) можно определить x_2 как функцию переменной x_1 :

$$x_2 = \frac{1}{3} - \frac{1}{3} x_1 \quad (\text{VIII}, 29)$$

Подставляя зависимость (VIII, 29) в соотношение (VIII, 26), получим выражение для критерия оптимальности

$$R^* = -\frac{1}{3} + \frac{1}{3} x_1 \quad (\text{VIII}, 30)$$

максимизация которого эквивалентна максимизации критерия

$$R = x_1 \quad (\text{VIII}, 31)$$

В результате постановки зависимости (VIII, 29) в неравенство (VIII, 27a) последнее преобразуется к виду:

$$x_1 \leq \frac{5}{2} \quad (\text{VIII}, 32a)$$

Из условия неотрицательности значения x_2 с учетом выражения (VIII, 29) можно также найти:

$$x_1 \leq 1 \quad (\text{VIII, 32б})$$

Аналогично из условия (VIII, 27в) согласно выражению (VIII, 29) получим:

$$x_1 \leq \frac{1}{2} \quad (\text{VIII, 32в})$$

Среди трех условий (VIII, 32), ограничивающих значение переменной x_1 , условие (VIII, 32в) является наиболее сильным.

Таким образом исходная задача максимизации критерия (VIII, 21) при наличии ограничений (VIII, 22) и (VIII, 31) с ограничениями:

$$x_1 \leq \frac{1}{2} \quad x_1 \geq 0 \quad (\text{VIII, 33})$$

Для ее решения теперь не требуется никаких дополнительных вычислений. Максимальное значение критерия оптимальности (VIII, 31), очевидно, достигается при наибольшем допустимом значении переменной x_1 , которое с учетом условий (VIII, 33) будет: $x_1 = \frac{1}{2}$.

Значения остальных переменных (x_2 и x_3), фигурирующих в исходной постановке оптимальной задачи, могут быть теперь рассчитаны последовательно с помощью формул (VIII, 29) и (VIII, 24):

$$x_2 = \frac{1}{3} - \frac{1}{3} \cdot \frac{1}{2} = \frac{1}{6}$$

$$x_3 = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} + \frac{1}{6} = \frac{1}{6}$$

после чего можно также вычислить максимальное значение критерия (VIII, 21):

$$R = \frac{1}{2} - 3 \frac{1}{6} + \frac{1}{6} = \frac{1}{6}$$

В рассмотренном примере VIII-2 число ограничений типа равенств было на единицу меньше числа независимых переменных исходной задачи максимизации линейной формы (VIII, 21), что позволило получить в конечном итоге одномерную задачу, решение которой очевидно. Разумеется, что в общем случае исключение части независимых переменных за счет наличия в системе ограничений условий типа равенств может и не привести к существенному упрощению решения задачи. Однако при этом возможно и некоторое уменьшение числа ограничений отбрасыванием более слабых неравенств из общего числа первоначальных и вновь получаемых при исключении ряда переменных.

Общие замечания относительно решения задачи линейного программирования с ограничениями типа неравенств. Как показано выше, задача с ограничениями типа неравенств и равенств может быть сведена к задаче с ограничениями только типа неравенств, т. е. можно считать, что оптимальная задача сформулирована как задача максимизации критерия

$$R = \sum_{j=1}^n c_j x_j \quad (\text{VIII, 34})$$

при ограничениях

$$\sum_{j=1}^n a_{ij}x_j \leq b_i \quad i=1, \dots, m_1 \quad (\text{VIII, 35a})$$

$$\sum_{j=1}^n a_{ij}x_j \geq b_i \quad i=m_1+1, \dots, m \quad (\text{VIII, 35б})$$

$$x_j \geq 0 \quad j=1, \dots, m \quad (\text{VIII, 36})$$

Оптимальное решение задачи, как отмечалось выше (стр. 412), находится на границе области допустимых значений независимых переменных, представляющей собой многогранник, определенный системой неравенств (VIII, 35) и (VIII, 36), и, следовательно, должно удовлетворять некоторым из уравнений системы

$$\sum_{j=1}^n a_{ij}x_j = b_i \quad i=1, \dots, m \quad (\text{VIII, 37a})$$

$$x_j = 0 \quad j=1, \dots, n \quad (\text{VIII, 37б})$$

описывающей границы этого многогранника.

Так, например, в частном случае, когда система неравенств имеет вид

$$\left. \begin{array}{l} x_1 \leq \frac{3}{4} \quad x_2 \leq \frac{3}{4} \\ x_1 + x_2 \leq 1 \quad x_1 \geq 0 \quad x_2 \geq 0 \end{array} \right\} \quad (\text{VIII, 38})$$

границы допустимой области изменения переменных x_1 и x_2 (рис. VIII-5) описываются системой уравнений

$$\left. \begin{array}{l} x_1 = \frac{3}{4} \quad x_2 = \frac{3}{4} \\ x_1 + x_2 = 1 \quad x_1 = 0, \quad x_2 = 0 \end{array} \right\} \quad (\text{VIII, 39})$$

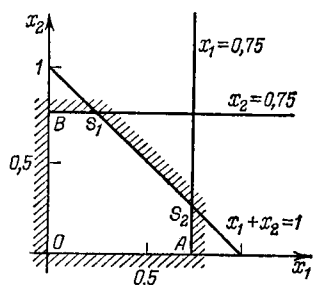


Рис. VIII-5. Область изменения переменных, определяемая условиями (VIII, 38).

Если теперь линейная форма достигает максимального значения в точке S_1 , то получаемое решение удовлетворяет второму и третьему уравнениям системы (VIII, 39). При этом первое уравнение данной системы не выполняется, но выполняется соответствующее ему условие в системе неравенств (VIII, 38).

Следует отметить, что решением оптимальной задачи удовлетворяется лишь часть уравнений системы (VIII, 37). Это представляет известные неудобства при поиске оптимального решения исследованием границ многогранника условий, поскольку заранее неизвестно, какие уравнения системы (VIII, 37) характеризуют оптимальное решение. Так как оно должно определять n значений независимых переменных x_j ($j=1, \dots, n$), для его отыскания прямым методом нужно исследовать все возможные комбинации по n уравнений из общего числа $m+n$ уравнений системы

(VIII, 37). Общее число таких комбинаций, очевидно, равно числу сочетаний из $m + n$ по n :

$$c_{n+m}^n = \frac{(n+m)!}{n!m!} \quad (\text{VIII, 40})$$

Для отыскания оптимального решения прямым методом перебора возможных решений с их проверкой по величине критерия оптимальности и по выполнению условий (VIII, 35) и (VIII, 36) необходимо решить C_{n+m}^n систем n уравнений. При достаточно больших значениях n и m число C_{n+m}^n может быть настолько велико, что поиск решения потребует значительного времени даже при наличии современных вычислительных машин. Поэтому прямые методы поиска оптимального решения практически исчерпываются случаями решения задач линейного программирования, содержащих не более чем 2—3 независимых переменных при сравнительно небольшом числе ограничений.

Из приведенных выше соображений следует, что число возможных наборов значений переменных x_j ($j = 1, \dots, n$), при которых критерий оптимальности R (VIII, 34) может принимать максимальное значение, ограничено и равно C_{n+m}^n . Поэтому, если имеется возможность по известному какому-либо одному решению найти другое решение, при котором значение критерия оптимальности R станет больше, то подобная процедура поиска оптимального решения существенно сократит необходимый объем вычислений, так как при этом для отыскания оптимального решения достаточно рассмотреть лишь часть решений из общего их числа C_{n+m}^n , образующую последовательность, увеличивающую с каждым шагом значение критерия оптимальности. Именно такой процедурой последовательного улучшения решения является в линейном программировании *симплексный метод*, который описан ниже (см. стр. 420).

Сведение задачи с ограничениями типа неравенств к задаче с ограничениями типа равенств. Покажем, что все ограничения типа неравенств (VIII, 35) могут быть представлены в виде равенств введением m новых переменных, называемых дополнительными. Для этого в каждом соотношении (VIII, 35a) прибавим к левой части дополнительную переменную x_{n+i} , которая превращает неравенство в равенство:

$$\sum_{j=1}^n a_{ij}x_j + x_{n+i} = b_i \quad i = 1, \dots, m_1 \quad (\text{VIII, 4ia})$$

Нетрудно видеть, что все дополнительные переменные x_{n+i} ($i = 1, \dots, m_1$), определенные таким образом, неотрицательны.

Аналогично можно поступить также и с неравенствами (VIII, 35б) с той лишь разницей, что дополнительные переменные для соблюдения условий их неотрицательности должны вычитать-

ся из левых частей этих неравенств:

$$\sum_{j=1}^n a_{ij}x_j - x_{n+i} = b_i \quad i = m_1 + 1, \dots, m \quad (\text{VIII, 41б})$$

Тогда система ограничений (VIII, 35а) и (VIII, 35б) может быть записана в единой форме:

$$\sum_{j=1}^{n+m} a_{ij}x_j = b_i \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{VIII, 42})$$

Если в исходной постановке оптимальной задачи линейного программирования имеются ограничения типа равенств (VIII, 6в), то их можно прямо включить в ограничения (VIII, 42). При этом следует только принимать во внимание, что число дополнительных переменных уже не равно числу ограничений m , а определяется числом неравенств m_2 .

Формально в критерий оптимальности исходной задачи могут быть включены также и дополнительные переменные x_{n+i} ($i = 1, \dots, m$)

$$R = \sum_{j=1}^{n+m} c_j x_j \quad (\text{VIII, 43})$$

где все коэффициенты c_j , у которых $j > n$, принимаются равными нулю.

Общие замечания относительно решения задачи линейного программирования с ограничениями типа равенств, полученными введением дополнительных переменных. С учетом ограничений типа уравнений (VIII, 42) уже можно говорить о решении оптимальной задачи как о совокупности неотрицательных значений переменных x_j ($j = 1, \dots, n + m$), удовлетворяющей всем без исключения уравнениям системы (VIII, 42).

Ранее было отмечено (см. стр. 415), что решение исходной оптимальной задачи, представляющей собой набор значений переменных x_j ($j = 1, \dots, n$), удовлетворяет лишь некоторым уравнениям системы (VIII, 37), в то время как для остальных выполняются соответствующие неравенства. Введение дополнительных переменных позволяет считать эти неравенства как равенства, причем получаемое в результате отличное от нуля неотрицательное значение соответствующей дополнительной переменной является мерой удовлетворения этого неравенства.

В дальнейшем предполагается, что рассматриваются такие задачи линейного программирования, для которых оптимальное значение линейной формы (VIII, 34) достигается в одной из вершин многогранника условий описываемого неравенства (VIII, 35) и (VIII, 36).

В n -мерном пространстве, отвечающем основным переменным задачи x_j ($j = 1, \dots, n$), координаты вершины многогранника, как и координаты точки n -мерного пространства, однозначно

определяются заданием n значений переменных x_j ($j = 1, \dots, n$). Соответственно каждая вершина многогранника условий может считаться точкой пересечения n гиперплоскостей, образующих его область, прилегающую к данной вершине. Однако возможны случаи, когда в вершине многогранника условий пересекаются более чем n гиперплоскостей. Примером подобного случая в трехмерном пространстве ($n = 3$) является вершина пирамиды, у которой в основании лежит четырехугольник. При этом в вершине пирамиды пересекаются четыре плоскости, служащие ее боковыми гранями. Если в основании пирамиды лежит многоугольник с еще большим числом сторон, то в ее вершине пересекается соответственно большее число плоскостей-граней.

Задачи линейного программирования с условиями, образующими многогранники в n -мерном пространстве, у которых в ряде вершин пересекаются более чем n гиперплоскостей, отвечающих ограничивающим неравенствам, называются вырожденными задачами.

На практике случаи вырождения, о которых несколько подробнее идет речь (см. стр. 454), встречаются весьма редко. Поэтому далее рассматриваются только невырожденные задачи линейного программирования, для которых оптимальное значение линейной формы достигается в одной из вершин многогранника условий, определяемой пересечением ровно n гиперплоскостей, соответствующих ограничениям (VIII, 35) и (VIII, 36).

Поскольку, согласно сделанному выше предположению, координаты каждой вершины многогранника определяются как точки пересечения n гиперплоскостей в n -мерном пространстве, уравнения которых представляют собой группу из m уравнений системы (VIII, 37), включающей всего $n + m$ уравнений, координаты вершины могут содержать не более чем m значений, отличных от нуля. При этом, если $m < n$, отличными от нуля могут быть не более m координат вершины.

На рис. VIII-6 показан такой случай для $n = 2$ и $m = 1$, причем единственное ограничение задано в виде: $x_1 + x_2 \leq 1$. Вершинами многогранника условий в данном случае являются точки $O(0, 0)$, $A(1, 0)$ и $B(0, 1)$, у которых не более одной координаты отлично от нуля.

Можно также привести пример для случая $n = 3$ и $m = 1$ (рис. VIII-7), когда ограничение задано в форме $x_1 + x_2 + x_3 \leq 1$. Вершинами многогранника условий служат точки $O(0, 0, 0)$, $A(1, 0, 0)$, $B(0, 1, 0)$ и $C(0, 0, 1)$, причем их координаты содержат только одну составляющую, не равную нулю.

Если $m \geq n$, число отличных от нуля координат вершин многогранника условий, естественно, не может превышать числа n , что не противоречит требованию, чтобы число отличных от нуля координат не превышало m . Случай $m > n$ показан, например, на рис. VIII-5, где точки S_1 и S_2 имеют обе координаты, не равные нулю.

Сказанное выше означает, что и решение системы уравнений (VIII, 42), оптимизирующее значение линейной формы (VIII, 43), может содержать не более чем m значений величин x_j ($j = 1, \dots, n + m$), которые могут быть отличны от нуля. Это следует из того, что если, например, в вершине многогранника условий удовлетворены все уравнения системы (VIII, 37а), то дополнительные переменные все тождественно равны нулю и, следовательно, число отличных от нуля составляющих оптимального решения системы (VIII, 42) не превышает m . Более того, поскольку разбираются только невырожденные задачи, отличны от нуля в оптимальном

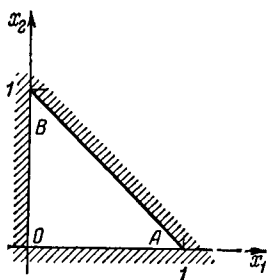


Рис. VIII-6. Случай для $n = 2$ и $m = 1$.

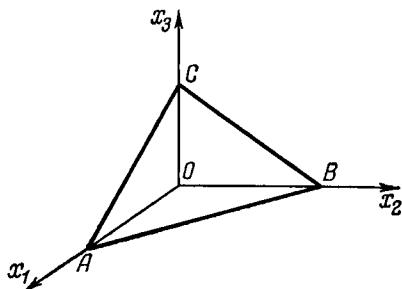


Рис. VIII-7. Случай для $n = 3$ и $m = 1$.

решении в точности m значений величин x_j . Остальные n тождественно равны нулю. Последнее можно пояснить следующим рассуждением.

Пусть вершина многогранника условий определяется пересечением n гиперплоскостей, p из которых ($p \leq m$) отвечают уравнениям системы (VIII, 37а), а остальные $n - p$ — уравнениям системы (VIII, 37б). Таким образом уравнения системы (VIII, 37б) задают $n - p$ нулевых значений координат x_j ($j = p + 1, \dots, n$) указанной вершины. Координаты x_j ($j = 1, \dots, p$) при этом должны быть отличны от нуля. Если какая-нибудь из них была равна нулю ($x_k = 0, 1 \leq k \leq p$), то это соответствовало бы тому, что еще одна гиперплоскость $x_k = 0$, описываемая системой (VIII, 37б), проходила через данную вершину, т. е. число гиперплоскостей, пересекающихся в этой вершине, составляло бы $n + 1$, что противоречит условию невырожденности.

В рассматриваемой вершине p неравенств (VIII, 35) обращаются в равенство. Значит, дополнительные переменные для этих неравенств в системе уравнений (VIII, 42) оказываются равными нулю. Остальные $m - p$ неравенства в этой вершине не обращаются в равенства, и, следовательно, соответствующие им значения дополнительных переменных также не равны нулю. Таким образом, общее число не равных нулю значений переменных x_j ($j = 1, \dots, n + m$), удовлетворяющих системе уравнений (VIII, 42), составит $p + (m - p) = m$.

Другими словами, имеется только m отличных от нуля значений переменных среди общего числа $n + m$ переменных, для которых задача линейного программирования сформулирована как задача оптимизации критерия (VIII, 43) с учетом ограничений (VIII, 42).

Задача оптимизации критерия (VIII, 43) тем самым сводится к выбору только неотрицательного решения системы уравнений (VIII, 42), максимизирующего R и содержащего ровно m отличных от нуля составляющих.

Так как число уравнений m в системе (VIII, 42) всегда меньше числа переменных $n + m$, эта система имеет, вообще говоря, бесчисленное множество решений. Однако среди этих решений представляют интерес только неотрицательные и притом такие, в которых лишь m значений переменных отличны от нуля.

Любое решение системы уравнений (VIII, 42), состоящее из набора $n + m$ неотрицательных значений переменных x_j ($j = 1, \dots, n + m$), называется *допустимым решением*.

Допустимое решение, в котором ровно m составляющих отличны от нуля, называется *допустимым базисным решением*, или просто *базисным решением*. Иногда базисное решение называют также *планом*.

Базисное решение определяет координаты вершины многогранника условий рассматриваемой оптимальной задачи, тогда как допустимое решение может определять координаты любой другой точки этого многогранника, включая и его внутренние точки.

Очевидно, что не всякое базисное решение является оптимальным решением задачи линейного программирования. Однако оптимальное решение невырожденной задачи всегда должно быть базисным для системы уравнений (VIII, 42), и, таким образом, задача отыскания оптимального решения заключается в переборе только базисных решений системы уравнений (VIII, 42), среди которых отыскивается оптимальное.

Симплексный метод решения задач линейного программирования

Вывод основных соотношений. Симплексный метод или, как его еще иногда называют, *метод последовательного улучшения плана* позволяет по известному базисному решению построить другое базисное решение, для которого значение линейной формы (VIII, 43) больше, чем для исходного. Свое название этот метод получил от ограничения, входившего в одну из первых задач, решенных указанным методом. Данное ограничение имеет вид

$$\sum_{j=1}^n x_j \leq 1$$

и представляет собой выпуклый многогранник в n -мерном пространстве с вершинами на осях координат в точках $x_j = 1$ ($j = 1, \dots, n$), называемый обычно *симплексом*.

Для вывода основных соотношений симплексного метода запишем систему уравнений (VIII, 42) в векторной форме

$$\sum_{j=1}^{n+m} A_j x_j = B \quad (\text{VIII}, 44)$$

где $\mathbf{A}_j$ и $\mathbf{B}$ обозначены векторы:

$$A_j = \begin{bmatrix} a_{1j} \\ a_{2j} \\ \vdots \\ a_{mj} \end{bmatrix} \quad j = 1, \dots, n+m \quad B = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{bmatrix} \quad (\text{VIII}, 45)$$

Допустим, что любые m векторов из общего числа $n + m + 1$ векторов $\mathbf{A}_j$ и $\mathbf{B}$ линейно независимы, т. е. соотношение:

$$\sum_{i=1}^m \alpha_i \mathbf{A}_{(i)} = 0 \quad (\text{VIII}, 46)$$

где через $A_{(i)}$ ($i = 1, \dots, m$) обозначена совокупность любых векторов (VIII, 45), выполняется лишь в том случае, если все α_i ($i = 1, \dots, m$) равны нулю.

Любые t векторов, для которых условие (VIII, 46) может быть выполнено только при нулевых значениях α_i , можно принять в качестве базисных векторов или базиса n -мерного пространства.

В этом пространстве любой другой вектор $\mathbf{A}_k$ можно представить в виде разложения по векторам базиса:

$$A_k = \sum_{i=1}^m A_{(i)} x_{(i), k} \quad (\text{VIII}, 47)$$

причем $x_{(i), k}$ — коэффициент при базисном векторе $A_{(i)}$ в разложении вектора A_k по векторам базиса.

Коэффициенты $x_{(i), k}$ разложения (VIII, 47) могут быть найдены решением системы уравнений

$$\left. \begin{aligned} &a_{1,(1)}x_{(1),k} + a_{1,(2)}x_{(2),k} + \dots + a_{1,(m)}x_{(m),k} = a_{1k} \\ &a_{2,(1)}x_{(1),k} + a_{2,(2)}x_{(2),k} + \dots + a_{2,(m)}x_{(m),k} = a_{2k} \\ &\dots\dots\dots \\ &a_{m,(1)}x_{(1),k} + a_{m,(2)}x_{(2),k} + \dots + a_{m,(m)}x_{(m),k} = a_{mk} \end{aligned} \right\} \quad (\text{VIII}, 47a)$$

коэффициентами которой являются компоненты базисных векторов, а правые части уравнений представляют собой компоненты небазисного вектора, для которого определяется разложение (VIII, 47).

В приведенных соотношениях индекс базисных векторов заключен в скобки для того, чтобы показать, что фактическая нумерация базисных векторов может отличаться от использованной в соотношении (VIII, 47).

Для векторов A_j ($j = 1, \dots, m+n$), любые m которых линейно независимы и, следовательно, могут быть приняты в качестве базиса, среди коэффициентов разложение $x_{(i),k}$ ($i = 1, \dots, m$) небазисного вектора A_k нет ни одного, равного нулю. Это следует из того, что если, например, хотя бы один из указанных коэффициентов равен нулю, а остальные отличны от нуля, то соотношение (VIII, 47) определяет взаимосвязь m векторов и его можно записать в форме (VIII, 46), причем не все α_i будут равны нулю. Однако сказанное противоречит предположению о линейной независимости любых m векторов (VIII, 45), поэтому ни один из коэффициентов $x_{(i),k}$ не может быть равен нулю.

Предположим, что известно какое-нибудь базисное решение $\lambda^{(0)}$ системы (VIII, 44), в котором m значений переменных x_j отличны от нуля, например:

$$\left. \begin{aligned} x_j &= 0 & j &= 1, \dots, n \\ x_j &= \lambda_j^{(0)} \neq 0 & j &= n+1, \dots, n+m \end{aligned} \right\} \quad (\text{VIII, 48})$$

Таким образом, ненулевые значения переменных x_j удовлетворяют векторному уравнению:

$$\sum_{j=n+1}^{n+m} A_j \lambda_j^{(0)} = B \quad (\text{VIII, 49})$$

Векторы A_j ($j = n+1, \dots, n+m$) могут быть приняты в качестве базиса m -мерного пространства, поэтому любой небазисный вектор A_k ($k = 1, \dots, n$) можно представить в виде разложения по векторам этого базиса:

$$\sum_{j=n+1}^{n+m} A_j x_{jk} = A_k \quad (\text{VIII, 50})$$

Умножим соотношение (VIII, 50) на произвольную положительную константу θ и вычтем полученное выражение из уравнения (VIII, 49). В результате найдем:

$$\sum_{j=n+1}^{n+m} A_j \lambda_j^{(0)} - \theta \sum_{j=n+1}^{n+m} A_j x_{jk} = B - \theta A_k \quad (\text{VIII, 51})$$

Объединяя слагаемые левой части соотношения (VIII, 51) под знаком одной суммы, перепишем его в виде:

$$A_k \theta + \sum_{j=n+1}^{n+m} A_j (\lambda_j^{(0)} - \theta x_{jk}) = B \quad (\text{VIII, 52})$$

Поскольку величина θ выбрана произвольно, она может быть взята настолько малой, что независимо от знаков коэффициентов $x_{j,k}$ в соотношении (VIII, 52) выражения

$$y_j = \lambda_j^{(0)} - \theta x_{j,k} \quad j = n+1, \dots, n+m \quad (\text{VIII, 53a})$$

будут положительными, так как значения $\lambda_j^{(0)}$ ($j = n + 1, \dots, n + m$), положительны по определению исходного базисного решения (VIII, 48).

Выводя также обозначение

$$y_k = \theta \quad (\text{VIII, 53б})$$

получим, что значения переменных y_j ($j = k, n + 1, \dots, n + m$) определяемые выражениями (VIII, 53), при достаточно малой величине θ составляют допустимое решение системы уравнений (VIII, 44), так как все $m + 1$ его ненулевых составляющих положительны. Для того чтобы указанное решение стало базисным, необходимо одну из его составляющих сделать равной нулю. В данном случае это можно выполнить соответствующим выбором значения величины θ .

Очевидно, что при $\theta = 0$ имеем исходное базисное решение (VIII, 48). Поэтому для получения другого базисного решения, отличного от существующего, необходимо взять $\theta > 0$. Возможность нахождения нового решения целиком зависит от того, имеется ли среди коэффициентов разложения x_{jk} ($j = n + 1, \dots, n + m$) вектора A_k по векторам исходного базиса (VIII, 50) хотя бы один положительный. Если все x_{jk} отрицательны, то ни одна из величин y_j , определяемых выражениями (VIII, 53а), не может быть сделана равной нулю при любом значении θ . Последнее указывает на невозможность получения нового базисного решения при введении вектора A_k в исходный базис вместо одного из его векторов. В этом случае вместо вектора A_k следует взять любой другой небазисный вектор и найти его разложение. Если и его коэффициенты разложения все отрицательны, то нужно взять следующий и т. д., пока не будут опробованы все небазисные векторы или не будет найдено разложение какого-либо вектора, содержащее хотя бы один положительный коэффициент.

Пусть не все x_{jk} ($j = n + 1, \dots, n + m$) в разложении вектора (VIII, 50) отрицательны. Тогда при непрерывном возрастании величины θ от значения $\theta = 0$ первой обратится в нуль та переменная y_{n+l} ($1 \leq l \leq m$) в выражениях (VIII, 53а), для которой отношение $\lambda_{n+l}^{(0)} / x_{n+l, k}$ будет минимальным среди всех отношений $\lambda_l^{(0)} / x_{jk}$ ($j = n + 1, \dots, n + m$), определенных только для положительных значений величин x_{jk} .

Положим

$$\theta = \theta_{n+l, k} = \min_{n+1 \leq l \leq n+m} \frac{\lambda_l^{(0)}}{x_{jk}} > 0 \quad (\text{VIII, 54})$$

где знак минимизации означает, что ищется минимальное среди всех положительных отношений:

$$\frac{\lambda_l^{(0)}}{x_{jk}} \quad (\text{VIII, 55})$$

Допустим, что минимальное значение положительных отношений (VIII, 55) получается для $l = 1$, т. е. с учетом соотношения (VIII, 54) находим:

$$\theta = \theta_{n+1, k} = \frac{\lambda_{n+1}^{(0)}}{x_{n+1, k}} \quad (\text{VIII, 56})$$

При таком выборе величины θ значение переменной y_{n+1} равно нулю, тогда как остальные m значений переменных y_j ($j = k, n+2, \dots, n+m$) отличны от нуля и положительны. Таким образом, вместо исходного базисного решения (VIII, 48) получаем новое базисное решение, компоненты которого определяются выражениями:

$$\left. \begin{aligned} \lambda_j^{(1)} &= 0 & j &= 1, \dots, n \ (j \neq k) \\ \lambda_k^{(1)} &= \theta & 1 &\leq k \leq n \\ \lambda_{n+1}^{(1)} &= \lambda_{n+1}^{(0)} - \theta x_{n+1, k} = 0 \\ \lambda_j^{(1)} &= \lambda_j^{(0)} - \theta x_{jk} > 0 & j &= n+2, \dots, n+m \end{aligned} \right\} \quad (\text{VIII, 57})$$

Согласно выражениям (VIII, 57), соотношение (VIII, 52) может быть теперь записано в виде:

$$A_k \lambda_k^{(1)} + \sum_{j=n+2}^{n+m} A_j \lambda_j^{(1)} = B \quad (\text{VIII, 58})$$

Сравнение выражений (VIII, 49) и (VIII, 58) показывает, что в данном случае в исходном базисе векторов A_j ($j = n+1, \dots, n+m$) один из них при сделанных предположениях вектор A_{n+1} заменен на вектор A_k , и новое базисное решение (VIII, 57) теперь удовлетворяет системе уравнений (VIII, 58).

Пример VIII-3. Для системы уравнений

$$\left. \begin{aligned} 2x_1 + x_2 + x_3 + x_4 &= 3 \\ 3x_1 - x_2 + x_3 + x_5 &= 4 \\ 2x_1 - 2x_2 - x_3 + x_6 &= 2 \end{aligned} \right\} \quad (\text{VIII, 59})$$

у которой в качестве исходного базисного решения $\lambda^{(0)}$ используется очевидное допустимое решение, получаемое приравняванием нулю значений неизвестных x_1, x_2 и x_3 , т. е.

$$\lambda^{(0)} = (0, 0, 0, 3, 4, 2) \quad (\text{VIII, 60})$$

найти другие базисные решения.

Решение. Соответствующий решению (VIII, 60) исходный базис образован векторами:

$$A_4 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad A_5 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad A_6 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (\text{VIII, 61})$$

Небазисные векторы:

$$A_1 = \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \\ 2 \end{pmatrix} \quad A_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 2 \end{pmatrix} \quad A_3 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (\text{VIII, 62})$$

Рассмотрим разложение небазисного вектора A_1 по векторам базиса, которое, как нетрудно видеть, записывается в форме:

$$A_1 = 2A_4 + 3A_5 + 2A_6 \quad (\text{VIII, 63})$$

Коэффициенты разложения x_{jk} при этом равны

$$x_{41} = 2 \quad x_{51} = 3 \quad x_{61} = 2 \quad (\text{VIII, 64})$$

и все положительны.

Найдем величины θ_{jk} :

$$\begin{aligned} \theta_{41} &= \frac{\lambda_4^{(0)}}{x_{41}} = \frac{3}{2}, & \theta_{51} &= \frac{\lambda_5^{(0)}}{x_{51}} = \frac{4}{3}, \\ \theta_{61} &= \frac{\lambda_6^{(0)}}{x_{61}} = \frac{2}{2} = 1 \end{aligned} \quad (\text{VIII, 65})$$

Минимальное значение имеет величина θ_{61} , поэтому положим:

$$\theta^{(1)} = \theta_{61} = 1 \quad (\text{VIII, 66})$$

Таким образом, найдено, что в исходном базисе (VIII, 61) можно заменить вектор A_6 на вектор A_1 , в результате чего может быть получено новое базисное решение $\lambda^{(1)}$, определяемое формулами (VIII, 57):

$$\left. \begin{aligned} \lambda_1^{(1)} &= \theta^{(1)} = 1 & \lambda_2^{(1)} &= 0 & \lambda_3^{(1)} &= 0 \\ \lambda_4^{(1)} &= \lambda_4^{(0)} - \theta^{(1)}x_{41} = 3 - 1 \cdot 2 = 1 \\ \lambda_5^{(1)} &= \lambda_5^{(0)} - \theta^{(1)}x_{51} = 4 - 1 \cdot 3 = 1 \\ \lambda_6^{(1)} &= \lambda_6^{(0)} - \theta^{(1)}x_{61} = 2 - 1 \cdot 2 = 0 \end{aligned} \right\} \quad (\text{VIII, 67})$$

Итак, новое базисное решение имеет вид

$$\lambda^{(1)} = (1, 0, 0, 1, 1, 0) \quad (\text{VIII, 68})$$

и этому решению соответствуют базисные векторы

$$A_1 = \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \\ 2 \end{pmatrix} \quad A_4 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad A_5 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{VIII, 69})$$

Для отыскания другого базисного решения можно разложить, например, вектор A_2 по базису (VIII, 69). Легко проверить, что разложение будет

$$A_2 = -1 \cdot A_1 + 3A_4 + 2A_5 \quad (\text{VIII, 70})$$

откуда

$$x_{12} = -1 \quad x_{42} = 3 \quad x_{52} = 2 \quad (\text{VIII, 71})$$

Величина $\theta^{(2)}$, определяемая как наименьшее положительное отношение $\lambda_j^{(1)} / x_{jk}$, в данном случае равна:

$$\theta^{(2)} = \min_{j=4, 5} \frac{\lambda_j^{(1)}}{x_{j2}} = \frac{\lambda_4^{(1)}}{x_{4, 2}} = \theta_{42} = \frac{1}{3} \quad (\text{VIII, 72})$$

Таким образом, в базисе (VIII, 69) исключается вектор A_4 и вместо него вводится вектор A_2 . Новый базис теперь имеет вид

$$A_1 = \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \\ 2 \end{pmatrix} \quad A_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ -2 \end{pmatrix} \quad A_5 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{VIII, 73})$$

и соответствующее ему базисное решение $\lambda^{(2)}$ определяется как

$$\left. \begin{aligned} \lambda_1^{(2)} &= \lambda_1^{(1)} - \theta^{(2)} x_{12} = \frac{4}{3} \\ \lambda_2^{(2)} &= \theta^{(2)} = \frac{1}{3} & \lambda_3^{(2)} &= 0 & \lambda_4^{(2)} &= 0 \\ \lambda_5^{(2)} &= \lambda_5^{(1)} - \theta^{(2)} x_{52} = \frac{1}{3} & \lambda_6^{(2)} &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (\text{VIII, 74})$$

или

$$\lambda^{(2)} = \left(\frac{4}{3}, \frac{1}{3}, 0, 0, \frac{1}{3}, 0 \right) \quad (\text{VIII, 75})$$

Изложенная процедура позволяет находить при известном каком-нибудь базисном решении другое базисное решение, отличающееся от первоначального одним базисным вектором. Однако при этом еще неясно, как изменяется значение линейной формы (VIII, 43) и имеет ли смысл переход к новому базисному решению. Естественно, что этот переход следует осуществить лишь тогда, когда новое значение линейной формы будет больше прежнего при условии, что оптимум соответствует ее максимуму.

Для выяснения целесообразности перехода к новому базисному решению вычислим значение линейной формы в обоих случаях.

Подставляя первоначальное базисное решение (VIII, 48) в выражение (VIII, 43), получим:

$$R^{(0)} = \sum_{j=n+1}^{n+m} c_j \lambda_j^{(0)} \quad (\text{VIII, 76})$$

Число членов под знаком суммирования (VIII, 43) сократилось за счет того, что только последние m значений переменных x_j отличны от нуля в исходном базисном решении (VIII, 48).

Для нового базисного решения с учетом значений его ненулевых компонентов (VIII, 57) можно также вычислить значение линейной формы (VIII, 43), которое определяется формулой:

$$R_1^{(1)} = c_k \theta + \sum_{j=n+1}^{n+m} c_j (\lambda_j^{(0)} - \theta x_{jk}) \quad (\text{VIII, 77})$$

Вычитая из выражения (VIII, 77) выражение (VIII, 76), получим:

$$\Delta R = R^{(1)} - R^{(0)} = \theta \left(c_k - \sum_{j=n+1}^{n+m} c_j x_{jk} \right) \quad (\text{VIII, 78})$$

Нетрудно увидеть, что если величина

$$z_k = \sum_{j=n+1}^{n+m} c_j x_{jk} \quad (\text{VIII, 79})$$

удовлетворяет соотношению

$$c_k > z_k \quad (\text{VIII, 80})$$

то значение ΔR , характеризуемое выражением (VIII, 78), будет положительным и, следовательно, величина критерия оптимальности R при переходе к новому базисному решению возрастает.

Если же

$$c_k < z_k \quad (\text{VIII, 81})$$

то $\Delta R < 0$ и переход к новому базисному решению приводит к уменьшению критерия оптимальности.

Разности

$$v_k = z_k - c_k \quad (\text{VIII, 82})$$

в задачах линейного программирования иногда называют *маргинальными значениями*. Величины v_k имеют определенный смысл в так называемых двойственных задачах (см. стр. 455). Условие (VIII, 80) означает, что если маргинальное значение v_k отрицательно, т. е.

$$v_k < 0 \quad (\text{VIII, 83})$$

то переход к новому базисному решению вызывает увеличение критерия оптимальности (VIII, 43). Наоборот, если

$$v_k > 0 \quad (\text{VIII, 84})$$

то переход к новому базисному решению сопровождается уменьшением критерия оптимальности (VIII, 43).

Таким образом, вопрос о целесообразности перехода к новому базисному решению может решаться проверкой условия (VIII, 80) или (VIII, 83) еще до выбора значения θ , для чего необходимо знать лишь коэффициенты x_{jk} в разложении (VIII, 50) вектора A_k ($1 \leq k \leq n$) по векторам исходного базиса A_j ($j = n+1, \dots, n+m$).

Следует заметить, что если при выполнении условия (VIII, 80) все коэффициенты x_{jk} отрицательны, то приращение ΔR (VIII, 78) может быть сделано сколь угодно большим за счет выбора достаточно большого положительного значения θ . Другими словами, если обнаружено, что все коэффициенты разложения (VIII, 50)

какого-либо небазисного вектора A_k отрицательны и, вместе с тем, выполнено условие (VIII, 80), то максимальное значение критерия оптимальности не ограничено.

Пример VIII-4. Найти максимальное значение критерия оптимальности, заданного в виде линейной формы

$$R = x_1 + 0,5x_2 + x_3 \quad (\text{VIII, 85})$$

при следующих ограничениях

$$\left. \begin{aligned} 2x_1 + x_2 + x_3 &\leq 3 \\ 3x_1 - x_2 + x_3 &\leq 4 \\ 2x_1 - 2x_2 - x_3 &\leq 2 \end{aligned} \right\} \quad (\text{VIII, 86})$$

Решение. Введем дополнительные переменные x_4 , x_5 и x_6 , с помощью которых неравенства (VIII, 86) можно представить в виде равенств:

$$\left. \begin{aligned} 2x_1 + x_2 + x_3 + x_4 &= 3 \\ 3x_1 - x_2 + x_3 + x_5 &= 4 \\ 2x_1 - 2x_2 - x_3 + x_6 &= 2 \end{aligned} \right\} \quad (\text{VIII, 87})$$

Система уравнений (VIII, 87) в точности совпадает с рассмотренной в примере VIII-3 системой (VIII, 59), поэтому воспользуемся результатами, полученными в этом примере.

С учетом дополнительных переменных коэффициенты c_j в выражении критерия оптимальности (VIII, 85) составляют:

$$c_1 = 1 \quad c_2 = 0,5 \quad c_3 = 1 \quad c_4 = c_5 = c_6 = 0 \quad (\text{VIII, 88})$$

В качестве исходного базисного решения примем, как и в примере VIII-3, решение (VIII, 60), соответствующее базису дополнительных переменных, при котором значение критерия оптимальности (VIII, 85), очевидно, равно нулю.

Вычислим величину z_1 , определяемую разложением вектора A_1 по векторам исходного базиса (VIII, 61):

$$z_1 = c_4x_{41} + c_5x_{51} + c_6x_{61} = 0 \quad (\text{VIII, 89})$$

Следовательно

$$c_1 > z_1 \quad (\text{VIII, 90})$$

т. е. переход к базисному решению (VIII, 68) приводит к увеличению критерия оптимальности (VIII, 85), который при этом возрастает на величину

$$\Delta R^{(1)} = \theta^{(1)}(c_1 - z_1) = 1(1 - 0) = 1 \quad (\text{VIII, 91})$$

в чем можно непосредственно убедиться, подставляя базисное решение (VIII, 68) в выражение (VIII, 85):

$$R^{(1)} = 1 \cdot 1 + 0 \cdot 0 + 0 \cdot 0 = 1 \quad (\text{VIII, 92})$$

Для другого базисного решения (VIII, 75), характеризуемого разложением вектора A_2 по векторам базиса (VIII, 69), имеем:

$$z_2 = c_1x_{12} + c_4x_{42} + c_5x_{52} = 1(-1) + 0 \cdot 3 + 0 \cdot 2 = -1 \quad (\text{VIII, 93})$$

и условие

$$c_2 > z_2 \quad (\text{VIII, 94})$$

также оказывается выполненным. Другими словами, базисное решение (VIII, 75) вызывает увеличение критерия оптимальности (VIII, 85) по сравнению с получен-

ным значением (VIII, 92). Прирост критерия оптимальности при переходе от базисного решения $\lambda^{(1)}$ (VIII, 68) к решению $\lambda^{(2)}$ (VIII, 75) составляет:

$$\Delta R^{(2)} = \theta^{(2)}(c_2 - z_1) = \frac{1}{3}(0,5 + 1) = \frac{1}{2} \quad (\text{VIII, 95})$$

и новое значение критерия оптимальности, с одной стороны, может быть определено как

$$R^{(2)} = R_1 + \Delta R^{(2)} = 1 + \frac{1}{2} = \frac{3}{2} \quad (\text{VIII, 96a})$$

а с другой стороны, его можно вычислить (для контроля вычислений) прямой постановкой решения $\lambda^{(2)}$ (VIII, 75) в выражение (VIII, 85):

$$R^{(2)} = 1 \cdot \frac{4}{3} + \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{3} = \frac{3}{2} \quad (\text{VIII, 96b})$$

Для отыскания еще одного базисного решения найдем разложение вектора A_3 по векторам базиса (VIII, 73), соответствующего базисному решению $\lambda^{(2)}$ (VIII, 75):

$$A_3 = A_1 x_{13} + A_2 x_{23} + A_5 x_{53} \quad (\text{VIII, 97})$$

Коэффициенты x_{jk} в разложении (VIII, 97) получим из системы уравнений (VIII, 47a), имеющей в данном случае вид

$$\left. \begin{aligned} 1 &= 2x_{13} + 1 \cdot x_{23} + 0 \cdot x_{53} \\ 1 &= 3x_{13} - 1 \cdot x_{23} + 1 \cdot x_{53} \\ -1 &= 2x_{13} - 2 \cdot x_{23} + 0 \cdot x_{53} \end{aligned} \right\} \quad (\text{VIII, 97a})$$

решением которой будет:

$$x_{13} = \frac{1}{6} \quad x_{23} = \frac{2}{3} \quad x_{53} = \frac{7}{6} \quad (\text{VIII, 98})$$

Вычисляя значение z_3 , находим:

$$z_3 = c_1 x_{13} + c_2 x_{23} + c_3 x_{53} = 1 \cdot \frac{1}{6} + \frac{1}{2} \cdot \frac{2}{3} + 0 \cdot \frac{7}{6} = \frac{1}{2} \quad (\text{VIII, 99})$$

Следовательно

$$c_3 > z_3 \quad (\text{VIII, 100})$$

откуда вытекает, что новое базисное решение дает большее значение критерия оптимальности (VIII, 85).

При этом значение $\theta^{(3)}$ с учетом базисного решения $\lambda^{(2)}$ (VIII, 75) и коэффициентов x_{jk} (VIII, 98) оказывается равным:

$$\theta^{(3)} = \min_{j=1, 2, 5} \frac{\lambda_j^{(2)}}{x_{j3}} = \frac{\lambda_5^{(2)}}{x_{53}} = \theta_{53} = \frac{2}{7} \quad (\text{VIII, 101})$$

Таким образом, для получения нового базисного решения $\lambda^{(3)}$ в базисе (VIII, 73) вектор A_5 следует заменить на вектор A_3 , в результате чего новый базис принимает вид:

$$A_1 = \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \\ 2 \end{pmatrix} \quad A_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ -2 \end{pmatrix} \quad A_3 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (\text{VIII, 102})$$

Соответствующее ему базисное решение $\lambda_j^{(3)}$ с учетом значений $\lambda_j^{(2)}$ (VIII, 75) определяется по формулам (VIII, 57):

$$\left. \begin{aligned} \lambda_1^{(3)} &= \lambda_1^{(2)} - \theta^{(3)} x_{13} = \frac{4}{3} - \frac{2}{7} \cdot \frac{1}{6} = \frac{9}{7} \\ \lambda_2^{(3)} &= \lambda_2^{(2)} - \theta^{(3)} x_{23} = \frac{1}{3} + \frac{2}{7} \cdot \frac{2}{3} = \frac{1}{7} \\ \lambda_3^{(3)} &= \theta^{(3)} = \frac{2}{7} \quad \lambda_4^{(3)} = 0 \\ \lambda_5^{(3)} &= \lambda_5^{(2)} - \theta^{(3)} x_{53} = \frac{1}{3} - \frac{2}{7} \cdot \frac{7}{6} = 0 \quad \lambda_6^{(3)} = 0 \end{aligned} \right\} \quad (\text{VIII, 103})$$

$$\lambda^{(3)} = \left(\frac{9}{7}, \frac{1}{7}, \frac{2}{7}, 0, 0, 0 \right) \quad (\text{VIII, 104})$$

Прирост критерия оптимальности при переходе к базисному решению $\lambda^{(3)}$ составляет

$$\Delta R^{(3)} = \theta^{(3)} (c_3 - z_3) = \frac{2}{7} \left(1 - \frac{1}{2} \right) = \frac{1}{7} \quad (\text{VIII, 105})$$

а новое значение критерия будет:

$$R^{(3)} = R^{(2)} + \Delta R^{(3)} = \frac{3}{2} + \frac{1}{7} = \frac{23}{14} \quad (\text{VIII, 106a})$$

или

$$R^{(3)} = 1 \cdot \frac{9}{7} + \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{7} + 1 \cdot \frac{2}{7} = \frac{23}{14} \quad (\text{VIII, 106b})$$

Итак, в результате первых трех шагов все векторы первоначального базиса (VIII, 61) выведены из базиса (VIII, 102), определяющего решение $\lambda^{(3)}$ (VIII, 104). Однако это еще не означает, что уже достигнуто максимальное значение критерия оптимальности (VIII, 85) и процесс поиска новых базисных решений, увеличивающих значение R , следует прекратить. Поэтому попытаемся снова вводить векторы A_1 , A_2 , и A_3 в базис (VIII, 102), чтобы найти лучшее базисное решение.

Рассчитаем значения коэффициентов x_{jA} в разложении вектора

$$A_4 = A_1 x_{14} + A_2 x_{24} + A_3 x_{34} \quad (\text{VIII, 107})$$

решением соответствующей системы уравнений, в результате чего получим:

$$x_{14} = \frac{3}{7} \quad x_{24} = \frac{5}{7} \quad x_{34} = -\frac{4}{7} \quad (\text{VIII, 108})$$

Вычислим значение z_4 :

$$z_4 = c_1 x_{14} + c_2 x_{24} + c_3 x_{34} = 1 \cdot \frac{3}{7} + \frac{1}{2} \cdot \frac{5}{7} + 1 \cdot \left(-\frac{4}{7} \right) = \frac{3}{14} \quad (\text{VIII, 109})$$

Поскольку $c_4 = 0$, а $z_4 > 0$, условие (VIII, 80) не выполняется, и, следовательно, включение вектора A_4 в базис (VIII, 102) не приводит к возрастанию достигнутого значения критерия оптимальности (VIII, 106).

Аналогично для разложения вектора A_5 по векторам базиса (VIII, 102)

$$A_5 = A_1 x_{15} + A_2 x_{25} + A_3 x_{35} \quad (\text{VIII, 110})$$

можно найти

$$x_{15} = -\frac{1}{7} \quad x_{25} = -\frac{4}{7} \quad x_{35} = \frac{6}{7} \quad (\text{VIII, 111})$$

и величина

$$z_6 = c_1 x_{16} + c_2 x_{26} + c_3 x_{36} = 1 \cdot \left(-\frac{1}{7}\right) + \frac{1}{2} \cdot \left(-\frac{4}{7}\right) + 1 \cdot \frac{6}{7} = \frac{3}{7} \quad (\text{VIII, 112})$$

снова оказывается положительной. Кроме того, так как $c_5 = 0$, то и вектор A_5 при включении в базис (VIII, 102) не дает увеличения критерия (VIII, 85).

Наконец, для разложения вектора A_6

$$A_6 = A_1 x_{16} + A_2 x_{26} + A_3 x_{36} \quad (\text{VIII, 113})$$

получим:

$$x_{16} = \frac{2}{7} \quad x_{26} = \frac{1}{7} \quad x_{36} = -\frac{5}{7} \quad (\text{VIII, 114})$$

$$z_6 = c_1 x_{16} + c_2 x_{26} + c_3 x_{36} = 1 \cdot \frac{2}{7} + \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{7} + 1 \cdot \left(-\frac{5}{7}\right) = -\frac{5}{14} \quad (\text{VIII, 115})$$

Поскольку $z_6 < 0$, а $c_6 = 0$, условие (VIII, 80)

$$c_6 > z_6 \quad (\text{VIII, 116})$$

выполняется, и следовательно, новое базисное решение вызовет возрастание критерия оптимальности (VIII, 85).

Значение $\theta^{(4)}$ при этом будет:

$$\theta^{(4)} = \min_{j=1,2} \frac{\lambda_j^{(3)}}{x_{j6}} = \frac{\lambda_2^{(3)}}{x_{26}} = \theta_{26} = 1 \quad (\text{VIII, 117})$$

Таким образом, вектор A_6 должен быть включен в базис (VIII, 102) вместо вектора A_2 , в результате чего новый базис примет вид

$$A_1 = \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \\ 2 \end{pmatrix} \quad A_3 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad A_6 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (\text{VIII, 118})$$

и соответствующее ему базисное решение определится как

$$\left. \begin{aligned} \lambda_1^{(4)} &= \lambda_1^{(3)} - \theta^{(4)} x_{16} = \frac{9}{7} - 1 \cdot \frac{2}{7} = 1 \\ \lambda_2^{(4)} &= \lambda_2^{(3)} - \theta^{(4)} x_{26} = \frac{1}{7} - 1 \cdot \frac{1}{7} = 0 \\ \lambda_3^{(4)} &= \lambda_3^{(3)} - \theta^{(4)} x_{36} = \frac{2}{7} - 1 \cdot \left(-\frac{5}{7}\right) = 1 \\ \lambda_4^{(4)} &= 0 \quad \lambda_5^{(4)} = 0 \quad \lambda_6^{(4)} = \theta^{(4)} = 1 \end{aligned} \right\} \quad (\text{VIII, 119})$$

или

$$\lambda^{(4)} = (1, 0, 1, 0, 0, 1) \quad (\text{VIII, 120})$$

Прирост критерия оптимальности при переходе к базисному решению $\lambda^{(4)}$ составит:

$$\Delta R^{(4)} = \theta^{(4)} (c_6 - z_6) = 1 \left(0 + \frac{5}{14}\right) = \frac{5}{14} \quad (\text{VIII, 121})$$

$$R^{(4)} = R^{(3)} + \Delta R^{(4)} = \frac{23}{14} + \frac{5}{14} = 2 \quad (\text{VIII, 122a})$$

$$R^{(4)} = 1 \cdot 1 + \frac{1}{2} \cdot 0 + 1 \cdot 1 = 2 \quad (\text{VIII, 122б})$$

Теперь можно снова попытаться ввести в базис (VIII, 118) небазисные векторы A_2 , A_4 и A_5 , для чего найдем разложение всех небазисных векторов по базису (VIII, 118). Результаты расчета коэффициентов разложения x_{jk} удобно представить в матричной форме

$$[x_{jk}] = \begin{bmatrix} x_{12} & x_{14} & x_{15} \\ x_{32} & x_{34} & x_{35} \\ x_{62} & x_{64} & x_{65} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2 & -1 & 1 \\ 5 & 3 & -2 \\ 7 & 5 & -4 \end{bmatrix} \quad (\text{VIII, 123})$$

где коэффициенты разложения x_{jk} вектора A_k по векторам базиса записаны в столбце матрицы с индексом k .

Определяя значение z_j ($j = 2, 4, 5$), получим:

$$\left. \begin{aligned} z_2 &= c_1 x_{12} + c_3 x_{32} + c_6 x_{62} = 1 \cdot (-2) + 1 \cdot 5 + 0 \cdot 7 = 3 \\ z_4 &= c_1 x_{14} + c_3 x_{34} + c_6 x_{64} = 1 \cdot (-1) + 1 \cdot 3 + 0 \cdot 5 = 2 \\ z_5 &= c_1 x_{15} + c_3 x_{35} + c_6 x_{65} = 1 \cdot 1 + 1 \cdot (-2) + 0 \cdot (-4) = -1 \end{aligned} \right\} \quad (\text{VIII, 124})$$

Из всех z_j ($j = 2, 4, 5$) только значение z_5 удовлетворяет условию (VIII, 80), так как $c_5 = 0$, $z_5 < 0$ и

$$c_5 > z_5 \quad (\text{VIII, 125})$$

Следовательно, включение вектора A_5 в базис (VIII, 118) позволяет увеличить достигнутое значение критерия оптимальности (VIII, 106).

Поскольку только один из коэффициентов разложения вектора положителен: а именно $x_{15} = 1$, значение $\theta^{(5)}$ определяется как

$$\theta^{(5)} = \frac{\lambda_1^{(4)}}{x_{15}} = \theta_{15} = 1 \quad (\text{VIII, 126})$$

и новый базис получается заменой в базисе (VIII, 118) вектора A_1 на вектор A_5 :

$$A_3 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad A_5 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad A_6 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (\text{VIII, 127})$$

Новое базисное решение $\lambda^{(5)}$ при этом будет:

$$\left. \begin{aligned} \lambda_1^{(5)} &= \lambda_1^{(4)} - \theta^{(5)} x_{15} = 1 - 1 \cdot 1 = 0 & \lambda_2^{(5)} &= 0 \\ \lambda_3^{(5)} &= \lambda_3^{(4)} - \theta^{(5)} x_{35} = 1 - 1 \cdot (-2) = 3 & \lambda_4^{(5)} &= 1 \\ \lambda_5^{(5)} &= 1 & \lambda_6^{(5)} &= \lambda_6^{(4)} - \theta^{(5)} x_{65} = 1 - 1 \cdot (-4) = 5 \end{aligned} \right\} \quad (\text{VIII, 128})$$

или

$$\lambda^{(5)} = (0, 0, 3, 0, 1, 5) \quad (\text{VIII, 129})$$

Прирост критерия оптимальности при переходе к базисному решению составят:

$$\Delta R^{(5)} = \theta^{(5)} (c_5 - z_5) = 1 (0 + 1) = 1 \quad (\text{VIII, 130})$$

$$R^{(5)} = R^{(4)} + \Delta R^{(5)} = 2 + 1 = 3 \quad (\text{VIII, 131a})$$

$$R^{(5)} = 1 \cdot 0 + \frac{1}{2} \cdot 0 + 1 \cdot 3 = 3 \quad (\text{VIII, 131b})$$

Теперь могут быть найдены коэффициенты разложения небазисных векторов A_3 , A_5 и A_6 по базису (VIII, 127):

$$[x_{jk}] = \begin{bmatrix} x_{31} & x_{32} & x_{34} \\ x_{51} & x_{52} & x_{54} \\ x_{61} & x_{62} & x_{64} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & -2 & -1 \\ 4 & -1 & 1 \end{bmatrix} \quad (\text{VIII, 132})$$

и величины z_j ($j = 1, 2, 4$):

$$\left. \begin{aligned} z_1 &= c_3x_{31} + c_5x_{51} + c_6x_{61} = 1 \cdot 2 + 0 \cdot 1 + 0 \cdot 4 = 2 \\ z_2 &= c_3x_{32} + c_5x_{52} + c_6x_{62} = 1 \cdot 1 + 0 \cdot (-2) + 0 \cdot (-1) = 1 \\ z_4 &= c_3x_{34} + c_5x_{54} + c_6x_{64} = 1 \cdot 1 + 0 \cdot (-1) + 0 \cdot 1 = 1 \end{aligned} \right\} \quad (\text{VIII, 133})$$

Ни один из коэффициентов z_j ($j = 1, 2, 4$) не удовлетворяет условию (VIII, 80), и, следовательно, дальнейшего увеличения критерия оптимальности выше найденного значения (VIII, 131) получить нельзя.

Таким образом, оптимальное решение, максимизирующее критерий (VIII, 85) и удовлетворяющее условиям (VIII, 86), в окончательном виде может быть записано как

$$\left. \begin{aligned} x_{1 \text{ опт}} &= \lambda_1^{(5)} = 0 \\ x_{3 \text{ опт}} &= \lambda_2^{(5)} = 0 \\ x_{3 \text{ опт}} &= \lambda_3^{(5)} = 3 \end{aligned} \right\} \quad (\text{VIII, 134})$$

Нулевое значение дополнительной переменной x_4 в решении (VIII, 129) показывает, что для оптимального решения (VIII, 134) первое из неравенств (VIII, 86) обращается в равенство.

Ускорение сходимости симплексного метода. Симплексный метод решения задач линейного программирования по существу является шаговым методом, позволяющим последовательно улучшать имеющееся решение. В этом симплексный метод сходен с итеративными методами решения. Однако в отличие от большинства указанных методов, где момент окончания итераций обуславливается заданной точностью получения решения и она, как правило, увеличивается с возрастанием числа итераций, симплексный метод на последнем шаге характеризует решение, точность которого уже нельзя повысить увеличением числа шагов.

Каждый шаг симплексного метода требует выполнения соответствующего объема вычислительных и логических действий, из которых наибольшие вычислительные затраты приходятся на решение систем уравнений, определяющих коэффициенты разложения небазисных векторов, т. е. решение систем уравнений типа (VIII, 47a).

В рассмотренном выше примере VIII-4 для получения оптимального решения потребовалось решение 12 систем уравнений вида (VIII, 47a) при расчете коэффициентов разложения небазисных векторов (VIII, 64), (VIII, 71), (VIII, 98), (VIII, 108), (VIII, 111), (VIII, 114), (VIII, 123) и (VIII, 132) по векторам различных базисов.

Объем вычислений в случае определения коэффициентов разложения небазисных векторов по векторам одного и того же базиса можно несколько сократить, если при отыскании коэффициентов разложения небазисных векторов x_{jk} не решать систему уравнений (VIII, 47a) для каждого из небазисных векторов A_k , а для каждого нового базиса находить обратную матрицу системы уравнений (VIII, 47a):

$$[\beta_{(i), l}] = \begin{bmatrix} \beta_{(1), 1} & \beta_{(1), 2} & \dots & \beta_{(1), m} \\ \beta_{(2), 1} & \beta_{(2), 2} & \dots & \beta_{(2), m} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \beta_{(m), 1} & \beta_{(m), 2} & \dots & \beta_{(m), m} \end{bmatrix} \quad (\text{VIII, 135})$$

С помощью матрицы $[\beta_{(i), l}]$ легко вычисляются коэффициенты разложения $x_{(i), k}$ любого небазисного вектора A_k как произведение матрицы $[\beta_{(i), l}]$ на вектор

$$\begin{pmatrix} x_{(1), k} \\ x_{(2), k} \\ \vdots \\ x_{(m), k} \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} \beta_{(1), 1} & \beta_{(1), 2} & \dots & \beta_{(1), m} \\ \beta_{(2), 1} & \beta_{(2), 2} & \dots & \beta_{(2), m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \beta_{(m), 1} & \beta_{(m), 2} & \dots & \beta_{(m), m} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} a_{1k} \\ a_{2k} \\ \vdots \\ a_{mk} \end{pmatrix} \quad (\text{VIII, 136a})$$

или в обычной форме

$$x_{(i), k} = \sum_{l=1}^m \beta_{(i), l} a_{lk} \quad k = 1, \dots, m \quad (\text{VIII, 136b})$$

причем $x_{(i), k}$ — коэффициент при базисном векторе $A_{(i)}$ в разложении небазисного вектора A_k .

Использование матрицы $[\beta_{(i), l}]$ позволяет также записать сразу матрицу коэффициентов разложения всех небазисных векторов

$$[x_{jk}] = [\beta_{jl}] [A_k] \quad (\text{VIII, 137a})$$

или в развернутой форме:

$$\begin{bmatrix} x_{n+1, 1} & x_{n+1, 2} & \dots & x_{n+1, n} \\ x_{n+2, 1} & x_{n+2, 2} & \dots & x_{n+2, n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_{n+m, 1} & x_{n+m, 2} & \dots & x_{n+m, n} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \beta_{n+1, 1} & \beta_{n+1, 2} & \dots & \beta_{n+1, m} \\ \beta_{n+2, 1} & \beta_{n+2, 2} & \dots & \beta_{n+2, m} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \beta_{n+m, 1} & \beta_{n+m, 2} & \dots & \beta_{n+m, m} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mn} \end{bmatrix} \quad (\text{VIII, 137b})$$

где предполагается, что небазисные вектора — A_k ($k = 1, \dots, n$), а базисные — A_j ($j = n+1, \dots, n+m$).

Величины z_k ($k = 1, \dots, n$) могут быть также вычислены умножением вектора коэффициентов линейной формы (VIII, 43), соответствующего базисным векторам

$$C = (c_{n+1}, c_{n+2}, \dots, c_{n+m}) \quad (\text{VIII, 138})$$

на матрицу $[x_{jk}]$:

$$(z_1, z_2, \dots, z_n) = (c_{n+1}, c_{n+2}, \dots, c_{n+m}) \begin{bmatrix} x_{n+1,1} & x_{n+1,2} & \dots & x_{n+1,n} \\ x_{n+2,1} & x_{n+2,2} & \dots & x_{n+2,n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_{n+m,1} & x_{n+m,2} & \dots & x_{n+m,n} \end{bmatrix} \quad (\text{VIII, 139a})$$

или в обычной форме записи:

$$z_k = \sum_{j=n+1}^{n+m} c_j x_{jk} \quad k = 1, \dots, n \quad (\text{VIII, 139б})$$

Поскольку наибольший объем расчетов приходится на определение обратной матрицы $[\beta_{jl}]$, желательно уменьшить число промежуточных базисов, для каждого из которых необходимо вычислять обратную матрицу. Этого можно достичь, если на каждом шаге симплексного метода выбирать небазисный вектор A_k , вводимый в базис, так, чтобы он давал наибольшее изменение оптимизируемого критерия.

Поэтому в некоторых алгоритмах симплексного метода, запрограммированных на вычислительных машинах, в качестве критерия выбора небазисного вектора, вводимого в базис, применяется величина разности $c_k - z_k$. Вектор A_k , для которого разность $c_k - z_k$ наибольшая, и вводится в исходный базис. Для этого алгоритма после вычисления обратной матрицы $[\beta_{jl}]$ (VIII, 135) необходимо еще рассчитать матрицу коэффициентов разложения (VIII, 137) и величины z_k (VIII, 139).

Выбор небазисного вектора A_k можно сделать еще более эффективным, если в качестве критерия выбора использовать не разность $c_k - z_k$, а непосредственно приращение критерия оптимальности (VIII, 43) решаемой задачи, которое, согласно выражению (VIII, 78), равно:

$$\Delta R = \theta_k (c_k - z_k) \quad (\text{VIII, 140})$$

В данном случае, правда, приходится еще определять значения θ_k по соотношению (VIII, 54) для всех небазисных векторов, однако объем вычислений все же невелик по сравнению с вычислительными затратами на нахождение обратной матрицы $[\beta_{jl}]$. Вместе с тем, этот прием может иногда весьма существенно ускорить сходимость симплексного метода.

Пример VIII-5. Решить задачу, рассмотренную в примере VIII-4, применяя методику выбора небазисного вектора по максимальному приращению линейной формы.

Решение. В качестве первоначального базиса, как и в примере VIII-4, принимается базис, соответствующий дополнительным переменным x_4 , x_5 и x_6 , который в матричной форме представляется в виде единичной матрицы:

$$[A_j] = \begin{bmatrix} & 4 & 5 & 6 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (\text{VIII, 141})$$

Обратная матрица $[\beta_{ji}]$ для матрицы $[A_j]$ (VIII, 141) также будет единичной:

$$[\beta_{ji}] = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (\text{VIII, 142})$$

Небазисные вектора A_1 , A_2 и A_3 образуют в данном случае матрицу:

$$[A_k] = \begin{bmatrix} & 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 1 \\ 3 & -1 & 1 \\ 2 & 2 & -1 \end{bmatrix} \quad (\text{VIII, 143})$$

Найдем матрицу коэффициентов разложения небазисных векторов:

$$[x_{jk}] = \begin{bmatrix} x_{41} & x_{42} & x_{43} \\ x_{51} & x_{52} & x_{53} \\ x_{61} & x_{62} & x_{63} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} & 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 1 \\ 3 & -1 & 1 \\ 2 & 2 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 3 & -1 & 1 \\ 2 & 2 & -1 \end{bmatrix} \quad (\text{VIII, 144})$$

Вектор коэффициентов C (VIII, 138), отвечающий базисным векторам, имеет вид

$$C = (c_4 c_5 c_6) = (0, 0, 0) \quad (\text{VIII, 145})$$

откуда все z_k ($k = 1, 2, 3$) на этом этапе равны нулю, т. е.

$$z_1 = z_2 = z_3 = 0 \quad (\text{VIII, 146})$$

Определим величины $\theta_k^{(1)}$, принимая во внимание исходное базисное решение $\lambda^{(0)}$ (VIII, 60) и соответствующие столбцы матрицы коэффициентов разложения $[x_{jk}]$ (VIII, 144):

$$\theta_1^{(1)} = \min_{j=4, 5, 6} \frac{\lambda_j^{(0)}}{x_{j1}} = \frac{\lambda_6^{(0)}}{x_{61}} = \theta_{61} = 1 \quad (\text{VIII, 147a})$$

$$\theta_2^{(1)} = \frac{\lambda_4^{(0)}}{x_{42}} = \theta_{42} = 3 \quad (\text{VIII, 147б})$$

$$\theta_3^{(1)} = \min_{j=4, 5} \frac{\lambda_j^{(0)}}{x_{j3}} = \frac{\lambda_4^{(0)}}{x_{43}} = \theta_{43} = 3 \quad (\text{VIII, 147в})$$

Найдем теперь возможные приращения критерия (VIII, 85):

$$\Delta R_1^{(1)} = \theta_1^{(1)} (c_1 - z_1) = 1 (1 - 0) = 1 \quad (\text{VIII, 148a})$$

$$\Delta R_2^{(1)} = \theta_2^{(1)} (c_2 - z_2) = 3 \left(\frac{1}{2} - 0 \right) = \frac{3}{2} \quad (\text{VIII, 148б})$$

$$\Delta R_3^{(1)} = \theta_3^{(1)} (c_3 - z_3) = 3 (1 - 0) = 3 \quad (\text{VIII, 148в})$$

Следовательно, в исходном базисе (VIII, 141) вектор A_4 должен быть заменен вектором A_3 , и, таким образом, уже на первом шаге симплексного метода получается максимальное значение критерия оптимальности (VIII, 85):

$$R^{(1)} = R^{(0)} + \Delta R_3^{(1)} = 0 + 3 = 3 \quad (\text{VIII, 149})$$

[см. уравнение (VIII, 131) и сл.].

Определение начального базисного решения

В рассмотренных выше примерах VIII-3 и VIII-4 начальное базисное решение, с которого начинается применение симплексного метода, легко находилось за счет того, что матрица ограничений, получаемая с учетом дополнительных переменных (VIII, 59):

$$\left[\begin{array}{ccc|ccc} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 2 & 1 & 1 & 100 & & \\ 3 & -1 & 1 & 010 & & \\ 2 & -2 & -1 & 001 & & \end{array} \right] \quad (\text{VIII, 150})$$

содержит единичную подматрицу

$$\left[\begin{array}{ccc} 4 & 5 & 6 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{array} \right] \quad (\text{VIII, 151})$$

что позволяет сразу записать начальное базисное решение (VIII, 69).

На практике не всегда можно сразу выделить в матрице ограничений единичную подматрицу требуемого вида, т. е. единичную подматрицу, порядок которой равен числу уравнений m в системе ограничений. Поэтому представляют интерес методы определения начального базисного решения, из которых ниже описан метод искусственного базиса [2].

Метод искусственного базиса позволяет построением единичной подматрицы порядка m сразу получить начальное базисное решение приравниванием значений переменных, образующих единичную подматрицу, правым частям соответствующих уравнений. Остальные переменные задачи при этом полагаются равными нулю.

Ниже рассматривается процедура построения искусственного базиса для различных типов ограничений в общей постановке задачи линейного программирования.

Случай 1. Ограничения на независимые переменные заданы только в виде неравенств типа (VIII, 2a):

$$\sum_{j=1}^n a_{ij} x_j \leq b_i \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{VIII, 152})$$

причем

$$b_i > 0 \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{VIII, 153})$$

Введением дополнительных переменных неравенства (VIII, 152) преобразуются в равенства:

$$\begin{array}{lcl} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n + & \boxed{x_{n+1}} & = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n & + x_{n+2} & = b_2 \\ \dots & \dots & \dots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \dots + a_{mn}x_n & + x_{m+n} & = b_m \end{array} \quad (\text{VIII, 154})$$

Нетрудно видеть, что матрица дополнительных переменных x_{n+i} ($i = 1, \dots, m$) образует единичную подматрицу требуемого вида и дополнительные переменные могут быть использованы для определения начального базисного решения, которое в данном случае записывается в форме:

$$\left. \begin{array}{l} \lambda_j = 0 \quad j = 1, \dots, n \\ \lambda_{n+i} = b_i \quad i = 1, \dots, m \end{array} \right\} \quad (\text{VIII, 155})$$

Решение (VIII, 155), согласно условиям (VIII, 153), является допустимым базисным решением, поскольку содержит ровно m отличных от нуля положительных компонентов.

Случай 2. Ограничения на независимые переменные заданы только в виде неравенств типа (VIII, 26):

$$\sum_{j=1}^n a_{ij}x_j \geq b_i \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{VIII, 156})$$

причем

$$b_i > 0 \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{VIII, 157})$$

Введение дополнительных переменных, преобразующих неравенства (VIII, 156) в равенства, не позволяет найти допустимое базисное решение, поскольку соответствующая дополнительным переменным единичная подматрица имеет отрицательные элементы:

$$\begin{array}{lcl} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n + & \boxed{-x_{n+1}} & = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n & - x_{n+2} & = b_2 \\ \dots & \dots & \dots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \dots + a_{mn}x_n & - x_{n+m} & = b_m \end{array} \quad (\text{VIII, 158})$$

Для того чтобы в системе уравнений (VIII, 158) образовать единичную подматрицу с положительными элементами, можно воспользоваться следующим приемом. Выделим из системы уравнений (VIII, 158) уравнение, в котором правая часть имеет наибольшую величину b_i . Остальные уравнения системы умножим на -1 и сложим с этим уравнением, тогда получим новую систему уравнений, эквивалентную прежней, в которой $m-1$ уравнений уже будут включать дополнительные переменные со знаком плюс.

Предположим, что

$$\max b_i = b_m \quad 1 \leq i \leq m \quad (\text{VIII, 159})$$

Тогда в результате использования рассмотренного преобразования получим следующую систему уравнений:

$$\begin{array}{ccccccc}
 a'_{11}x_1 & + a'_{12}x_2 & + \dots + a'_{1n}x_n & \boxed{+ x_{n+1}} & - x_{n+m} & = b'_1 \\
 a'_{21}x_1 & + a'_{22}x_2 & + \dots + a'_{2n}x_n & \quad \quad + x_{n+2} & - x_{n+m} & = b'_2 \\
 \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
 a'_{m-1,1}x_1 & + a'_{m-1,2}x_2 & + \dots + a'_{m-1,n}x_n & \quad \quad \quad + x_{n+m-1} & - x_{n+m} & = b'_{m-1} \\
 a_{m1}x_1 & + a_{m2}x_2 & + \dots + a_{mn}x_n & & - x_{n+m} & = b_m
 \end{array}
 \quad \text{(VIII, 160)}$$

где

$$a'_{ij} = a_{mj} - a_{ij} \quad b'_i = b_m - b_i \quad \text{(VIII, 161)}$$

Переменные x_j ($j = n+1, \dots, n+m-1$) образуют в системе (VIII, 160) единичную подматрицу порядка $m-1$. Для того чтобы дополнить ее до единичной порядка m , в последнее уравнение введем искусственную переменную x_{n+m+1} со знаком плюс. Тогда система уравнений (VIII, 160) переписится в виде:

$$\begin{array}{ccccccc}
 a'_{11}x_1 & + a'_{12}x_2 & + \dots + a'_{1n}x_n & - x_{n+m} & \boxed{+ x_{n+1}} & & = b'_1 \\
 a'_{21}x_1 & + a'_{22}x_2 & + \dots + a'_{2n}x_n & - x_{n+m} & \quad \quad + x_{n+2} & & = b'_2 \\
 \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
 a'_{m-1,1}x_1 & + a'_{m-1,2}x_2 & + \dots + a'_{m-1,n}x_n & - x_{n+m} & \quad \quad \quad + x_{n+m-1} & & = b'_{m-1} \\
 a_{m1}x_1 & + a_{m2}x_2 & + \dots + a_{mn}x_n & - x_{n+m} & & + x_{n+m+1} & = b_m
 \end{array}
 \quad \text{(VIII, 162)}$$

и дополнительные переменные x_j ($j = n+1, \dots, n+m-1$) совместно с искусственной переменной x_{n+m+1} образуют единичную подматрицу требуемого вида, с помощью которой начальное базисное решение может быть записано в форме:

$$\left. \begin{array}{ll} \lambda_j = 0 & j = 1, \dots, n \\ \lambda_{n+m} = 0 \\ \lambda_{n+i} = b'_i & i = 1, \dots, m-1 \\ \lambda_{n+m+1} = b_m \end{array} \right\} \quad \text{(VIII, 163)}$$

В оптимальном решении значение искусственной переменной x_{n+m+1} должно быть в точности равно нулю, для чего необходимо, чтобы базисный вектор, соответствующий этой переменной, был исключен из окончательного базиса. При использовании симплексного метода в этом случае необходимо предусмотреть специальный контроль за исключением базисного вектора, отвечающего искусственной переменной x_{n+m+1} , что вносит определенные неудобства при решении задач линейного программирования на вычислительных машинах.

Для того чтобы обеспечить автоматическое исключение вектора, соответствующего искусственной переменной x_{n+m+1} , можно

ввести ее в максимизируемый критерий R с большим отрицательным коэффициентом, т. е. записать критерий оптимальности в виде

$$R = \sum_{j=1}^{n+m} c_j x_j - M x_{n+m+1} \quad (\text{VIII}, 164)$$

причем M — достаточно большая положительная величина, например, близкая к предельному значению диапазона представления числа в вычислительной машине.

При решении задачи максимизации критерия R , определяемого выражением (VIII, 164), вектор, отвечающий искусственной переменной x_{n+m+1} , автоматически исключается из числа базисных векторов, так как при наличии его в базисе ($x_{n+m+1} \neq 0$) значение $R \sim -M x_{n+m+1}$ и наибольшему приросту критерию оптимальности соответствует исключение именно данного вектора, поскольку при этом значение x_{n+m+1} обращается в нуль.

Случай 3. Ограничения на независимые переменные заданы в виде неравенств обоих типов (VIII, 2a) и (VIII, 26):

$$\sum_{j=1}^n a_{ij} x_j \leq b_i \quad i = 1, \dots, m_1 \quad (\text{VIII}, 165a)$$

$$\sum_{j=1}^n a_{ij} \geq b_i \quad i = m_1 + 1, \dots, m \quad (\text{VIII}, 165b)$$

причем

$$b_i > 0 \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{VIII}, 166)$$

Введение дополнительных переменных преобразует неравенства (VIII, 165) в равенства, причем дополнительные переменные в неравенствах (VIII, 165a), дающие единичную подматрицу с положительными элементами порядка m_1 , можно использовать для нахождения начального базисного решения. Недостающее число отличных от нуля компонентов базисного решения при этом может быть получено применением к неравенствам (VIII, 165b) приема, описанного для случая 2.

Если принять, что значение b_m — наибольшее среди всех b_i ($i = 1, \dots, m$), то после преобразований неравенств (VIII, 165) можно записать следующую систему уравнений:

$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n$	$+ x_{n+1}$	$= b_1$
$a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n$	$+ x_{n+2}$	$= b_2$
$\dots$		$\dots$
$a_{m_1 1}x_1 + a_{m_1 2}x_2 + \dots + a_{m_1 n}x_n$	$+ x_{n+m_1}$	$= b_{m_1}$
$a'_{m_1+1, 1}x_1 + a'_{m_1+1, 2}x_2 + \dots + a'_{m_1+1, n}x_n$	$+ x_{n+m_1+1} - x_{n+m}$	$= b'_{m_1+1}$
$\dots$		$\dots$
$a'_{m-1, 1}x_1 + a'_{m-1, 2}x_2 + \dots + a'_{m-1, n}x_n$	$+ x_{n+m-1} - x_{n+m}$	$= b'_{m-1}$
$a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \dots + a_{mn}x_n$	$+ x_{n+m+1} - x_{n+m}$	$= b_m$

(VIII, 167)

т. е. начальное базисное решение системы (VIII, 167) по-прежнему определяется соотношениями (VIII, 163). В процессе решения задачи критерий оптимальности используется в форме выражения (VIII, 164).

Случай 4. Среди ограничений исходной задачи линейного программирования имеются ограничения типа равенств (VIII, 2в).

В предшествующих случаях уже была рассмотрена методика образования единичной подматрицы, когда в исходной постановке задачи линейного программирования существуют ограничения типа неравенств. Остается распространить указанную методику на ограничения типа равенств.

Очевидно, что в каждое такое ограничение можно ввести искусственную переменную. Число искусственных переменных при этом равно числу ограничений типа равенств, и для автоматического обращения их в нуль в конечном решении задачи можно применять критерий оптимальности в форме выражения:

$$R = \sum_{j=1}^n c_j x_j - M \sum_{i=1}^{m-m_2} x_{n+m_2+i} \quad (\text{VIII, 168})$$

Вычисление обратной матрицы нового базиса по известной обратной матрице исходного базиса

Выше уже отмечалось, что основной объем вычислений при решении задач линейного программирования приходится на расчеты, связанные с определением обратных матриц для получаемых на каждом шаге базисов. При использовании общих методов [3] для задач высокой размерности, т. е. с большим числом независимых переменных, объем вычислений, приходящийся на обращение матриц порядка m , возрастает быстрее, чем m^2 , что может существенно увеличить общее время решения оптимальной задачи. Поэтому представляет интерес применение методов вычисления обратных матриц, основанных на свойствах последовательности базисов, получаемой при использовании симплексного метода.

Таким свойством, которое позволяет значительно сократить объем вычислений при определении обратной матрицы нового базиса, является свойство исходного базиса давать новый базис заменой только одного из векторов исходного. При этом оказывается возможным представить обратную матрицу нового базиса как произведение обратной матрицы исходного базиса на некоторую дополнительную матрицу, находимую несложными вычислениями [4].

Поскольку расчет произведения матриц требует значительно меньших вычислительных затрат, чем определение обратной матрицы, преимущества представления обратной матрицы исходного базиса на дополнительную очевидны. К этому следует добавить, что для начального базисного решения часто имеется единичная матрица, для которой обратная матрица также единична. Поэтому и на первом шаге решения задачи линейного программиро-

вания симплексным методом не требуется вычислять обратную матрицу.

Итак, пусть исходный базис образован векторами A_{n+k} ($k = 1, \dots, m$). Соответствующая этому базису матрица может быть записана в виде:

$$[A_j] = [A_{n+1}, A_{n+2}, \dots, A_{n+m}] \quad (\text{VIII, 169})$$

В результате перехода к новому базису вектор A_{n+p} ($1 \leq p \leq m$) исходного базиса заменяется на небазисный A_k ($k \leq n$), и новому базису теперь отвечает матрица

$$[A'_j] = [A_{n+1}, \dots, A_{n+p-1}, A_k, A_{n+p+1}, \dots, A_{n+m}] \quad (\text{VIII, 170})$$

для которой предстоит определить обратную матрицу $[A'_j]^{-1}$.

Предположим, что существует некоторая дополнительная матрица $[D]$, умножением которой на обратную матрицу исходного базиса $[A_j]^{-1}$ можно получить обратную матрицу нового базиса $[A'_j]^{-1}$, т. е.

$$[A'_j]^{-1} = [D] [A_j]^{-1} \quad (\text{VIII, 171})$$

Найдем вид дополнительной матрицы $[D]$. Для этого в соответствии с правилами действий над матрицами (см. Приложение) перепишем соотношение (VIII, 171) в форме

$$[A'_j] = [A_j] [D]^{-1} \quad (\text{VIII, 172})$$

которая означает, что, с одной стороны, матрица нового базиса получается из матрицы исходного базиса умножением на матрицу $[D]^{-1}$, обратную к матрице $[D]$. С другой стороны, матрица $[A'_j]$ отличается от матрицы $[A_j]$ только одним p -ым столбцом.

Согласно определению произведения матриц, столбец матрицы $[A'_j]$ в соотношении (VIII, 172) находится умножением матрицы $[A_j]$ на соответствующий столбец матрицы $[D]^{-1}$. При этом для совпадающих столбцов матриц $[A'_j]$ и $[A_j]$ соответствующие столбцы матрицы $[D]^{-1}$ должны содержать только один элемент, отличный от нуля и равный 1, причем именно тот, номер которого в столбце совпадает с номером столбца, т. е. элемент, расположенный на главной диагонали матрицы $[D]^{-1}$. Иными словами, матрица $[D]^{-1}$ должна совпадать с единичной матрицей, кроме только одного столбца с номером p , отвечающего исключаемому вектору A_{n+p} исходного базиса:

$$[D]^{-1} = \begin{bmatrix} (1) & (2) & (p-1) & (p) & (p+1) & (m) \\ 1 & 0 & 0 & u_{1p} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & u_{2p} & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & u_{mp} & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (\text{VIII, 173})$$

Таким образом, из соотношения (VIII, 172) и предыдущих рассуждений следует, что p -ый столбец матрицы $[A'_j]$, на месте которого

располагается вектор A_k , включаемый в исходный базис, может быть представлен как

$$A_k = [A_j] U_p \quad (\text{VIII}, 174)$$

где

$$U_p = \begin{pmatrix} u_{1p} \\ u_{2p} \\ \vdots \\ u_{mp} \end{pmatrix}$$

Из соотношения (VIII, 174) теперь можно получить, что

$$U_p = [A_j]^{-1} A_k \quad (\text{VIII}, 175)$$

Поскольку предполагается, что обратная матрица исходного базиса $[A_j]$ известна, вектор-столбец U_p матрицы $[D]^{-1}$ может быть легко вычислен с помощью соотношения (VIII, 175) как результат умножения матрицы $[A_j]^{-1}$ на вектор A_k , включаемый в исходный базис.

Нетрудно также заметить, что элементами вектора-столбца U_p являются коэффициенты разложения вектора A_k по векторам исходного базиса, т. е.

$$u_{ip} = x_{n+i, k} \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{VIII}, 176)$$

Итак, найдено представление для матрицы $[D]^{-1}$, и задача отыскания матрицы $[D]$ тем самым сводится к образованию матрицы $[D]^{-1}$, имеющий вид (VIII, 173).

Можно показать, что обращение матрицы типа (VIII, 173), отличающейся от единичной только одним столбцом, сводится к преобразованию элементов лишь этого столбца по формулам:

$$d_{ip} = -\frac{u_{ip}}{u_{pp}} \quad d_{pp} = \frac{1}{u_{pp}} \quad i = 1, \dots, m \quad i \neq p \quad (\text{VIII}, 177)$$

причем d_{ip} ($i = 1, \dots, m$) — элементы p -го столбца матрицы $[D]$.

В результате дополнительная матрица $[D]$ также имеет форму матрицы $[D]^{-1}$ (VIII, 173):

$$[D] = \begin{bmatrix} (1) & (2) & (p-1) & (p) & (p+1) & (m) \\ 1 & 0 & 0 & d_{1p} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & d_{2p} & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & d_{mp} & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (\text{VIII}, 178)$$

причем элементы d_{ip} рассчитываются по формулам (VIII, 177).

Таким образом, найден вид дополнительной матрицы $[D]$ и выведены правила для вычисления ее элементов в форме выражений (VIII, 175) — (VIII, 177). Теперь расчет обратной матрицы для нового базиса по формуле (VIII, 177) не составляет особого труда.

Порядок действий при определении обратной матрицы нового базиса может быть сформулирован в виде следующих этапов вычислений:

1. Для вектора A_k , включаемого в исходный базис вместо вектора A_{n+p} , по формуле (VIII, 175) вычисляется вектор-столбец U_p . Здесь следует заметить, что поскольку для небазисного вектора, вводимого в исходный базис, коэффициенты разложения по векторам базиса известны, то, согласно соотношениям (VIII, 176), можно считать известными также и элементы вектора-столбца U_p . Поэтому в программе симплексного метода этот этап обычно отсутствует. Однако для того, чтобы придать рассматриваемому алгоритму вычисления обратной матрицы нового базиса законченный вид, приведем сводку формул, используемых на первом этапе вычислений.

Векторное соотношение (VIII, 175) может быть также представлено в обычной форме как

$$u_{ip} = \sum_{l=1}^m \beta_{n+l, l} a_{lk} \quad (\text{VIII, 179})$$

где u_{ip} — элементы p -го столбца матрицы $[D]^{-1}$

$$U_p = \begin{pmatrix} u_{1p} \\ u_{2p} \\ \vdots \\ u_{mp} \end{pmatrix} \quad (\text{VIII, 180})$$

a_{lk} — элементы вектора A_k , вводимого в исходный базис:

$$A_k = \begin{pmatrix} a_{1k} \\ a_{2k} \\ \vdots \\ a_{mk} \end{pmatrix} \quad (\text{VIII, 181})$$

$\beta_{n+l, l}$ — элементы матрицы $[\beta_{jl}]$, обратной матрице $[A_j]$ векторов исходного базиса:

$$[A_j]^{-1} = [\beta_{n+l, l}] = \begin{bmatrix} \beta_{n+1, 1} & \beta_{n+1, 2} & \dots & \beta_{n+1, m} \\ \beta_{n+2, 1} & \beta_{n+2, 2} & \dots & \beta_{n+2, m} \\ \beta_{n+m, 1} & \beta_{n+m, 2} & \dots & \beta_{n+m, m} \end{bmatrix} \quad (\text{VIII, 182})$$

2. По формулам (VIII, 177) определяются элементы p -го столбца матрицы $[D]$ (VIII, 178).

3. По формуле (VIII, 171) вычисляется обратная матрица $[A_j']^{-1}$ нового базиса. При этом матричное равенство (VIII, 171)

можно записать в виде следующей формулы для расчета элементов $\beta'_{n+1, l}$ обратной матрицы нового базиса:

$$\beta'_{n+1, l} = \sum_{q=1}^m d_{lq} \beta_{n+q, l} \quad (\text{VIII, 183})$$

Формула для расчета элементов обратной матрицы нового базиса может быть также существенно упрощена за счет того, что в дополнительной матрице $[D]$ отличными от нуля являются только элементы, расположенные на главной диагонали, и элементы p -го столбца. Поэтому формула (VIII, 183) упрощается и заменяется системой соотношений

$$\left. \begin{aligned} \beta'_{n+1, l} &= \beta_{n+1, l} + d_{lp} \beta_{n+p, l} & i, l = 1, \dots, m, & \quad l \neq p \\ \beta'_{n+p, l} &= d_{pp} \beta_{n+p, l} & l = 1, \dots, m \end{aligned} \right\} \quad (\text{VIII, 184})$$

которую, в свою очередь, с учетом выражений (VIII, 176) можно также переписать в виде:

$$\left. \begin{aligned} \beta'_{n+1, l} &= \beta_{n+1, l} - \frac{x_{n+1, k}}{x_{n+p, k}} \beta_{n+p, l} & i, l = 1, \dots, m \\ \beta'_{n+p, l} &= \frac{1}{x_{n+p, k}} \beta_{n+p, l} & l = 1, \dots, m \end{aligned} \right\} \quad (\text{VIII, 185})$$

причем x_{jk} — коэффициенты разложения небазисного вектора A_k по векторам исходного базиса.

Соотношения (VIII, 185) обычно и используются при выполнении этого этапа расчета, причем, если найдены коэффициенты разложения небазисного вектора A_k , вводимого в исходный базис вместо вектора A_{n+p} , то формулы (VIII, 185) позволяют сразу же определить и обратную матрицу нового базиса.

Пример VIII-6. В исходном базисе, матрица которого имеет вид

$$[A_j] = \begin{bmatrix} A_3 & A_4 & A_5 \\ 1 & 0 & 1 \\ 2 & 1 & 1 \\ -1 & 2 & -1 \end{bmatrix} \quad (\text{VIII, 186})$$

и известна обратная матрица

$$[A_j]^{-1} = \begin{bmatrix} -\frac{3}{2} & 1 & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ \frac{5}{2} & -1 & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \quad (\text{VIII, 187})$$

вектор-столбец A_4 заменяется на вектор A_k

$$A_k = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix} \quad (\text{VIII, 188})$$

В результате получается матрица нового базиса:

$$[A'_j] = \begin{matrix} & (A_3) & (A_k) & (A_5) \\ \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ -1 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \end{bmatrix} \end{matrix} \quad (\text{VIII, 189})$$

для которой требуется найти обратную матрицу $[A'_j]^{-1}$.

Решение. По формуле (VIII, 175) определяется вектор-столбец U_2 :

$$U_2 = [A_j]^{-1} A_k = \begin{bmatrix} -\frac{3}{2} & 1 & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ \frac{5}{2} & -1 & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 \\ \boxed{2} \\ 2 \end{pmatrix} \quad (\text{VIII, 190})$$

По формулам (VIII, 177) находятся соответствующие элементы матрицы $[D]$

$$D_2 = \begin{pmatrix} d_{12} \\ d_{22} \\ d_{32} \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} \\ \boxed{\frac{1}{2}} \\ 1 \end{bmatrix} \quad (\text{VIII, 191})$$

и составляется матрица $[D]$:

$$[D] = \begin{bmatrix} 1 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -1 & 1 \end{bmatrix} \quad (\text{VIII, 192})$$

Перемножением матриц $[D]$ и $[A_j]^{-1}$ определяется обратная матрица $[A'_j]^{-1}$ нового базиса:

$$[A'_j]^{-1} = [D][A_j]^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -\frac{3}{2} & 1 & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ \frac{5}{2} & -1 & \frac{1}{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{5}{4} & 1 & -\frac{1}{4} \\ \frac{1}{4} & 0 & \frac{1}{4} \\ 2 & -1 & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{VIII, 193})$$

Алгоритм симплексного метода

Решение задач линейного программирования при достаточно большом числе переменных в исходной постановке задачи, как правило, требует применения цифровых вычислительных машин. При этом весьма важное значение приобретают вопросы организа-

ции распределения памяти вычислительной машины с тем, чтобы обеспечить наиболее рациональную организацию процесса вычислений.

Как уже отмечалось выше, симплексный метод по существу является шаговым циклическим методом, в котором одна и та же совокупность вычислительных операций выполняется для различных массивов цифровой информации. Такими массивами служат матрицы базисных и небазисных векторов, между которыми осуществляется обмен информацией после каждого шага симплексного метода. Вследствие этого содержание указанных массивов изменяется в процессе вычислений, что должно найти отражение в формульной записи используемых алгоритмов счета.

В практике машинных расчетов для реализации циклических процессов счета широко применяется прием размещения информации в так называемых стандартных ячейках памяти. Программа расчета для формульной части задачи при этом записывается в адресах ячеек безотносительно к их фактическому содержанию на данном цикле вычислений. Изменение информации, содержащейся в стандартных ячейках, осуществляется специальной программой обмена (циркуляции) информации между ячейками, алгоритм которой либо содержится в самом методе вычислений, либо разрабатывается специально с учетом применения к конкретной вычислительной машине.

Для симплексного метода алгоритм обмена информацией между массивами базисных и небазисных векторов задан в самом методе и сводится к замене одного из базисных векторов небазисным.

Ниже при изложении одного из возможных вариантов алгоритма симплексного метода использован прием циркуляции информации в стандартных ячейках, имеющих собственную индексацию.

В дальнейшем предполагается, что исходная постановка задачи линейного программирования представлена в форме максимизации критерия оптимальности, заданного в виде

$$R = \sum_{j=1}^{n+m} c_j x_j \quad (\text{VIII, 194})$$

с ограничениями на независимые переменные

$$\sum_{j=1}^{n+m} a_{ij} x_j = b_i \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{VIII, 195})$$

Здесь все $b_i > 0$ и, кроме того, принимается, что матрица ограничений (VIII, 195)

$$[A] = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1, n+m} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2, n+m} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{m, n+m} \end{bmatrix} \quad (\text{VIII, 196})$$

содержит единичную квадратную подматрицу порядка m , образованную дополнительными переменными, которая применяется для определения начального базисного решения. Если в задаче используются также и искусственные переменные, то критерий оптимальности представляется в форме выражения (VIII, 168).

В качестве основных элементов, применяемых для хранения массивов информации, принимаются обобщенные вектора

$$\tilde{Y}_s = \begin{pmatrix} y_{1s} \\ y_{2s} \\ \vdots \\ y_{m+s, s} \end{pmatrix} \quad s = 1, \dots, n + m \quad (\text{VIII, 197})$$

каждый из которых размещается в $m + 3$ ячейках памяти.

Элементы y_{is} ($i = 1, \dots, m$) вектора $\tilde{Y}_s$ используются для хранения любого вектора-столбца U_p матрицы ограничений (VIII, 196), соответствующего независимой переменной x_j . Остальные три элемента y_{is} ($i = m + 1, m + 2, m + 3$) применяются для хранения остальной информации задачи, относящейся к этой переменной. Элемент $y_{m+1, s}$ предназначен для хранения значения коэффициента c_j линейной формы (VIII, 194), отвечающего этой переменной. Элемент $y_{m+1, s}$ служит для хранения значения переменной x_j , которое она имеет на данном этапе вычислений. Наконец, элемент $y_{m+3, s}$ предназначен для хранения значения индекса j переменной x_j , присвоенного ей в исходной формулировке задачи линейного программирования.

Для удобства выполнения матричных операций, особенно при использовании стандартных программ их реализации на вычислительной машине конкретного типа, возможно разделение массива векторов $\tilde{Y}_s$ ($s = 1, \dots, n + m$) на два, одним из которых будет массив, образованный векторами-столбцами матрицы ограничений (VIII, 196):

$$Y_s = \begin{pmatrix} y_{1s} \\ y_{2s} \\ \vdots \\ y_{ms} \end{pmatrix} \quad s = 1, \dots, n + m \quad (\text{VIII, 198})$$

Другой массив образован векторами

$$Y_s^* = \begin{pmatrix} y_{m+1, s} \\ y_{m+2, s} \\ y_{m+3, s} \end{pmatrix} \quad s = 1, \dots, n + m \quad (\text{VIII, 199})$$

в элементах которых хранится информация, непосредственно относящаяся к соответствующим векторам первого массива. При этом необходимо учитывать, что содержание соответствующих элементов обоих массивов, определенных указанным выше образом,

должно пересылаться при выполнении вычислений одновременно.

Распределение информации, обрабатываемой в процессе счета, производится следующим образом. Массив памяти, отведенный под обобщенные вектора Y_k ($k = 1, \dots, n$), используется для размещения небазисных векторов матриц ограничений (VIII, 196). Индекс k является адресом вектора в этом массиве и может изменяться только в пределах

$$1 \leq k \leq n \quad (\text{VIII, 200})$$

безотносительно к номеру вектора A_j , который в данный момент записан на месте вектора Y_k .

Массив памяти, отведенный под обобщенные вектора Y ($j = n + 1, \dots, n + m$), применяется для размещения базисных векторов матрицы ограничений (VIII, 196). Поскольку j можно представить как $n + i$ и величина n фиксирована, индекс i может использоваться как номер обобщенного базисного вектора, изменяющийся в пределах:

$$1 \leq i \leq m \quad (\text{VIII, 201})$$

Для удобства записи в дальнейшем предполагается, что через Y_k обозначен небазисный вектор, а через Y_{n+i} — базисный. Обозначения для матриц небазисных и базисных векторов соответственно имеют вид:

$$[Y_k] = \begin{bmatrix} y_{11} & y_{12} & \dots & y_{1n} \\ y_{21} & y_{22} & \dots & y_{2n} \\ y_{m1} & y_{m2} & \dots & y_{mn} \end{bmatrix} \quad (\text{VIII, 202})$$

$$[Y_{n+i}] = \begin{bmatrix} y_{1,n+1} & y_{1,n+2} & \dots & y_{1,n+m} \\ y_{2,n+1} & y_{2,n+2} & \dots & y_{2,n+m} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ y_{m,n+1} & y_{m,n+2} & \dots & y_{m,n+m} \end{bmatrix} \quad (\text{VIII, 203})$$

Кроме массивов, отведенных для размещения базисных и небазисных векторов, в памяти вычислительной машины предусматривается размещение массива ячеек для запоминания обратной матрицы базиса

$$[\beta_{il}] = \begin{bmatrix} \beta_{11}\beta_{12} & \dots & \beta_{1m} \\ \beta_{21}\beta_{22} & \dots & \beta_{2m} \\ \dots & \dots & \dots \\ \beta_{m1}\beta_{m2} & \dots & \beta_{mm} \end{bmatrix} \quad (\text{VIII, 204})$$

и, возможно, матрицы коэффициентов разложения небазисных векторов

$$[x_{ik}] = \begin{bmatrix} x_{11}x_{12} & \dots & x_{1m} \\ x_{21}x_{22} & \dots & x_{2m} \\ x_{m1}x_{m2} & \dots & x_{mm} \end{bmatrix} \quad (\text{VIII, 205})$$

Матрицу (VIII, 205), вообще говоря, не обязательно запоминать целиком в процессе вычислений, о чем сказано ниже.

Начальный этап размещения информации. На этом этапе исходная информация задачи вводится в вычислительную машину и располагается в предназначенных для нее массивах. В массиве, отведенном для матрицы базисных векторов (VIII, 203), размещается единичная подматрица, которая, по предположению, имеется в исходной точке ограничений (VIII, 196). Начальное базисное решение, точнее его часть, содержащая отличные от нуля компоненты, равные правым частям ограничений b_i (VIII, 195), располагается в соответствующих элементах $y_{m+2, n+i}$ векторов Y_{n+i}^* ($i = 1, \dots, m$).

Поскольку значения переменных, отвечающих небазисным векторам, в базисном решении равны нулю, элементы $y_{m+2, k}$ векторов Y_k ($k = 1, \dots, n$) всегда содержат нули и практически могут быть использованы в качестве рабочих ячеек памяти программы вычислений для записи промежуточных результатов расчета, например для записи маргинальных значений v_k , определяемых для небазисных векторов.

Вследствие того что матрица, обратная единичной, является также единичной, обратная матрица начального базиса на начальном этапе может считаться известной, а в массиве ячеек, отведенном для размещения обратной матрицы базиса $[\beta_{il}]$, записывается единичная матрица.

На этом размещение исходной информации заканчивается и начинается выполнение этапов алгоритма симплексного метода.

Этап 1. Вычисляется матрица коэффициентов разложения небазисных векторов $[x_{ik}]$ с применением программы умножения матриц:

$$[x_{ik}] = [\beta_{il}][Y_k] \quad (\text{VIII, 206})$$

Этап 2. Для каждого столбца матрицы $[x_{ik}]$ рассчитываются значения величин

$$z_k = \sum_{i=1}^m y_{m+1, n+i} x_{ik} \quad k = 1, \dots, n \quad (\text{VIII, 207})$$

и маргинальные значения

$$v_k = z_k - y_{m+1, k} \quad k = 1, \dots, n \quad (\text{VIII, 208})$$

которые записываются в ячейки $y_{m+2, k}$ ($k = 1, \dots, n$).

Этап 3. Проверяются условия окончательного решения. Если для всех рассчитанных маргинальных значений выполняется условие

$$v_k \geq 0 \quad k = 1, \dots, n \quad (\text{VIII, 209})$$

то максимальное значение критерия оптимальности достигнуто, и отличные от нуля элементы оптимального решения задачи записаны в ячейках $y_{m+2, n+i}$ ($i = 1, \dots, m$), которые и выводятся на печать совместно с содержимым ячеек $y_{m+3, n+i}$ ($i = 1, \dots, m$), где записаны соответствующие им индексы переменных.

Если хотя бы для некоторых v_h выполняется неравенство

$$v_k < 0 \quad (\text{VIII}, 210)$$

то возможно увеличение достигнутого значения критерия оптимальности, и расчет продолжается.

Этап 4. Для тех столбцов X_h матрицы коэффициентов разложения небазисных векторов $[x_{ih}]$, у которых соответствующие значения v_h удовлетворяют условию (VIII, 210), определяются величины θ_{hk} из соотношения:

$$\theta_{pk} = \min_{1 \leq i \leq m} \frac{y_{m+2, n+i}}{x_{ik}} = \frac{y_{m+2, n+p}}{x_{pk}} > 0 \quad (\text{VIII}, 211)$$

Если при этом для какого-либо столбца x_k найти значение θ_{pk} нельзя из-за того, что все элементы данного столбца отрицательны, максимальное значение критерия оптимальности (VIII, 194) не ограничено и может быть сделано сколь угодно большим. В этом случае решение задачи прекращается и соответствующая информация выдается на печать.

Этап 5. Находятся небазисный вектор $\tilde{Y}_h$ и базисный $\tilde{Y}_{n+p}$, которые следует поменять местами, чтобы при переходе к новому базисному решению получить максимальный прирост критерия оптимальности. Значения индексов пересылаемых обобщенных векторов при этом рассчитываются из условия

$$\max_{1 \leq k \leq n} \{\theta_{pk}(-v_k)\} = \theta_{pk}(-v_k) \quad (\text{VIII}, 212)$$

причем максимум ищется по тем значениям k , для которых выполняется условие (VIII, 210). Величина $\theta_{pk}(-v_k)$ определяет прирост критерия оптимальности (VIII, 194), достигаемый при включении небазисного вектора $\tilde{Y}_h$ в базис вместо вектора $\tilde{Y}_{n+p}$.

Иногда вместо условия (VIII, 212) используется критерий выбора пересылаемых векторов в следующем виде:

$$\max_{1 \leq k \leq n} (-v_k) = -v_k \quad (\text{VIII}, 212a)$$

Условие (VIII, 212a) позволяет выбрать небазисный вектор, включаемый в исходный базис, сразу после выполнения вычислений этапа 2 вместе с проверкой условий на этапе 3. Такой прием дает возможность несколько сократить объем вычислений за счет того, что в этом случае уже нет необходимости находить значения θ_{pk} для всех v_h , удовлетворяющих условию (VIII, 210), а определяется только одно значение из условия

$$\theta_{pk} = \min_{1 \leq i \leq m} \frac{y_{m+2, n+i}}{x_{ik}} = \frac{y_{m+2, n+p}}{x_{pk}} > 0 \quad (\text{VIII}, 213)$$

откуда находится индекс вектора $\tilde{Y}_{n+p}$ исходного базиса, который подлежит замене на небазисный вектор $\tilde{Y}_h$. При этом, естественно, объем вычислений несколько сокращается, однако оптимальное

решение может быть получено, вообще говоря, за большее число шагов симплексного метода, чем в рассматриваемом алгоритме.

Этап 6. Корректируются элементы базисного решения (соответствующие остающимся в новом базисе векторам исходного базиса) по формуле (VIII, 53а), которая в принятых обозначениях будет:

$$y'_{m+2, n+i} = y_{m+2, n+i} - \theta_{pk} x_{ik}, \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{VIII}, 214)$$

т. е. новые значения элементов базисного решения записываются на место прежних.

Этап 7. Производится обмен информацией между массивами базисных и небазисных векторов. Обобщенный вектор $\tilde{Y}_{n+p}$ пересылается на место обобщенного небазисного вектора $\tilde{Y}_h$ и наоборот. При этом элемент $y_{m+2, n+p}$ обобщенного вектора $\tilde{Y}_{n+p}$, выводимого из базиса, полагается равным нулю, что отвечает исключению данного вектора из числа базисных. Значение же элемента $y_{m+2, k}$ небазисного вектора $\tilde{Y}_h$ после пересылки его на место вектора $\tilde{Y}_h$ принимается равным величине θ_{pk} , что соответствует включению этого вектора в базис.

Этап 8. Вычисляются элементы обратной матрицы нового базиса с использованием формул (VIII, 185), имеющих в принятых обозначениях вид:

$$\left. \begin{aligned} \beta'_{il} &= \beta_{il} - \frac{x_{ik}}{x_{pk}} \beta_{pl} & i, l = 1, \dots, m & \quad i \neq p \\ \beta'_{pl} &= \frac{1}{x_{pk}} \beta_{pl} & l = 1, \dots, m \end{aligned} \right\} \quad (\text{VIII}, 215)$$

Применение формул (VIII, 215) требует наличия дополнительной памяти при вычислении обратной матрицы нового базиса. Однако их можно так преобразовать, чтобы вновь рассчитываемые элементы записывать сразу на место прежних. Поскольку каждый элемент обратной матрицы исходного базиса, за исключением элементов p -й строки, только один раз используется в процессе вычислений, поэтому можно следующим образом организовать расчет элементов обратной матрицы нового базиса.

Вначале вычисляются элементы строки с номером p по формулам

$$\beta'_{p, l} = \frac{1}{x_{pk}} \beta_{pl} \quad l = 1, \dots, m \quad (\text{VIII}, 216)$$

причем получаемые значения записываются сразу на место прежних.

Затем рассчитываются элементы остальных строк обратной матрицы нового базиса по формулам

$$\beta'_{il} = \beta_{il} - x_{ik} \cdot \beta'_{pl} \quad i \neq p \quad i, l = 1, \dots, m \quad (\text{VIII}, 217)$$

в которых применяются элементы уже рассчитанной p -й строки с записью результатов на прежнее место.

После окончания этого этапа вычислений производится переход к следующему шагу симплексного метода, т. е. расчет повторяется, начиная с этапа 1.

В рассмотренном алгоритме предполагалось, что матрица разложения небазисных векторов $[x_{ih}]$ по векторам исходного базиса вычисляется сразу и, следовательно, должна быть размещена в запоминающем устройстве вычислительной машины. Это требует дополнительно m^2 ячеек памяти, что представляет определенные неудобства при решении задач высокой размерности.

Однако можно избежать необходимости запоминания всей матрицы коэффициентов разложения небазисных векторов, если объединить выполнение этапов 2—5 циклической программы. Этот вариант требует для хранения коэффициентов разложения небазисных векторов только двух массивов (рабочего и эталонного) по m ячеек в каждом. Основная идея заключается в сравнении приращения критерия оптимальности только для двух небазисных векторов, в результате чего находится вектор, дающий наибольшее приращение, который размещается в эталонном массиве. В дальнейшем каждый следующий небазисный вектор сравнивается с эталонным, и если он дает большее приращение критерия оптимальности, то его коэффициенты разложения располагаются в эталонном массиве.

После просмотра всех небазисных векторов в эталонном массиве находятся коэффициенты разложения того небазисного вектора $\tilde{Y}_k$, включение которого в исходный базис обеспечивает наибольший прирост критерия оптимальности. Вектор $\tilde{Y}_{n+p}$, исключаемый из базиса, определяется при этом в процессе отыскания величин θ_{pk} для каждого небазисного вектора по формуле (VIII, 213).

Общий объем памяти, требуемый для размещения числовой информации при решении задачи линейного программирования с $n + m$ переменными и m ограничениями типа (VIII, 195), исключая память, необходимую для размещения программы вычислений, складывается из массивов: 1) для размещения матрицы обобщенных векторов $\tilde{Y}_s$: $(n + m)(m + 3)$ ячеек; 2) для размещения обратной матрицы исходного базиса: m^2 ячеек; 3) для размещения коэффициентов разложения небазисных векторов: $2m$ или m^2 ячеек, если матрица коэффициентов разложения небазисных векторов запоминается полностью.

Общее число ячеек памяти, используемых для хранения числовой информации решаемой задачи, таким образом, составляет

$$(n + m)(m + 3) + m^2 + 2m = n(m + 3) + 2m^2 + 5m \quad (\text{VIII, 218})$$

Полученная оценка памяти вычислительной машины (VIII, 218) должна приниматься во внимание при программировании рассмотренного алгоритма решения задач линейного программирования

на конкретной машине. Разумеется, что при этом нужно также учитывать объем памяти, занимаемой программой вычислений, который уже зависит от особенностей используемой машины и искусства программиста.

2. ВЫРОЖДЕННЫЕ ЗАДАЧИ

При выводе основных соотношений симплексного метода допускалось, что любые m векторов из общего числа $n + m + 1$ векторов A_j и B , составляющих матрицу ограничений, линейно независимы. При решении практических задач данное требование, как правило, обычно выполняется. Поэтому рассмотренный выше алгоритм симплексного метода служит основой подавляющего большинства программ, составленных для решения задач линейного программирования на вычислительных машинах.

Однако возможны случаи, когда сформулированное выше предположение и, следовательно, приведенный вывод основных соотношений симплексного метода не подтверждаются. Задачи, в которых имеется линейная зависимость менее чем $m + 1$ векторов-столбцов матрицы ограничений, называются *вырожденными задачами* линейного программирования. Теоретически при их решении симплексным методом может возникнуть «зацикливание», обусловленное тем, что значение линейной формы не изменяется при переходе к новому базисному решению.

Одним из таких примеров является случай, когда вектор B можно представить в виде линейной комбинации меньше чем m векторов-столбцов матрицы ограничений.

При этом в процессе решения задачи симплексным методом на некотором шаге может получиться базисное решение, содержащее менее чем m ненулевых составляющих, и среди величин, определяемых из условия (VIII, 213), могут оказаться равные нулю. Поэтому при переходе к новому базисному решению значение критерия оптимальности не изменяется, хотя соответствующее указанному переходу маргинальное значение и отличается от нуля.

Если теперь базисное решение вместо m отличных от нуля составляющих имеет только $m - 2$ или меньше составляющих, не равных нулю, то возникает возможность появления цикла, в котором не происходит увеличение критерия оптимальности.

Для устранения зацикливания в решении задачи симплексным методом в этом случае можно использовать специальный прием, заключающийся в некоторой достаточно малой деформации условий исходной задачи. Например, если в ограничивающих условиях данной задачи

$$\sum_{j=1}^{n+m} A_j x_j = B \quad (\text{VIII, 219})$$

вектор B заменить на вектор

$$B' = B + \sum_{k=1}^{n+m} \varepsilon^k A_k \quad \varepsilon \ll 1 \quad (\text{VIII, 220})$$

с учетом которого условия (VIII, 219) запишутся как

$$\sum_{j=1}^{n+m} A_j x_j = B + \sum_{k=1}^{n+m} \varepsilon^k A_k \quad (\text{VIII, 221})$$

то для задачи с условиями (VIII, 221) вырожденности может и не быть.

Более подробно случаи вырождения и приемы их устранения можно найти в литературе [1, 2].

3. ПРИНЦИП ДВОЙСТВЕННОСТИ В ЗАДАЧАХ ЛИНЕЙНОГО ПРОГРАММИРОВАНИЯ

При применении симплексного метода выбор небазисного вектора A_k матрицы ограничений, включение которого в базис приводит к увеличению значения критерия оптимальности, решается проверкой условия (VIII, 80):

$$c_k > z_k \quad (\text{VIII}, 222)$$

Здесь значение z_k определяется через коэффициенты разложения вектора A_k по базисным векторам A_j и коэффициенты линейной формы c_j , согласно формуле (VIII, 79). Иногда вместо проверки условий (VIII, 222) проверяются знаки маргинальных значений (VIII, 82):

$$v_k = z_k - c_k \quad (\text{VIII}, 223)$$

Если все v_k отрицательны, что соответствует выполнению условия (VIII, 222), то включение небазисного вектора A_k в исходный базис может вызвать увеличение критерия оптимальности. Если же все v_k , определенные для небазисных векторов, положительны, то дальнейшего увеличения критерия оптимальности не происходит.

Маргинальные значения v_k , описываемые соотношениями (VIII, 223), кроме этой чисто вспомогательной роли, представляют самостоятельный интерес в связи с так называемым *принципом двойственности* в задачах линейного программирования. Он заключается в следующем [2].

Для задачи, в которой требуется найти максимальное значение линейной формы

$$R = \sum_{j=1}^n c_j x_j \quad (\text{VIII}, 224)$$

при ограничениях на переменные x_j вида

$$\sum_{j=1}^n a_{ij} x_j \leq b_i \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{VIII}, 225)$$

существует двойственная задача, в которой нужно определить минимальное значение линейной формы

$$R^* = \sum_{i=1}^m b_i v_i \quad (\text{VIII}, 226)$$

при ограничениях на переменные v_i вида

$$\sum_{i=1}^m a_{ij} v_i \geq c_j \quad j = 1, \dots, n \quad (\text{VIII}, 227)$$

Если считать, что для двойственной задачи также находится максимальное значение линейной формы, то критерий R^* (VIII, 226) заменяется выражением

$$R_b = -R^* = -\sum_{i=1}^m b_i v_i \quad (\text{VIII, 228})$$

которое максимизируется при ограничениях (VIII, 227)

Общим для пары двойственных задач, определенных указанным выше образом, является то, что маргинальные значения v_k , полученные для оптимального решения первой задачи (VIII, 224) и (VIII, 225), являются оптимальным решением двойственной задачи (VIII, 226) и (VIII, 227). Наоборот, маргинальные значения двойственной задачи, найденные для ее оптимального решения, служат оптимальным решением исходной задачи.

Кроме того, получаемые при решении обеих задач значения критериев оптимальности R (VIII, 224) и R^* (VIII, 226) связаны между собой соотношением

$$\max R = \min R^* \quad (\text{VIII, 229})$$

или с учетом выражения (VIII, 228)

$$\max R = -\max R_b \quad (\text{VIII, 230})$$

Пример VIII-7. Для задачи максимизации критерия оптимальности, заданного в виде линейной формы

$$R = 3x_1 + 2x_2 \quad (\text{VIII, 231})$$

с ограничениями

$$\left. \begin{aligned} x_1 + 3x_2 &\leq 4 \\ x_1 &\leq 2 \\ x_2 &\leq 1 \end{aligned} \right\} \quad (\text{VIII, 232})$$

сформулировать двойственную задачу и найти их решение.

Решение. С учетом соотношений (VIII, 226)–(VIII, 228) двойственная задача формулируется как задача максимизации критерия оптимальности

$$R_b = -4v_1 - 2v_2 - v_3 \quad (\text{VIII, 231a})$$

при ограничениях

$$\left. \begin{aligned} v_1 + v_2 &\geq 3 \\ 3v_1 + v_3 &\geq 2 \end{aligned} \right\} \quad (\text{VIII, 232a})$$

Найдем решение исходной задачи. Введением дополнительных переменных x_3 , x_4 и x_5 система ограничений (VIII, 232) преобразуется в систему ограничений типа равенств

$$\left. \begin{aligned} x_1 + 3x_2 + x_3 &= 4 \\ x_1 &+ x_4 = 2 \\ x_2 &+ x_5 = 1 \end{aligned} \right\} \quad (\text{VIII, 233})$$

которой соответствуют следующие матрицы обобщенных базисных и небазисных векторов:

$$[\tilde{Y}_{n+i}] = \begin{bmatrix} \boxed{\begin{matrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}} \\ 0 & 0 & 0 \\ 4 & 2 & 1 \\ 3 & 4 & 5 \end{bmatrix} \quad (\text{VIII, 234})$$

$$[\tilde{Y}_k] = \begin{bmatrix} \boxed{\begin{matrix} 1 & 3 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{matrix}} \\ 3 & 2 \\ 0 & 0 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} \quad (\text{VIII, 235})$$

Пунктиром в выражениях (VIII, 234) и (VIII, 235) выделены матрицы векторов-столбцов ограничения (VIII, 233).

Обратная матрица начального базиса является единичной:

$$[\beta_{ik}] = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (\text{VIII, 236})$$

Определим разложение небазисных векторов Y_k :

$$[x_{ik}] = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} \\ x_{21} & x_{22} \\ x_{31} & x_{32} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 3 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 3 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (\text{VIII, 237})$$

Подсчитаем значения z_k , для чего следует умножить четвертую строку обобщенной матрицы базисных векторов (VIII, 234) на каждый вектор-столбец матрицы коэффициентов разложения (VIII, 237). В результате получим:

$$\left. \begin{aligned} z_1 &= 0 \cdot 1 + 0 \cdot 1 + 0 \cdot 0 = 0 \\ z_2 &= 0 \cdot 3 + 0 \cdot 0 + 0 \cdot 1 = 0 \end{aligned} \right\} \quad (\text{VIII, 238})$$

Маргинальные значения, вычисляемые на этом этапе, соответственно равны:

$$\left. \begin{aligned} v_1 &= z_1 - y_{41} = 0 - 3 = -3 \\ v_2 &= z_2 - y_{42} = 0 - 2 = -2 \end{aligned} \right\} \quad (\text{VIII, 239})$$

где величины $y_{m+1, k}$ берутся из четвертой строки обобщенной матрицы небазисных векторов (VIII, 235).

Найденные маргинальные значения отрицательны, следовательно, можно получить большее значение критерия оптимальности.

Определим значения θ_{pk} из условия (VIII, 211), для чего используем элементы пятой строки обобщенной матрицы базисных векторов (VIII, 234), где записано исходное базисное решение, и положительные элементы каждого из столбцов матрицы коэффициентов разложения небазисных векторов (VIII, 237).

В результате для первого столбца матрицы $[x_{ik}]$ имеем:

$$\theta_{21} = \frac{y_{5,n+2}}{x_{21}} = \frac{2}{1} = 2 \quad (\text{VIII, 240})$$

и для второго

$$\theta_{32} = \frac{x_{5,n+3}}{x_{32}} = \frac{1}{1} = 1 \quad (\text{VIII, 241})$$

Максимальный прирост критерия оптимальности в данном случае соответствует величине θ_{21} и определяется выражением:

$$\Delta R^{(1)} = \theta_{21} (-v_1) = 2 \cdot 3 = 6 \quad (\text{VIII, 242})$$

Следовательно

$$p = 2 \quad k = 1 \quad (\text{VIII, 243})$$

т. е. базисный вектор, находящийся во втором столбце обобщенной матрицы базисных векторов (VIII, 234), нужно заменить на небазисный вектор, расположенный в первом столбце матрицы (VIII, 235). При этом в соответствии с формулами (VIII, 214) необходимо скорректировать базисное решение, записанное в пятой строке обобщенной матрицы базисных векторов (VIII, 234):

$$\left. \begin{aligned} y'_{5,n+1} &= y_{5,n+1} - \theta_{21} \cdot x_{11} = 4 - 2 \cdot 1 = 6 \\ y'_{5,n+2} &= \theta_{21} = 2 \\ y'_{5,n+3} &= y_{5,n+3} - \theta_{21} x_{31} = 1 - 2 \cdot 0 = 1 \end{aligned} \right\} \quad (\text{VIII, 244})$$

В результате получим следующую обобщенную матрицу базисных векторов:

$$[\tilde{Y}_{n+1}] = \left[\begin{array}{ccc|ccc} 1 & 1 & 0 & 0 & 3 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 2 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 3 & 1 & 5 \end{array} \right] \quad (\text{VIII, 245})$$

и обобщенную матрицу небазисных векторов:

$$[\tilde{Y}_k] = \left[\begin{array}{ccc|cc} 0 & 3 & 1 & 0 & 2 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 4 & 2 \end{array} \right] \quad (\text{VIII, 246})$$

Обратная матрица нового базиса находится делением строки с номером $p = 2$ матрицы (VIII, 236) на коэффициент x_{21} разложения вектора Y_1 по векторам прежнего базиса и вычитанием этой строки, умноженной на соответствующие коэффициенты разложения x_{11} и x_{31} , из остальных строк матрицы (VIII, 236):

$$[\beta_{ik}] = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (\text{VIII, 247})$$

Теперь выполняется второй шаг симплексного метода, начинающийся с определения матрицы разложения небазисных векторов:

$$\begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} \\ x_{21} & x_{22} \\ x_{31} & x_{32} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 3 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 3 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (\text{VIII, 248})$$

Вычислим значения z_k умножением четвертой строки обобщенной матрицы базисных векторов (VIII, 245) на векторы-столбцы (VIII, 248)

$$\left. \begin{aligned} z_1 &= 0 \cdot (-1) + 3 \cdot 1 + 0 \cdot 0 = 3 \\ z_2 &= 0 \cdot 3 + 3 \cdot 0 + 0 \cdot 1 = 0 \end{aligned} \right\} \quad (\text{VIII, 249})$$

и рассчитаем маргинальные значения, воспользовавшись содержимым четвертой строки обобщенной матрицы небазисных векторов (VIII, 246):

$$\left. \begin{aligned} v_1 &= z_1 - y_{11} = 3 - 0 = 0 \\ v_2 &= z_2 - y_{12} = 0 - 2 = -2 \end{aligned} \right\} \quad (\text{VIII, 250})$$

Маргинальное значение v_2 отрицательно, следовательно, имеется возможность увеличить значение критерия оптимальности введением небазисного вектора $\tilde{Y}_2$ ($k=2$) в базис (VIII, 245). Исключаемый из базиса вектор определяется при нахождении величины θ_{pk} , которая в данном случае будет равна:

$$\theta_{12} = \frac{y_{5, n+1}}{x_{12}} = \frac{2}{3} \quad (\text{VIII, 251})$$

и $p=1$.

Таким образом из базиса (VIII, 245) следует вывести вектор $\tilde{Y}_{n+1}$ и вместо него ввести небазисный вектор $\tilde{Y}_2$. При этом критерий оптимальности получит приращение

$$\Delta R^{(2)} = \theta_{12} (-v_2) = \frac{2}{3} \cdot 2 = \frac{4}{3} \quad (\text{VIII, 252})$$

и его величина составит:

$$R^{(2)} = R^{(0)} + \Delta R^{(1)} + \Delta R^{(2)} = 0 + 6 + \frac{4}{3} = \frac{22}{3} \quad (\text{VIII, 253})$$

Новое базисное решение определится как

$$\left. \begin{aligned} y'_{5, n+1} &= \theta_{12} = \frac{2}{3} \\ y'_{5, n+2} &= y_{5, n+2} - \theta_{12} x_{22} = 2 - \frac{2}{3} \cdot 0 = 2 \\ y'_{5, n+3} &= y_{5, n+3} - \theta_{12} x_{32} = 1 - \frac{2}{3} \cdot 1 = \frac{1}{3} \end{aligned} \right\} \quad (\text{VIII, 254})$$

и обобщенные матрицы примут вид:
для базисных векторов

$$[\tilde{Y}_{n+1}] = \begin{bmatrix} \begin{array}{|c|c|c|} \hline 3 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ \hline \end{array} \\ 2 & 3 & 0 \\ \frac{2}{3} & 2 & \frac{1}{3} \\ 2 & 1 & 5 \end{bmatrix} \quad (\text{VIII, 255})$$

для небазисных векторов

$$[\tilde{Y}_k] = \begin{bmatrix} \boxed{\begin{matrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{matrix}} \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 4 & 3 \end{bmatrix} \quad (\text{VIII, 256})$$

Обратная матрица нового базиса, рассчитанная по приведенному выше правилу, представляется в виде:

$$[\beta_{ik}] = \begin{bmatrix} \frac{1}{3} & -\frac{1}{3} & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ -\frac{1}{3} & \frac{1}{3} & 1 \end{bmatrix} \quad (\text{VIII, 257})$$

Выполним еще один шаг симплексного метода. Коэффициенты разложения небазисных векторов определяются как

$$\begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} \\ x_{21} & x_{22} \\ x_{31} & x_{32} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{3} & -\frac{1}{3} & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ -\frac{1}{3} & \frac{1}{3} & 1 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{1}{3} & \frac{1}{3} \\ 1 & 0 \\ \frac{1}{3} & -\frac{1}{3} \end{bmatrix} \quad (\text{VIII, 258})$$

Величины z_k равны

$$\left. \begin{aligned} z_1 &= 2 \left(-\frac{1}{3} \right) + 3 \cdot 1 + 0 \cdot \frac{1}{3} = \frac{7}{3} \\ z_2 &= 2 \cdot \frac{1}{3} + 3 \cdot 0 + 0 \cdot \left(-\frac{1}{3} \right) = \frac{2}{3} \end{aligned} \right\} \quad (\text{VIII, 259})$$

и соответствующие им маргинальные значения будут:

$$\left. \begin{aligned} v_1 &= z_1 - y_{41} = \frac{7}{3} - 0 = \frac{7}{3} \\ v_2 &= z_2 - y_{42} = \frac{2}{3} - 0 = \frac{2}{3} \end{aligned} \right\} \quad (\text{VIII, 260})$$

Все полученные маргинальные значения положительны, и, следовательно, решение исходной задачи (VIII, 231) и (VIII, 232) найдено. Это решение содержится в пятой строке обобщенной матрицы базиса (VIII, 255) и с учетом значений индексов переменных j , записанных в последних строках матриц (VIII, 255) и (VIII, 256), может быть представлено как

$$\left. \begin{aligned} \lambda_1 &= 2 & \lambda_2 &= \frac{2}{3} & \lambda_3 &= 0 \\ \lambda_4 &= 0 & \lambda_5 &= \frac{1}{3} \end{aligned} \right\} \quad (\text{VIII, 261})$$

Маргинальные значения v_1 и v_2 (VIII, 260) отвечают переменным x_4 и x_3 [см. последнюю строку матрицы (VIII, 256)]. Маргинальные значения, соответствующие

щие ненулевым компонентам оптимального решения (VIII, 261), следует положить равными нулю, так как замена в базисе любого вектора самим собой, естественно, не приводит к изменению полученного критерия оптимальности, т. е. имеем:

$$\left. \begin{array}{lll} v_1 = 0 & v_2 = 0 & v_3 = \frac{2}{3} \\ v_4 = \frac{7}{3} & v_5 = 0 & \end{array} \right\} \quad (\text{VIII, 262})$$

Найдем теперь решение двойственной задачи (VIII, 231a) и (VIII, 232a). Для записи ограничений (VIII, 232a) в форме равенств введем дополнительные переменные v_4 и v_5 :

$$\left. \begin{array}{llll} v_1 + v_2 & & - v_4 & = 3 \\ 3v_1 & + v_3 & & - v_5 = 2 \end{array} \right\} \quad (\text{VIII, 263})$$

Для получения начального базисного решения в матрице ограничений (VIII, 263) можно использовать единичную подматрицу, образованную переменными v_2 и v_3 , которая и определяет исходный базис:

$$[\tilde{Y}_{n+i}] = \begin{bmatrix} \boxed{\begin{array}{cc} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{array}} \\ -2 & -1 \\ 3 & 2 \\ 2 & 3 \end{bmatrix} \quad (\text{VIII, 264})$$

Обобщенная матрица небазисных векторов при этом записывается в виде:

$$[\tilde{Y}_k] = \begin{bmatrix} \boxed{\begin{array}{ccc} 1 & -1 & 0 \\ 3 & 0 & -1 \end{array}} \\ -4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 4 & 5 \end{bmatrix} \quad (\text{VIII, 265})$$

Обратная матрица исходного базиса — единичная:

$$[\beta_{ik}] = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (\text{VIII, 266})$$

Определяем коэффициенты разложения небазисных векторов:

$$\begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & x_{13} \\ x_{21} & x_{22} & x_{23} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 3 & 0 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 3 & 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (\text{VIII, 267})$$

Величины z находим в результате умножения третьей строки обобщенной матрицы базисных векторов (VIII, 264) на векторы-столбцы матрицы (VIII, 267):

$$\left. \begin{array}{l} z_1 = (-2) \cdot 1 + (-1) \cdot 3 = -5 \\ z_2 = (-2) \cdot (-1) + (-1) \cdot 0 = 2 \\ z_3 = (-2) \cdot 0 + (-1) \cdot (-1) = 1 \end{array} \right\} \quad (\text{VIII, 268})$$

Соответствующие маргинальные значения, которые для двойственной задачи обозначим через λ_b , будут:

$$\left. \begin{aligned} \lambda_{b1} &= z_1 - y_{31} = (-5) - (-4) = -1 \\ \lambda_{b2} &= z_2 - k_{32} = 2 - 0 = 2 \\ \lambda_{b3} &= z_3 - y_{33} = 1 - 0 = 1 \end{aligned} \right\} \quad (\text{VIII, 269})$$

Поскольку лишь одно маргинальное значение λ_{b1} отрицательно ($k = 1$), только один из небазисных векторов можно ввести в исходный базис (VIII, 264), чтобы произошло увеличение критерия оптимальности двойственной задачи (VIII, 232a), значение которого для начального базисного решения, как нетрудно видеть, составляет:

$$R_b^{(0)} = -4 \cdot 0 - 2 \cdot 3 - 1 \cdot 2 = -8 \quad (\text{VIII, 270})$$

Вычисляя отношения элементов четвертой строки обобщенной матрицы базиса (VIII, 264), где записано начальное базисное решение, к соответствующим элементам первого столбца матрицы (VII, 267), где записаны коэффициенты разложения небазисного вектора (маргинальное значение которого отрицательно), и находя минимальное значение среди этих отношений, получим:

$$\theta_{21} = \frac{y_{i, n+2}}{x_{21}} = \frac{2}{3} \quad (\text{VIII, 271})$$

Следовательно, $p = 2$, т. е. исключению из исходного базиса подлежит вектор, расположенный во втором столбце матрицы (VIII, 264).

Прирост критерия оптимальности равен

$$\Delta R_b^{(1)} = \theta_{21} (-\lambda_{b1}) = \frac{2}{3} \cdot 1 = \frac{2}{3} \quad (\text{VIII, 272})$$

а его значение:

$$R_b^{(1)} = R_b^{(0)} + \Delta R_b^{(1)} = -8 + \frac{2}{3} = -\frac{22}{3} \quad (\text{VIII, 273})$$

Новое базисное решение определяется как

$$\left. \begin{aligned} y'_{3, n+1} &= y_{3, n+1} - \theta_{21} x_{11} = 3 - \frac{2}{3} \cdot 1 = \frac{7}{3} \\ y'_{3, n+2} &= \theta_{21} = \frac{2}{3} \end{aligned} \right\} \quad (\text{VIII, 274})$$

Обобщенная матрица базисных векторов записывается в виде

$$[\tilde{Y}_{n+1}] = \begin{bmatrix} \boxed{\begin{matrix} 1 & 1 \\ 0 & 3 \end{matrix}} \\ -2 & -4 \\ 7 & 2 \\ 3 & 3 \\ -2 & 1 \end{bmatrix} \quad (\text{VIII, 275})$$

а обобщенная матрица небазисных векторов

$$[\tilde{Y}_k] = \begin{bmatrix} \boxed{\begin{matrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \end{matrix}} \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 3 & 4 & 5 \end{bmatrix} \quad (\text{VIII, 276})$$

Вычисление обратной матрицы для базисных векторов дает:

$$[\beta_{ik}] = \begin{bmatrix} 1 & -\frac{1}{3} \\ 0 & \frac{1}{3} \end{bmatrix} \quad (\text{VIII, 277})$$

Выполним еще один шаг симплексного метода. Коэффициенты разложения небазисных векторов равны:

$$\begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & x_{13} \\ x_{21} & x_{22} & x_{23} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & -\frac{1}{3} \\ 0 & \frac{1}{3} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{1}{3} & -1 & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{3} & 0 & -\frac{1}{3} \end{bmatrix} \quad (\text{VIII, 278})$$

В результате расчета значений z_k получим:

$$\left. \begin{aligned} z_1 &= (-2) \left(-\frac{1}{3} \right) + (-4) \cdot \frac{1}{3} = -\frac{2}{3} \\ z_2 &= (-2) (-1) + (-4) \cdot 0 = +2 \\ z_3 &= (-2) \frac{1}{3} + (-4) \left(-\frac{1}{3} \right) = \frac{2}{3} \end{aligned} \right\} \quad (\text{VIII, 279})$$

Тогда соответствующие маргинальные значения будут:

$$\left. \begin{aligned} \lambda_{b1} &= z_1 - y_{31} = -\frac{2}{3} - (-1) = \frac{1}{3} \\ \lambda_{b2} &= z_2 - y_{32} = 2 - 0 = 2 \\ \lambda_{b3} &= z_3 - y_{33} = \frac{2}{3} - 0 = \frac{2}{3} \end{aligned} \right\} \quad (\text{VIII, 280})$$

Все найденные маргинальные значения положительны, следовательно, максимальное значение критерия оптимальности (VIII, 231а), определяемое выражением (VIII, 273), достигнуто. Восстанавливая с помощью последних строк обобщенных матриц (VIII, 275) и (VIII, 276) индексацию переменных, можно окончательно записать решение двойственной задачи

$$\left. \begin{aligned} v_{b1} &= \frac{2}{3} & v_{b2} &= \frac{7}{3} & v_{b3} &= 0 \\ v_{b4} &= 0 & v_{b5} &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (\text{VIII, 281})$$

и его маргинальные значения

$$\left. \begin{aligned} \lambda_{b1} &= 0 & \lambda_{b2} &= 0 & \lambda_{b3} &= \frac{1}{3} \\ \lambda_{b4} &= 2 & \lambda_{b5} &= \frac{2}{3} \end{aligned} \right\} \quad (\text{VIII, 282})$$

Сопоставление выражений (VIII, 261) и (VIII, 262) с выражениями (VIII, 282) и (VIII, 281) показывает, что при решении обеих задач получены одинаковые наборы значений λ_j, v_j . Отличается лишь их индексация. Сравнение же найденных значений критериев оптимальности в исходной (VIII, 253) и двойственной (VIII, 273) задачах свидетельствует о том, что выполнено условие (VIII, 230).

Таким образом, результаты, полученные при решении указанных задач, оказываются идентичными, если принять во внимание соответствие между независимыми переменными одной задачи и маргинальными значениями другой. Однако необходимый объем вычислений при решении двойственной задачи в примере VIII-7 оказался меньше. Так, для решения исходной задачи потребовалось два шага симплексного метода, тогда как для решения двойственной задачи — всего один шаг. Кроме того, если при решении исходной задачи пришлось оперировать с обратными матрицами базиса третьего порядка, то при решении двойственной задачи обратные матрицы базиса имели порядок, равный двум.

Эти обстоятельства иногда позволяют использовать принцип двойственности в задачах линейного программирования для сокращения объема вычислений в процессе решения задачи и экономии необходимого объема запоминающих устройств вычислительной машины. Поскольку результаты решения исходной и двойственной задач совпадают, можно так выбрать представление решаемой задачи, чтобы обеспечить выполнение матричных операций с матрицами меньшего порядка. При этом руководствуются правилом: если число независимых переменных n в исходной задаче меньше числа ограничений m , то имеет смысл решать двойственную задачу, поскольку вместо операций с матрицами порядка m будут производиться операции с матрицами порядка n (согласно числу ограничений двойственной задачи).

Остается установить соответствие между переменными исходной задачи и двойственной, чтобы иметь возможность интерпретировать получаемые результаты независимо от того, в результате решения какой задачи они получены.

Рассмотрим это соответствие в терминах исходной задачи, предполагая, что основные переменные имеют индексацию от 1 до n , а дополнительные — от $n + 1$ до $n + m$. Тогда маргинальные значения исходной задачи с индексацией от $n + 1$ до $n + m$ будут соответствовать основным переменным двойственной задачи, имеющим индексацию от 1 до m , а маргинальные значения с индексацией от 1 до n — дополнительным переменным двойственной задачи с индексацией от $m + 1$ до $m + n$.

Для перехода к индексации исходной постановки задачи от решения двойственной воспользуемся правилом: для основных переменных двойственной задачи, имеющих первоначальную индексацию от 1 до m , к индексу следует прибавить значение n ; для дополнительных переменных двойственной задачи v_i ($i = m + 1, \dots, m + n$) вместо индекса i нужно применять индекс $i - m$.

С учетом изложенного правила решение двойственной задачи (VIII, 281) и (VIII, 282) может быть представлено без изменения порядка записи значений v_{bi} и λ_{bi} как $n = 2, m = 3$):

$$\left. \begin{array}{llll} v_{b3} = \frac{2}{3} & v_{b1} = 0 & \lambda_{b3} = 0 & \lambda_{b1} = 2 \\ v_{b4} = \frac{7}{3} & v_{b2} = 0 & \lambda_{b4} = 0 & \lambda_{b2} = \frac{2}{3} \\ v_{b5} = 0 & & \lambda_{b5} = \frac{1}{3} & \end{array} \right\} \quad (\text{VIII, 283})$$

Располагая значения величин в соответствии с их новыми индексами, находим:

$$\left. \begin{array}{llll} v_{b1} = 0 & v_{b4} = \frac{7}{3} & \lambda_{b1} = 2 & \lambda_{b4} = 0 \\ v_{b2} = 0 & v_{b5} = 0 & \lambda_{b2} = \frac{2}{3} & \lambda_{b5} = \frac{1}{3} \\ v_{b3} = \frac{2}{3} & & \lambda_{b3} = 0 & \end{array} \right\} \quad (\text{VIII, 284})$$

После выполнения переиндексации решение двойственной задачи (VIII, 284) приобретает тот же вид, что и решение исходной задачи (VIII, 261) и (VIII, 262).

Следует еще отметить, что двойственная задача имеет определенный физический смысл, соответствующий постановке исходной задачи. Подробнее об этом сказано ниже при рассмотрении конкретного химического производства.

4. ОПТИМАЛЬНАЯ ОРГАНИЗАЦИЯ ПРОИЗВОДСТВА ПРОДУКЦИИ ПРИ ОГРАНИЧЕННЫХ ЗАПАСАХ СЫРЬЯ

В практике производств встречаются случаи, когда при получении исходное сырье используется не полностью, а остается в отходах, откуда его можно затем выделить и снова направить в производство. Кроме того, в процессе получения определенного целевого продукта могут образовываться побочные продукты, представляющие самостоятельную ценность или же применяемые как сырье в других процессах. Все это приводит к необходимости совместного изучения ряда процессов, для чего могут быть использованы методы линейного программирования.

В качестве примера опишем производство, состоящее из нескольких процессов, в котором применяется несколько видов сырья для получения ряда продуктов. Предположим, что в это производство входят три процесса (табл. 12), для двух из которых основными являются два вида сырья A и B . В первом процессе наряду с основным продуктом образуется побочный продукт C , используемый во втором процессе. Кроме того, в первом процессе применяется некоторое количество отходов D второго процесса, которые служат к тому же исходным сырьем третьего процесса, выполняю-

шего роль процесса регенерации или выделения сырьевых продуктов A , B и C из отходов D .

В табл. 12 приведены количества различных видов сырья, требуемые для получения единицы основной продукции каждого из процессов.

Отрицательные коэффициенты в строках таблицы указывают на то, что этот вид сырья — побочный продукт в данном процессе. В нижней строке табл. 12 приведены запасы сырья в момент планирования производства.

ТАБЛИЦА 12

Потребность в сырье для получения каждого вида продукции

Вид продукции	Вид сырья, потребность, усл. ед.			
	A	B	C	D
I	2	1	-1	4
II	2	4	2	-1
III	-1	-1	-1	1
	Запасы			
	8	4	1	8

Предположим, что задачей планирования является выбор такого режима работы отдельных процессов, при котором обеспечивается максимальная прибыль от реализации готовой продукции, получаемой при переработке имеющихся запасов сырья. При этом основная продукция каждого процесса имеет определенную стоимость (табл. 13).

ТАБЛИЦА 13

Стоимость различных видов продукции

Вид продукции	Стоимость, усл. ед.
I	7
II	3
III	2

С учетом табл. 13 критерием оптимальности всего производства будет линейная форма

$$R = 7x_1 + 3x_2 + 2x_3 \quad (\text{VIII}, 285)$$

максимальное значение которой находится выбором объемов выработки каждого вида продукции (x_1 , x_2 и x_3).

Затраты каждого из видов сырья на получение продукции различных видов определяют ограничения на объемы производств x_1 , x_2 и x_3 . Эти ограничения с учетом расходных коэффициентов каждого вида сырья, представленных в табл. 12, записываются в форме неравенств:

$$\left. \begin{aligned} 2x_1 + 2x_2 - x_3 &\leq 8 \\ x_1 + 4x_2 - x_3 &\leq 4 \\ -x_1 + 2x_2 - x_3 &\leq 1 \\ 4x_1 - x_2 + x_3 &\leq 8 \end{aligned} \right\} \quad (\text{VIII}, 286)$$

Рассмотрим теперь двойственную задачу, для которой критерий оптимальности, минимизируемый в процессе решения, представляется как

$$R^* = 8v_1 + 4v_2 + x_3 + 8v_4 \quad (\text{VIII}, 287)$$

Ограничения для переменных двойственной задачи v_i запишутся следующим образом:

$$\left. \begin{aligned} 2v_1 + v_2 - v_3 + 4v_4 &\geq 7 \\ 2v_1 + 4v_2 + 2v_3 - v_4 &\geq 3 \\ -v_1 - v_2 - v_3 + v_4 &\geq 2 \end{aligned} \right\} \quad (\text{VIII}, 288)$$

Поясним физическую сущность двойственной задачи. Поскольку размерность правых частей ограничений (VIII, 288) имеет смысл стоимости единицы продукции, очевидно, что размерность переменных v_i двойственной задачи также должна представлять собой стоимость и может рассматриваться как стоимость каждого вида сырья. При этом левые части неравенства (VIII, 288) характеризуют суммарные затраты на различные виды сырья при производстве единицы каждого продукта.

С учетом того, что критерий оптимальности двойственной задачи (VIII, 287) в данном случае определяет общую стоимость запасов сырья, цены которых являются независимыми переменными двойственной задачи, для нее может быть принята следующая формулировка.

Каким образом следует назначить цену единицы каждого из видов сырья v_i , чтобы при заданных его запасах b_i , оценивающих коэффициентами критерия оптимальности (VIII, 287), и заданных величинах стоимости продуктов производства c_j , определяющих правые части неравенств (VIII, 288), минимизировать общую стоимость запасов сырья, выражаемую критерием (VIII, 287)?

Соотношение (VIII, 229), описывающее связь между максимальным значением критерия оптимальности исходной задачи и минимальным значением критерия двойственной, в этом случае означает, что при оптимальном плане производства, т. е. оптимальных значениях x_i , и при оптимальных ценах на сырье, т. е. оптимальных значениях v_i , максимальная прибыль от реализации продукции равна стоимости сырья, имеющегося в наличии к моменту начала выпуска продукции.

Рассмотрим решение исходной задачи, для чего введением дополнительных переменных представим ограничения (VIII, 286) в форме равенств:

$$\left. \begin{aligned} 2x_1 + 2x_2 - x_3 + x_4 &= 8 \\ x_1 + 4x_2 - x_3 &+ x_5 = 4 \\ -x_1 + 2x_2 - x_3 &+ x_6 = 1 \\ 4x_1 - x_2 + x_3 &+ x_7 = 8 \end{aligned} \right\} \quad (\text{VIII}, 289)$$

Дополнительные переменные в системе ограничений (VIII, 289) образуют единичную подматрицу, которая может использоваться в качестве начального базиса.

Таким образом, можно записать следующие обобщенные матрицы для базисных и небазисных векторов матрицы ограничений (VIII, 289):

$$[\tilde{Y}_{n+i}] = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 8 & 4 & 1 & 8 \\ 4 & 5 & 6 & 7 \end{bmatrix} \quad (\text{VIII, 290})$$

$$[\tilde{Y}_k] = \begin{bmatrix} 2 & 2 & -1 \\ 1 & 4 & -1 \\ -1 & 2 & -1 \\ 4 & -1 & 1 \\ 7 & 3 & 2 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 3 \end{bmatrix} \quad (\text{VIII, 291})$$

а также обратную матрицу начального базиса:

$$[\beta_{ik}] = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (\text{VIII, 292})$$

Теперь воспользуемся алгоритмом симплексного метода для отыскания оптимального плана производства.

Этап 1,1. Определяются коэффициенты разложения небазисных векторов умножением обратной матрицы базиса (VIII, 292) на матрицу небазисных векторов:

$$\begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & x_{13} \\ x_{21} & x_{22} & x_{23} \\ x_{31} & x_{32} & x_{33} \\ x_{41} & x_{42} & x_{43} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 2 & -1 \\ 1 & 4 & -1 \\ -1 & 2 & -1 \\ 4 & -1 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 2 & -1 \\ 1 & 4 & -1 \\ -1 & 2 & -1 \\ 4 & -1 & 1 \end{bmatrix} \quad (\text{VIII, 293})$$

Этап 2,1. Рассчитываются значения z_k , которые находятся как результат умножения пятой строки обобщенной матрицы базисных векторов (VIII, 290) на каждый столбец матрицы (VIII, 293):

$$\left. \begin{aligned} z_1 &= 0 \cdot 2 + 0 \cdot 1 + 0 \cdot (-1) + 0 \cdot 4 = 0 \\ z_2 &= 0 \cdot 2 + 0 \cdot 4 + 0 \cdot 2 + 0 \cdot (-1) = 0 \\ z_3 &= 0 \cdot (-1) + 0 \cdot (-1) + 0 \cdot (-1) + 0 \cdot 1 = 0 \end{aligned} \right\} \quad (\text{VIII, 294})$$

Этап 3,1. Вычисляются маргинальные значения:

$$\left. \begin{aligned} v_1 &= z_1 - y_{51} = 0 - 7 = -7 \\ v_2 &= z_2 - y_{52} = 0 - 3 = -3 \\ v_3 &= z_3 - y_{53} = 0 - 2 = -2 \end{aligned} \right\} \quad (\text{VIII, 295})$$

Все маргинальные значения (VIII, 295) отрицательны, и, следовательно, возможно увеличение критерия оптимальности при переходе к новому базису.

Этап 4,1. Находятся величины θ_{pk} для каждого небазисного вектора:

$$\left. \begin{aligned} \theta_{p1} &= \min_{i=1, 2, 4} \frac{y_{6, n+i}}{x_{i1}} = \frac{y_{6, n+4}}{x_{41}} = \theta_{41} = 2 \\ \theta_{p2} &= \min_{i=1, 2, 3} \frac{y_{6, n+i}}{x_{i2}} = \frac{y_{6, n+3}}{x_{32}} = \theta_{32} = \frac{1}{2} \\ \theta_{p3} &= \frac{y_{6, n+4}}{x_{43}} = \theta_{43} = 8 \end{aligned} \right\} \quad (\text{VIII, 296})$$

Этап 5,1. Вычисляются возможные приращения критерия оптимальности при включении в базис различных небазисных векторов:

$$\left. \begin{aligned} \Delta R_1^{(1)} &= \theta_{41} (-v_1) = 2 \cdot 7 = 14 \\ \Delta R_2^{(1)} &= \theta_{32} (-v_2) = \frac{1}{2} \cdot 3 = \frac{3}{2} \\ \Delta R_3^{(1)} &= \theta_{43} (-v_3) = 8 \cdot 2 = 16 \end{aligned} \right\} \quad (\text{VIII, 297})$$

Из выражений (VIII, 297) следует, что максимальное увеличение критерия оптимальности в результате выполнения первого шага

$$\Delta R^{(1)} = 16 \quad (\text{VIII, 298})$$

достигается при исключении базисного вектора $\tilde{Y}_{n+4}$ ($p = 4$) и замене его небазисным вектором $\tilde{Y}_3$ ($k = 3$). При этом:

$$\theta^{(1)} = \theta_{43} = 8 \quad (\text{VIII, 299})$$

Этап 6,1. Определяется новое базисное решение:

$$\left. \begin{aligned} y'_{6, n+1} &= y_{6, n+1} = \theta^{(1)} x_{13} = 8 - 8 \cdot (-1) = 16 \\ y'_{6, n+2} &= y_{6, n+2} - \theta^{(1)} x_{23} = 4 - 8 \cdot (-1) = 12 \\ y'_{6, n+3} &= y_{6, n+3} - \theta^{(1)} x_{33} = 1 - 8 \cdot (-1) = 9 \\ y'_{6, n+4} &= \theta^{(1)} = 8 \end{aligned} \right\} \quad (\text{VIII, 300})$$

Этап 7,1. Формируются обобщенные матрицы базисных и небазисных векторов:

$$[\tilde{Y}_{n+i}] = \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \\ 0 & 0 & 0 & 2 \\ 16 & 12 & 9 & 8 \\ 4 & 5 & 6 & 3 \end{bmatrix} \quad (\text{VIII, 301})$$

$$[\tilde{Y}_k] = \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 2 & 0 \\ 1 & 4 & 0 \\ -1 & 2 & 0 \\ 4 & -1 & 1 \end{bmatrix} \\ 7 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 7 \end{bmatrix} \quad (\text{VIII, 302})$$

Этап 8,1. Определяется обратная матрица нового базиса, для чего элементы p -й строки обратной матрицы исходного базиса (VIII, 292) делятся на элементы $x_{pk} = x_{43} = 1$ матрицы (VIII, 293), соответствующей вводимому в базис вектору. Затем эта строка вычитается из остальных строк матрицы исходного базиса (VIII, 292) после умножения на остальные коэффициенты разложения вектора, вводимого в базис. В результате находим:

$$[\beta_{ik}] = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{bmatrix} \quad (\text{VIII, 303})$$

На этом первый шаг симплексного метода заканчивается и начинается следующий.

Этап 1,2. Определяется разложение небазисных векторов:

$$\begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & x_{13} \\ x_{21} & x_{22} & x_{23} \\ x_{31} & x_{32} & x_{33} \\ x_{41} & x_{42} & x_{43} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 2 & 0 \\ 1 & 4 & 0 \\ -1 & 2 & 0 \\ 4 & -1 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6 & 1 & 1 \\ 5 & 3 & 1 \\ 3 & 1 & 1 \\ 4 & -1 & 1 \end{bmatrix} \quad (\text{VIII, 304})$$

Этап 2,2. Рассчитываются значения z_h :

$$\left. \begin{aligned} z_1 &= 0.6 + 0.5 + 0.3 + 2.4 = 8 \\ z_2 &= 0.1 + 0.3 + 0.1 + 2 \cdot (-1) = -2 \\ z_3 &= 0.1 + 0.1 + 0.1 + 2.1 = 2 \end{aligned} \right\} \quad (\text{VIII, 305})$$

Этап 3,2. Вычисляются маргинальные значения:

$$\left. \begin{aligned} v_1 &= z_1 - y_{51} = 8 - 7 = 1 \\ v_2 &= z_2 - y_{52} = -2 - 3 = -5 \\ v_3 &= z_3 - y_{53} = 2 - 0 = 2 \end{aligned} \right\} \quad (\text{VIII}, 306)$$

Этап 4,2. Поскольку среди маргинальных значений (VIII, 306) только одно отрицательное, тем самым однозначно определяется небазисный вектор $\tilde{Y}_k$ ($k=2$), который следует ввести в базис. Для нахождения исключаемого базисного вектора рассчитывается величина θ_{pk} :

$$\theta^{(2)} = \theta_{pk} = \min_{i=1, 2, 3} \frac{y_{6, n+i}}{x_{i2}} = \frac{y_{6, n+2}}{x_{22}} = 4 \quad (\text{VIII}, 307)$$

Этап 5,2. Вычисляется возможное приращение критерия оптимальности:

$$\Delta R^{(2)} = \theta_{22} (-v_2) = 4 \cdot 5 = 20 \quad (\text{VIII}, 308)$$

Этап 6,2. Определяется новое базисное решение:

$$\left. \begin{aligned} y'_{6, n+1} &= y_{6, n+1} - \theta^{(2)} x_{12} = 16 - 4 \cdot 1 = 12 \\ y'_{6, n+2} &= \theta^{(2)} \\ y'_{6, n+3} &= y_{6, n+3} - \theta^{(2)} x_{32} = 9 - 4 \cdot 1 = 5 \\ y'_{6, n+4} &= y_{6, n+4} - \theta^{(2)} x_{42} = 8 - 4 \cdot (-1) = 12 \end{aligned} \right\} \quad (\text{VIII}, 309)$$

Этап 7,2. Формируются обобщенные матрицы базисных и небазисных векторов:

$$[\tilde{Y}_{n+i}] = \begin{bmatrix} \boxed{\begin{matrix} 1 & 2 & 0 & -1 \\ 0 & 4 & 0 & -1 \\ 0 & 2 & 1 & -1 \\ 0 & -1 & 0 & 1 \end{matrix}} \\ 0 & 3 & 0 & 2 \\ 12 & 4 & 5 & 12 \\ 4 & 2 & 6 & 3 \end{bmatrix} \quad (\text{VIII}, 310)$$

$$[\tilde{Y}_k] = \begin{bmatrix} \boxed{\begin{matrix} 2 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 4 & 0 & 1 \end{matrix}} \\ 7 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 5 & 7 \end{bmatrix} \quad (\text{VIII}, 311)$$

Этап 8,2. Рассчитывается обратная матрица нового базиса:

$$[\beta_{ik}] = \begin{bmatrix} 1 & -\frac{1}{3} & 0 & \frac{2}{3} \\ 0 & \frac{1}{3} & 0 & \frac{1}{3} \\ 0 & -\frac{1}{3} & 1 & \frac{2}{3} \\ 0 & \frac{1}{3} & 0 & \frac{4}{3} \end{bmatrix} \quad (\text{VIII, 312})$$

Переходим к третьему шагу симплексного метода.

Этап 1,3. Определяются коэффициенты разложения небазисных векторов:

$$\begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & x_{13} \\ x_{21} & x_{22} & x_{23} \\ x_{31} & x_{32} & x_{33} \\ x_{41} & x_{42} & x_{43} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & -\frac{1}{3} & 0 & \frac{2}{3} \\ 0 & \frac{1}{3} & 0 & \frac{1}{3} \\ 0 & -\frac{1}{3} & 1 & \frac{2}{3} \\ 0 & \frac{1}{3} & 0 & \frac{4}{3} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 4 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{13}{3} & -\frac{11}{3} & \frac{2}{3} \\ \frac{5}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \\ \frac{4}{3} & -\frac{1}{3} & \frac{2}{3} \\ \frac{17}{3} & \frac{1}{3} & \frac{4}{3} \end{bmatrix} \quad (\text{VIII, 313})$$

Этап 2,3. Вычисляются значения z_k :

$$\left. \begin{aligned} z_1 &= 0 \cdot \frac{13}{3} + 3 \cdot \frac{5}{3} + 0 \cdot \frac{4}{3} + 2 \cdot \frac{17}{3} = \frac{47}{3} \\ z_2 &= 0 \cdot \left(-\frac{11}{3}\right) + 3 \cdot \frac{1}{3} + 0 \cdot \left(-\frac{1}{3}\right) + 2 \cdot \frac{1}{3} = \frac{5}{3} \\ z_3 &= 0 \cdot \frac{2}{3} + 3 \cdot \frac{1}{3} + 0 \cdot \frac{2}{3} + 2 \cdot \frac{4}{3} = \frac{11}{3} \end{aligned} \right\} \quad (\text{VIII, 314})$$

Этап 3,3. Определяются маргинальные значения:

$$\left. \begin{aligned} v_1 &= z_1 - y_{51} = \frac{47}{3} - 7 = \frac{26}{3} \\ v_2 &= z_2 - y_{52} = \frac{5}{3} - 0 = \frac{5}{3} \\ v_3 &= z_3 - y_{53} = \frac{11}{3} - 0 = \frac{11}{3} \end{aligned} \right\} \quad (\text{VIII, 315})$$

Поскольку все найденные маргинальные значения (VIII, 315) положительны, дальнейшего увеличения критерия оптимальности не произойдет. Оптимальное решение находится в шестой строке матрицы обобщенных базисных векторов (VIII, 310). Принимая во внимание содержимое последних строк обобщенных матриц (VIII, 310) и (VIII, 311), можно записать оптимальное решение

$$\left. \begin{aligned} \lambda_1 &= 0 & \lambda_2 &= 4 & \lambda_3 &= 12 & \lambda_4 &= 12 \\ \lambda_5 &= 0 & \lambda_6 &= 5 & \lambda_7 &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (\text{VIII, 316})$$

и соответствующие маргинальные значения исходной задачи:

$$\left. \begin{array}{llll} v_1 = \frac{26}{3} & v_2 = 0 & v_3 = 0 & v_4 = 0 \\ v_5 = \frac{5}{3} & v_6 = 0 & v_7 = \frac{11}{3} & \end{array} \right\} \quad (\text{VIII}, 317)$$

Значения λ_j ($j = 1, 2, 3$) в соотношениях (VIII, 316) определяют оптимальный план производства, при использовании которого достигается максимальное значение критерия оптимальности:

$$R = 7 \cdot 0 + 3 \cdot 4 + 2 \cdot 12 = 36 \quad (\text{VIII}, 318)$$

Найденный план означает, что для наиболее выгодной реализации наличных запасов сырья следует использовать только второй и третий процессы, несмотря на то, что продукция первого процесса имеет наивысшую стоимость ($c_1 = 7$).

Значения дополнительных переменных λ_j ($j = 4, 5, 6, 7$) в оптимальном плане (VIII, 316) определяют остающиеся количества сырья после того, как производство прекращается из-за недостатка какого-либо вида сырья. В рассмотренном случае имеется остаток основного сырья A в количестве 12 единиц, т. е. его количество увеличивается по сравнению с исходными запасами вследствие проведения третьего процесса. Аналогично увеличивается и количество сырья C . Израсходованными в процессе производства оказываются только запасы двух видов сырья (B и D), что в данном случае и ограничивает максимально достижимую прибыль от реализации получаемой продукции.

Маргинальные значения исходной задачи (VIII, 317) позволяют записать решение двойственной задачи (см. стр. 465):

$$\left. \begin{array}{llll} v_{b1} = 0 & v_{b2} = \frac{5}{3} & v_{b3} = 0 & v_{b4} = \frac{11}{3} \\ v_{b5} = \frac{26}{3} & v_{b6} = 0 & v_{b7} = 0 & \end{array} \right\} \quad (\text{VIII}, 319)$$

Непосредственной проверкой можно убедиться, что минимальное значение критерия оптимальности двойственной задачи (VIII, 287), определяемое с учетом ее решения (VIII, 319), в точности равно максимальному значению критерия оптимальности исходной задачи (VIII, 318).

Интересно отметить, что в решении двойственной задачи цены сырья видов A и C (значения v_{b1} и v_{b3}) получились равными нулю. Это означает, что указанное сырье не участвует в ценообразовании реализуемой продукции, поскольку само образуется в процессе ее производства.

В настоящей главе не ставилась задача описать все возможные примеры использования методов линейного программирования. Не была рассмотрена также одна из важных областей их применения — решение транспортных задач, для которых разработаны методы, отличные от симплексного алгоритма. В последнее время

линейное программирование получает широкое распространение при усовершенствовании управления и планирования производств методами исследования операций, особенно когда возможно использование линейных моделей. Для более детального ознакомления с математическим аппаратом линейного программирования и его применением следует обратиться к литературе [1, 2, 4].

ЛИТЕРАТУРА

1. *Зуховицкий С. И., Авдеева Л. И.* Линейное и выпуклое программирование. М., «Наука», 1967. 460 с.
2. *Гасс С.* Линейное программирование. Пер. с англ. М., Физматгиз, 1961. 303 с.
3. *Демидович Б. П., Марон И. А.* Основы вычислительной математики. М., Физматгиз, 1963. 659 с.
4. *Кофман А.* Методы и модели исследования операций. Пер. с франц. М., «Мир», 1966. 523 с.
5. *Криницкий Н. А., Миронов Г. А., Фролов Г. Д.* Программирование. М., Физматгиз, 1963. 383 с.

НЕЛИНЕЙНОЕ ПРОГРАММИРОВАНИЕ

Математическая формулировка задачи оптимизации, как уже неоднократно отмечалось выше, часто может быть представлена как задача отыскания наибольшего или наименьшего значения функции нескольких переменных:

$$R = R(x_1, x_2, \dots, x_n) \quad (\text{IX}, 1)$$

где функция R является количественной оценкой представляющего интерес качества объекта оптимизации.

На независимые переменные x_j ($j = 1, \dots, n$) в общем случае можно наложить различные *ограничения* в виде равенств:

$$\varphi_i(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{IX}, 2a)$$

или неравенств:

$$\varphi_i(x_1, x_2, \dots, x_n) \leq 0 \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{IX}, 2б)$$

или же тех и других одновременно.

При анализе возможности решения задачи оптимизации с критерием (IX, 1) имеет смысл рассматривать два варианта. Это, во-первых, когда соотношения (IX, 1) и (IX, 2) заданы в аналитической форме, во-вторых, если хотя бы некоторые из них нельзя выразить явными аналитическими зависимостями от переменных x_j .

Для случая, когда аналитический вид соотношений (IX, 1) и (IX, 2) известен и не слишком сложен и если, в особенности, число независимых переменных n невелико, всегда можно с большим или меньшим успехом использовать для решения оптимальной задачи аналитические методы, по крайней мере для того, чтобы свести ее решение к решению системы конечных уравнений. Примеры решения подобных задач уже приводились (см. главы III и IV). Кроме того, выше также был описан весьма важный класс задач, когда соотношения (IX, 1) и (IX, 2) являются линейными, для решения которых применяется математический аппарат линейного программирования (см. главу VIII).

Особые трудности возникают тогда, когда соотношение (IX, 1), определяющее значение критерия оптимальности для заданной

совокупности значений независимых переменных x_j , не может быть записано в явном виде. Как правило, большинство практических задач оптимизации относится именно к этому случаю, поскольку значение критерия оптимальности обычно находится в результате решения системы уравнений математического описания оптимизируемого объекта, для которого независимые переменные x_j играют роль управляющих воздействий.

Наличие ограничений (IX, 2), которые могут быть заданы как трудновычислимые функции независимых переменных, еще более затрудняет отыскание оптимального решения и требует использования специальных приемов решения.

Задачи такого типа, т. е. с нелинейными и трудновычислимыми соотношениями, определяющими критерий оптимальности (IX, 1) и ограничения (IX, 2), являются предметом рассмотрения специального раздела математики — *нелинейного программирования*.

Как правило, решения задач нелинейного программирования могут быть найдены только численными методами, поэтому возникает необходимость применения средств вычислительной техники.

В настоящее время для решения подобных задач разработано и применяется довольно значительное число методов. Однако пока еще не представляется возможным отдать предпочтение какому-либо одному из них. Это объясняется, прежде всего, тем, что практически каждая конкретная задача оптимизации, сводящаяся к задаче нелинейного программирования, обладает присущими только ей особенностями, позволяющими с наибольшим успехом применить тот или иной метод решения. Более того, обычно заранее даже нельзя сказать определенно, какой из методов окажется в данном случае более эффективным.

Вместе с тем, владение методами нелинейного программирования нужно не только как самоцель, но также и в связи с использованием таких методов оптимизации, как динамическое программирование или принцип максимума, в которых на различных этапах приходится решать задачи нелинейного программирования.

1. ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ

Целевая функция и ее некоторые свойства

Нормализация независимых переменных. Ниже при рассмотрении методов решения задач нелинейного программирования в большинстве случаев предполагается, что критерий оптимальности R (IX, 1) является трудновычислимой функцией, аналитическое выражение которой как функции независимых переменных x_j отсутствует.

Для сокращения записи обычно используется векторная форма обозначения совокупности значений независимых переменных

$$x = (x_1, x_2, \dots, x_n) \quad (\text{IX, 3})$$

с учетом которой соотношения (IX, 1) и (IX, 2) можно записать как

$$R = R(x) \quad (\text{IX, 4})$$

$$\varphi(x) = 0 \quad (\text{IX, 5a})$$

$$\varphi(x) \leq 0 \quad (\text{IX, 5б})$$

Поскольку при решении конкретных задач независимые переменные могут иметь самый различный физический смысл (например, температура, давление, концентрация и т. д.) и соответственно разные единицы измерения, при решении оптимальных задач численными методами целесообразно оперировать с их безразмерными нормализованными значениями. Обычно для нормализации применяется возможный диапазон изменения значений независимых переменных, который всегда может быть установлен, исходя из физической сущности решаемой задачи.

Допустим, что некоторый физический параметр исходной задачи может изменять свое значение y_j в пределах:

$$y_{j, \min} \leq y_j \leq y_{j, \max} \quad (\text{IX, 6})$$

Тогда, обозначая величину диапазона изменения значения y_j через

$$d_j = y_{j, \max} - y_{j, \min} \quad (\text{IX, 7})$$

можно ввести безразмерную переменную

$$x_j = \frac{y_j - y_{j, \min}}{d_j} \quad (\text{IX, 8})$$

Переменная x_j при таком способе определения уже будет изменяться в пределах

$$0 \leq x_j \leq 1 \quad (\text{IX, 9})$$

С учетом нормирования переменных можно говорить о решении задачи нелинейного программирования как совокупности неотрицательных значений x_j ($j = 1, \dots, n$), минимизирующей (или максимизирующей) критерий оптимальности R (IX, 1) и удовлетворяющей условиям (IX, 2), т. е.

$$x \in X \quad (\text{IX, 10})$$

где X — допустимая область изменения переменных x_j , описываемая соотношениями (IX, 2).

Геометрическая интерпретация целевой функции и ограничений. В соответствии с соотношением (IX, 1) значение критерия оптимальности R может рассматриваться как функция, определенная в n -мерном пространстве переменных x_j ($j = 1, \dots, n$). Поскольку наглядное графическое изображение n -мерного пространства отсутствует, далее используется следующий прием представления функции $R(x)$ на плоском чертеже.

Предположим, что через точку $x_{\text{опт}}$ в n -мерном пространстве, соответствующую оптимальному решению задачи, например минимуму целевой функции, проведена двухмерная плоскость P . Тогда при удалении от точки $x_{\text{опт}}$ по этой плоскости в любом направлении значение $R(x)$ увеличивается. Если $R(x)$ является непрерывной функцией в области X , то вокруг точки $x_{\text{опт}}$ всегда можно провести в данной плоскости замкнутую линию, вдоль которой значение $R(x)$ постоянно (рис. IX-1, а). Таких замкнутых линий, называемых линиями уровня функции $R(x)$ и отвечающих различным значениям $R(x) = c_k$, можно провести в плоскости P вокруг точки $x_{\text{опт}}$ сколько угодно, причем каждая из этих линий для точки минимума будет целиком охватывать любую линию, для которой зна-

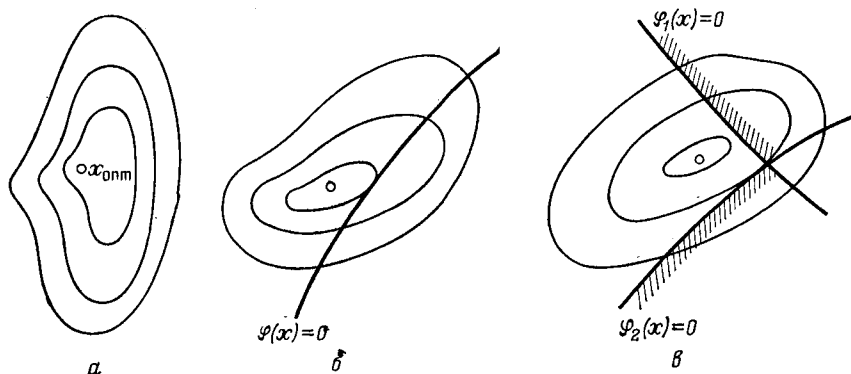


Рис. IX-1. Геометрическая интерпретация целевой функции и ограничений.

чение функции $R(x)$ меньше. Форма линий постоянного уровня, соответствующих разным значениям c_k , при этом может быть существенно различной.

При наличии ограничений типа равенств (IX, 2а) рассмотренный прием изображения целевой функции также можно использовать, если принять во внимание, что каждое из уравнений (IX, 2а) определяет в n -мерном пространстве $(n-1)$ -мерную поверхность, пересечение которой с двухмерной плоскостью P имеет вид некоторой линии l (рис. IX-1, б), вдоль которой и ищется оптимальное решение. Правда, случай, когда число ограничений типа равенств больше 1, пересечения поверхности, например двумя ограничениями

$$\left. \begin{aligned} \varphi_1(x) &= 0 \\ \varphi_2(x) &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (\text{IX, 11})$$

может иметь с плоскостью P только некоторые общие точки. Однако в большинстве случаев для наглядной иллюстрации метода оптимизации при наличии ограничения типа равенств (IX, 2а) достаточно чертежа, изображенного на рис. IX-1, б.

Ограничения же типа неравенств (IX, 26) независимо от их числа наглядно представляются описанным способом (рис. IX-1, в).

Очевидно, что рассмотренный способ изображения функции $R(x)$ с ограничениями или без них не является однозначным, так как форма линий постоянного уровня функции $R(x)$ (и форма ограничений) может существенно изменяться в зависимости от ориентации плоскости P в n -мерном пространстве. Тем не менее, иллюстративный прием во многих случаях позволяет наглядно представить различные алгоритмы решения задач нелинейного программирования, вследствие чего он и применяется в дальнейшем

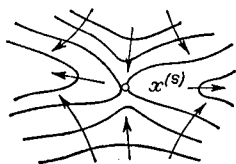


Рис. IX-2. Линии постоянного уровня в окрестности „седловой“ точки.

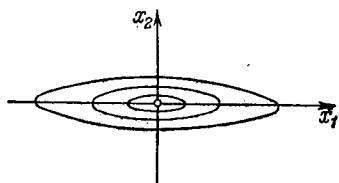


Рис. IX-3. Характер линий постоянного уровня у функции, имеющей „овраг“.

Особые точки и линии целевой функции. Как известно (см. главу III), необходимым условием экстремума функции многих переменных является выполнение системы равенств:

$$\frac{\partial R}{\partial x_j} = 0 \quad j = 1, \dots, n \quad (\text{IX, 12})$$

Поскольку условие (IX, 12) — лишь необходимое, но еще не достаточное, могут представиться случаи, когда при его выполнении в некоторой точке $x^{(s)}$ экстремума функции $R(x)$ в ней не будет.

Примерами подобных точек целевой функции служат точки, в которых функция $R(x)$ по одному или нескольким направлениям имеет минимум, в то время как по остальным — максимум. Такие точки называются *седловыми точками* функции $R(x)$. Для случая двух переменных пример функции с седлом был рассмотрен в главе III.

Линии постоянного уровня на плоскости P , проведенной через седловую точку $x^{(s)}$, изображены на рис. IX-2, где стрелками показаны направления уменьшения значений функции $R(x)$.

Другим типом особенностей целевой функции являются так называемые *овраги*, при наличии которых вдоль определенных направлений величина данной функции изменяется очень слабо.

В качестве примера можно привести функцию

$$R = \frac{x_1^2}{a^2} + \frac{x_2^2}{b^2} + c^2 \quad (\text{IX, 13})$$

у которой при выполнении условия $a \gg b$ имеется овраг, причем его «дно» расположено вдоль оси x_1 . На рис. IX-3 изображены линии постоянного уровня этой функции.

В общем случае линия «дна» оврага может не совпадать по направлению с осями координат и, кроме того, существенно отличаться от прямой, т. е. возможны также криволинейные овраги.

Функции многих переменных могут иметь овраги с размерностью, превышающей 1. Наглядное графическое изображение таких случаев отсутствует, однако формально многомерный овраг можно определить как область значений независимых переменных, в которой функция $R(x)$ вдоль нескольких направлений в n -мерном пространстве имеет малую скорость изменения, тогда как вдоль остальных направлений скорость изменения этой функции сравнительно высока.

В качестве примера функции с многомерным оврагом приведем функцию

$$R = \sum_{j=1}^q \frac{x_j^2}{a_j^2} + \sum_{j=q+1}^n \frac{x_j^2}{b_j^2} \quad (\text{IX}, 14)$$

которая при выполнении условия $a_j \gg b_k$ для всех a_j и b_k имеет овраг размерности q .

Как показано ниже, наличие оврагов у оптимизируемой функции затрудняет отыскание истинного положения экстремума и для точного его нахождения приходится использовать специальные методы поиска (см. стр. 516).

Глобальный и локальный оптимумы. При отыскании оптимума целевой функции $R(x)$ (IX, 1) задачей, как правило, является определение совокупности значений независимых переменных x_j , соответствующей не какому-нибудь экстремуму функции $R(x)$, а наибольшему или наименьшему значению $R(x)$ в допустимой области X , описываемой соотношениями (IX, 2). В дальнейшем обычно предполагается, что оптимум отвечает наименьшему значению функции $R(x)$.

Решение оптимальной задачи, т. е. совокупность значений независимых переменных x_j ($j = 1, \dots, n$), при этом удовлетворяет условию

$$R(x_{\text{опт}}) \leq R(x) \quad x \in X \quad (\text{IX}, 15)$$

которое выполняется для любых допустимых значений x .

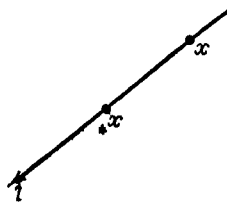
Оптимум, для которого справедливо условие (IX, 15), обычно называется *глобальным*. Кроме него функция $R(x)$ может иметь один или несколько *локальных оптимумов* в точках $x^{(k)}$ ($k = 1, \dots, p$), для которых можно также записать соотношения типа (IX, 15), выполняющиеся в окрестностях $X^{(l)}$ точек $x^{(l)}$.

Поскольку заранее число локальных оптимумов p целевой функции не известно, становятся очевидными трудности, которые могут встретиться при отыскании глобального оптимума, так как для

этого необходимо, вообще говоря, найти и проверить все без исключения локальные оптимумы, имеющиеся у целевой функции решаемой задачи. Однако и для определения положения оптимума целевой функции, даже в том случае, когда заранее известно, что функция имеет только один оптимум, являющийся глобальным, отыскание решения часто представляет собой задачу далеко не тривиальную, поскольку это связано с операциями поиска в n -мерном пространстве.

Градиент целевой функции. Среди методов, применяемых для решения задач нелинейного программирования, значительное место занимают методы поиска решения, основанные на анализе производных оптимизируемой функции. Предполагая в дальнейшем (там где это специально не оговорено), что анализируются только непрерывные дифференцируемые функции $R(x)$, остановимся на свойствах этих функций, которые можно использовать для анализа их поведения.

Рис. IX-4. К определению производной от функции $R(x)$ по направлению l .



В пространстве n переменных x_j , где определена функция $R(x)$, выберем произвольное направление l (рис. IX-4) и рассмотрим значения функции $R(x)$ в двух точках x и x^* , расположенных на прямой, проведенной в этом направлении. Если теперь составить отношение

$$\frac{R(x^*) - R(x)}{x^* - x}$$

и устремить длину отрезка $x^* - x$ к нулю, то в пределе получим величину, представляющую производную от функции $R(x)$ по направлению l , т. е.

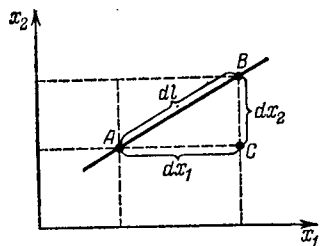
$$\frac{\partial R(x)}{\partial l} = \lim_{x^* \rightarrow x} \frac{R(x^*) - R(x)}{x^* - x} \quad (\text{IX, 16})$$

Найденная производная характеризует скорость изменения функции $R(x)$ в точке x в направлении l . Поскольку через точку x можно провести бесчисленное множество прямых по различным направлениям, то, следовательно, в каждой точке для функции $R(x)$ можно определить бесчисленное множество производных по разным направлениям. Нетрудно показать, что все эти производные могут быть выражены через производные по координатам, число которых уже будет конечным и равным размерности n .

С этой целью воспользуемся правилом дифференцирования сложных функций и, согласно ему, получим:

$$\frac{\partial R(x)}{\partial l} = \sum_{j=1}^n \frac{\partial R(x)}{\partial x_j} \cdot \frac{\partial x_j}{\partial l} \quad (\text{IX, 17})$$

Для расчета величин $\partial x_j / \partial l$ обратимся к рассмотрению аналогии в пространстве двух переменных (рис. IX-5). Элемент длины dl в данном случае выражается через дифференциалы переменных с помощью уравнения:



$$dl = \sqrt{(dx_1)^2 + (dx_2)^2} \quad (\text{IX, 18})$$

При этом из прямоугольного треугольника ABC можно сразу записать, что

$$\frac{dx_1}{dl} = \cos \alpha = \cos(\widehat{x_1 l}) \quad (\text{IX, 19a})$$

$$\frac{dx_2}{dl} = \cos \beta = \cos(\widehat{x_2 l}) \quad (\text{IX, 19б})$$

Рис. IX-5. К определению направляющих косинусов.

Аналогично и в выражении (IX, 17) величины $\partial x_j / \partial l$ есть не что иное, как направляющие косинусы выбранного направления l по отношению к осям координат, т. е.

$$\frac{\partial R(x)}{\partial l} = \sum_{j=1}^n \frac{\partial R(x)}{\partial x_j} \cos(\widehat{x_j l}) \quad (\text{IX, 20})$$

Рассмотрим одну из поверхностей постоянного уровня функции $R(x)$. Эта поверхность характеризуется тем, что в любой ее точке функция $R(x)$ имеет одно и то же постоянное значение c . Уравнение данной поверхности может быть получено из выражения для целевой функции приравниванием его постоянной величине c :

$$R(x_1, x_2, \dots, x_n) = c \quad (\text{IX, 21})$$

Разрешая уравнение (IX, 21) относительно любой из переменных, можно построить указанную поверхность, задаваясь различными значениями остальных переменных.

Поскольку поверхность постоянного уровня (IX, 21) имеет $n - 1$ независимых параметров, очевидно, что ее можно представить как поверхность с $n - 1$ измерениями. Так, например, в пространстве двух переменных, т. е. на плоскости, эта поверхность вырождается в некоторую линию, которая имеет только одно измерение — длину (рис. IX-6, а). В пространстве трех переменных (рис. IX-6, б) поверхность постоянного уровня, определенная для функции $R(x_1, x_2, x_3)$, имеет уже два измерения — длину и ширину. Точно так же в n -мерном пространстве поверхность постоянного уровня функции $R(x)$, описываемая уравнением (IX, 21), имеет $n - 1$ измерений.

Таким образом, в каждой точке поверхности (гиперповерхности) в n -мерном пространстве можно провести $n - 1$ взаимно перпендикулярных касательных в соответствии с числом измерений этой поверхности. Кроме того, в той же точке можно провести ось, перпендикулярную всем касательным и, следовательно, направленную по нормали к поверхности. Подобное построение изображено на рис. IX-7 для случая $n = 3$.

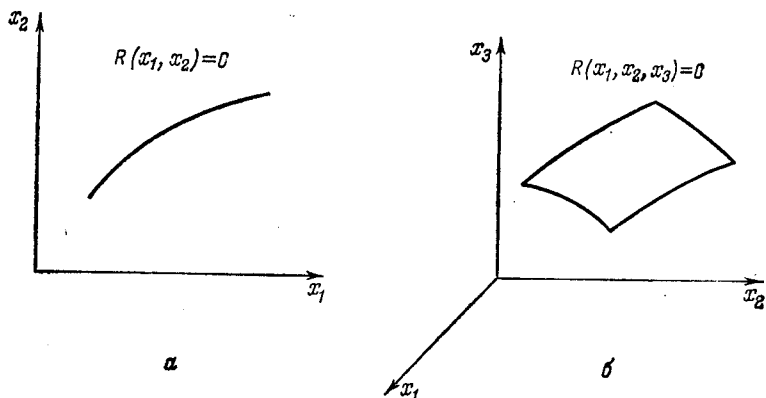
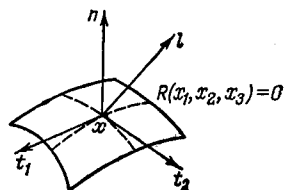


Рис. IX-6. Изображение поверхности постоянного уровня целевой функции в пространствах двух и трех переменных.

Касательные и нормаль могут рассматриваться как система координат с началом в выбранной точке поверхности. Данная система координат обладает одним важным свойством, а именно: частные производные от функции $R(x)$ по направлениям осей, яв-

Рис. IX-7. Система координат, связанная с произвольной точкой поверхности постоянного уровня.



ляющихся касательными к поверхности, равны нулю, так как вдоль этих направлений функция $R(x)$ сохраняет постоянное значение.

Если теперь взять произвольное направление l , то производная по нему на основании сказанного выше запишется как

$$\frac{\partial R(x)}{\partial l} = \frac{\partial R(x)}{\partial n} \cos(\widehat{n, l}) \quad (\text{IX, 22})$$

что непосредственно следует из формулы (IX, 20), где производные по всем осям, за исключением нормали, оказываются равными нулю.

Поскольку $\cos \alpha$ есть функция, не превышающая по абсолютной величине 1 и принимающая максимальное значение при

аргументе, равном нулю, очевидно, что направление, по которому производная $\partial R / \partial l$ имеет максимальное значение, совпадает с направлением нормали к поверхности постоянного уровня функции $R(x)$. Если отложить на направлении нормали вектор с алгебраической величиной, равной производной $\frac{\partial R(x)}{\partial n}$, то получим вектор, называемый **градиентом** скалярной функции $R(x)$ в точке x .

Основным свойством градиента функции $R(x)$, обозначаемым как $\text{grad } R(x)$ или $\nabla R(x)$, является то, что вектор $\nabla R(x)$ в каждой точке области определения функции $R(x)$ направлен по направлению нормали к поверхности уровня, проведенной через эту точку, и по алгебраической величине равен производной от указанной функции по направлению нормали.

Формула (IX, 22) может быть записана также в несколько ином виде:

$$\frac{\partial R}{\partial l} = \nabla_l R(x) \quad (\text{IX, 23})$$

где через $\nabla_l R(x)$ обозначена проекция градиента функции $R(x)$ на направление l . Из этой записи следует, что проекции вектора градиента на оси координат равны производным функции $R(x)$ по соответствующим переменным, и, таким образом

$$\nabla R(x) = \left(\frac{\partial R}{\partial x_1}, \frac{\partial R}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial R}{\partial x_n} \right) \quad (\text{IX, 24})$$

Нужно отметить еще одно очевидное свойство градиента целевой функции. Вектор градиента по направлению *совпадает с направлением наискорейшего возрастания* целевой функции. Именно это свойство и обусловило применение градиентных методов при решении задач нелинейного программирования.

Общая характеристика методов решения задач нелинейного программирования

В подавляющем большинстве методы нелинейного программирования могут быть охарактеризованы как многошаговые методы или методы последовательного улучшения исходного (или начального) решения. Однако в отличие от симплексного метода в линейном программировании, являющегося также многошаговым методом с ограниченным числом шагов, в задачах нелинейного программирования обычно заранее нельзя сказать, какое наибольшее число шагов гарантирует нахождение оптимума с заданной степенью точности. Более того, если в симплексном методе величина каждого шага строго определена, в методах, используемых для решения задач нелинейного программирования, выбор величины шага представляет собой серьезную проблему, от успешного решения которой во многом зависит эффективность применения того или иного метода. Разнообразие методов решения задач нелинейного программирования как раз и объясняется стремлением найти

оптимальное решение за наименьшее число шагов, чтобы избежать необходимость многократного вычисления значений целевой функции.

Большинство методов нелинейного программирования использует идею движения в n -мерном пространстве в направлении оптимума. При этом из некоторого исходного или промежуточного состояния $x^{(k)}$ осуществляется переход в следующее состояние $x^{(k+1)}$ изменением вектора $x^{(k)}$ на величину $\Delta x^{(k)}$, называемую шагом, т. е.

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \Delta x^{(k)} \quad (\text{IX, 25})$$

Очевидно, что случая поиска оптимума, являющегося минимумом, для удачно выбранного шага должно выполняться условие

$$R(x^{(k+1)}) < R(x^{(k)}) \quad (\text{IX, 26})$$

иначе переход в состояние $x^{(k+1)}$ нецелесообразен.

В значительной части методов шаг, т. е. его величина и направление, определяется как некоторая функция состояния $x^{(k)}$:

$$\Delta x^{(k)} = \Delta x^{(k)}(x^{(k)}) \quad (\text{IX, 27})$$

Следовательно, согласно соотношению (IX, 25), новое состояние $x^{(k+1)}$, получаемое в результате выполнения шага (IX, 27), может рассматриваться как функция исходного состояния $x^{(k)}$:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \Delta x^{(k)}(x^{(k)}) \quad (\text{IX, 28})$$

В этом смысле шаговые методы поиска оптимума могут быть названы итеративными, если последовательное применение формулы (IX, 28) ($k \rightarrow \infty$) обеспечивает нахождение оптимума (наблюдается сходимость поиска).

В некоторых методах шаг $\Delta x^{(k)}$ обусловлен не только состоянием $x^{(k)}$, но и рядом предшествующих состояний, т. е.

$$\Delta x^{(k)} = \Delta x^{(k)}(x^{(k)}, x^{(k-1)}, \dots, x^{(k-r)}) \quad (\text{IX, 29})$$

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \Delta x^{(k)}(x^{(k)}, x^{(k-1)}, \dots, x^{(k-r)}) \quad (\text{IX, 30})$$

Естественно, что алгоритмы поиска типа (IX, 30) являются более общими и принципиально могут обеспечить более высокую скорость сходимости к оптимуму, так как используют большой объем информации о характере поведения оптимизируемой функции.

Соотношения (IX, 28) и (IX, 30) представляют собой дискретные алгоритмы поиска оптимума целевой функции. При достаточно малой величине шагов $\Delta x^{(k)}$ можно также записать и непрерывные аналоги этих алгоритмов в форме дифференциальных уравнений. Например, для алгоритма (IX, 28) имеем:

$$\frac{dx}{dt} = \varphi(x, t) \quad (\text{IX, 31})$$

где $\varphi(x, t)$ — вектор-функция, определяемая не только вектором текущего состояния $x(t)$, но в общем случае также и временем поиска t , что соответствует изменению вида зависимости (IX, 27) с увеличением количества шагов, т. е. с изменением k .

Алгоритм (IX, 30) в частном случае может иметь непрерывный аналог в форме дифференциального уравнения

$$\rho \frac{d^2 x}{dt^2} + \nu \frac{dx}{dt} = \varphi(x, t) \quad (\text{IX, 32})$$

которое описывает алгоритм поиска методом «тяжелого шарика» (см. стр. 500).

Значительное число методов нелинейного программирования в соответствии со способом определения шага $\Delta x^{(h)}$ можно отнести к одному из трех основных классов:

1. Градиентные методы.
2. Безградиентные методы детерминированного поиска.
3. Методы случайного поиска.

Некоторые методы (например, метод оврагов, стр. 516) могут быть организованы как комбинированные алгоритмы, использующие достоинства методов, относящихся к различным классам.

2. ГРАДИЕНТНЫЕ МЕТОДЫ

В основу градиентных методов поиска оптимума положены вычисление и анализ производных целевой функции $R(x)$. Поэтому, прежде чем перейти к описанию различных методов, необходимо рассмотреть вопрос о расчете производных $\partial R / \partial x_j$.

Если аналитический вид целевой функции (IX, 1) известен, вычисление производных $\partial R / \partial x_j$ ($j = 1, \dots, n$) чаще всего не составляет особого труда, хотя иногда и может привести к довольно громоздким выражениям. Если же зависимость $R(x)$ в явном аналитическом виде нельзя записать или же вид этой зависимости настолько сложен, что аналитические выражения для производных $\partial R / \partial x_j$ получаются слишком сложными для практического использования в расчетах, то единственным способом определения производных $\partial R / \partial x_j$ является численный метод. Значение производной $\partial R / \partial x_j$ при этом вычисляется по приближенному соотношению

$$\frac{\partial R}{\partial x_j} \approx \frac{\Delta R}{\Delta x_j} = \frac{R(x_1, \dots, x_j + \Delta x_j, \dots, \Delta x_n) - R(x_1, \dots, x_j, \dots, x_n)}{\Delta x_j} \quad (\text{IX, 33})$$

где Δx_j — величина приращения независимой переменной x_j , от которого существенно может зависеть точность определения значения производной.

При применении нормализованных переменных x_j в алгоритме оптимизации необходимо принимать во внимание соотношение нормировки (IX, 8) при вычислении приращения целевой функции R , если она выражена через значения исходных физических переменных y_j . Из выражения (IX, 8) следует, что приращение физи-

ческой переменной Δy_j связано с приращением нормализованной переменной Δx_j соотношением:

$$\Delta y_j = d_j \Delta x_j \quad (\text{IX}, 34)$$

Для вычисления производных $\partial R / \partial x_j$ ($j = 1, \dots, n$) удобно давать одно и то же приращение γ по всем независимым переменным x_j , т. е.

$$\Delta x_j = \gamma \quad j = 1, \dots, n \quad (\text{IX}, 35)$$

В этом случае приращение соответствующих значений физических переменных Δy_j определяется как

$$\Delta y_j = \gamma d_j \quad j = 1, \dots, n \quad (\text{IX}, 36)$$

и величина γ имеет смысл доли диапазона изменения переменной y_j .

Если значения целевой функции (IX, 1) вычисляются через исходные физические переменные y_j , т. е. $R = R^*(y)$, то с учетом выражений (IX, 35) и (IX, 36) формула для приближенного расчета производных (IX, 33) запишется в виде:

$$\frac{\partial R}{\partial x_j} \approx \frac{R^*(y_1, \dots, y_j + \gamma d_j, \dots, y_n) - R^*(y_1, \dots, y_j, \dots, y_n)}{\gamma} \quad (\text{IX}, 37)$$

Как уже отмечалось выше, формулы (IX, 33) и (IX, 37) дают лишь приближенное к истинному значению производной $\partial R / \partial x_j$. Точность этого приближения зависит от приращения независимой переменной Δx_j или γ . Однако априорных способов предсказания наилучшего значения γ не существует. Можно лишь заметить, что допустимое указанное приращение, с одной стороны, ограничено по максимуму кривизной целевой функции в исследуемой точке (которая заранее не известна!), а с другой — по минимуму используемой точностью вычисления значений целевой функции (которая тоже заранее не известна и может существенно отличаться от точности задания значений x_j в процессе расчета).

Практически для определения приемлемого значения γ (в особенности в начале поиска, когда производные еще ни разу не находились) используется метод дробления γ . Например, вычисляется значение производной с приращением, равным γ , и расчет повторяется с $\gamma/2$. Если полученные значения производных различаются существенно, расчет повторяется с $\gamma/4$ и т. д., пока не будет найдено оптимальное значение приращения Δx_j . Разумеется, что на последующих шагах это значение может уточняться.

Метод релаксации

Алгоритм метода заключается в отыскании осевого направления, вдоль которого функция цели уменьшается наиболее сильно. Для этого в начальной точке поиска определяются производные оптимизируемой функции по всем независимым переменным.

Осевому направлению с наибо́льшим убыванием целевой функции, очевидно, соответствует наибольшая по модулю производная. Если знак производной отрицательный, целевая функция убывает в направлении оси, если — положительный, в обратном направлении. По направлению убывания целевой функции производятся шаги до тех пор, пока не будет получено минимальное значение по выбранному осевому направлению. Тогда вновь определяются производные по всем переменным, за исключением той, по которой осуществлялся спуск, и снова находится осевое направление наибо́льшего убывания функции цели, по которому производятся дальнейшие шаги, и т. д.

Критерием окончания поиска оптимума является достижение такой точки, при движении из которой по любому осевому направлению дальнейшего убывания функции не происходит. На практике в качестве признака оптимума часто применяется условие

$$\sum_{j=1}^n \left(\frac{\partial R}{\partial x_j} \right)^2 < \delta \quad (\text{IX, 38})$$

которое при $\delta \rightarrow 0$ превращается в точное условие равенства нулю производных в точке оптимума. Разумеется, что условие (IX, 38) может быть использовано только в том случае, если оптимум лежит внутри допустимой области изменения независимых переменных X . Если же оптимум попадает на границу области X , критерий типа (IX, 38) непригоден и вместо него следует применять условие положительности всех производных по допустимым осевым направлениям. При этом допустимым осевым будет только направление внутрь области X . Обратное направление по той же оси ведет за пределы области X , если, конечно, рассматриваемая ось не является в данной точке касательной к границе области X .

Алгоритм спуска для выбранного осевого направления может быть записан в виде следующей формулы:

$$x_j^{(k+1)} = x_j^{(k)} - h^{(k)} \operatorname{sgn} \frac{\partial R(x^{(p)})}{\partial x_j} \quad (\text{IX, 39})$$

причем $x_j^{(k)}$ — значение изменяемой переменной на k -ом шаге спуска; $h^{(k)}$ — величина k -го шага, которая может изменять свое значение в зависимости от номера шага; $\operatorname{sgn} z$ — функция знака; $x^{(p)}$ — вектор точки, в которой последний раз производилось вычисление производных целевой функции.

Графическое изображение движения от исходного состояния к оптимуму показано на рис. IX-8.

Очевидно, что скорость движения к минимуму зависит от того, насколько удачно выбран шаг $h^{(k)}$ изменения независимых переменных. При слишком малой величине шага число шагов, которое необходимо сделать, чтобы достичь оптимума, будет большим и,

следовательно, потребуется много раз вычислять значения целевой функции на пути движения к оптимуму.

Если, напротив, величина шага с самого начала спуска выбрана слишком большой, вблизи оптимума может возникнуть «рыскание», так как при большой величине шага мала вероятность попадания в окрестность оптимума, в которой выполняется условие окончания поиска (IX,38). Поэтому представляют интерес специальные приемы изменения величины шага в процессе поиска.

Простейший алгоритм изменения шага состоит в следующем. В начале спуска по одному из осевых направлений задается некоторый шаг $h^{(0)}$, равный, например, 0,1, что соответствует изменению значения физической переменной y_j на 10% от принятого диапазона d_j . С этим шагом производится спуск по выбранному осевому направлению до тех пор, пока для двух последующих вычислений значений целевой функции выполняется условие:

$$R(x^{(k+1)}) < R(x^{(k)}) \quad (\text{IX, 38a})$$

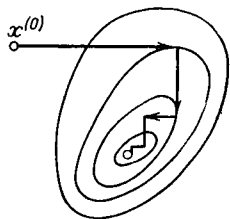


Рис. IX-8. Характер движения к оптимуму в методе релаксации.

При нарушении условия на каком-либо l -м шаге направление спуска на оси изменяется на обратное и спуск продолжается из последней рассчитанной точки с уменьшенной вдвое величиной шага.

Формульная запись этого алгоритма имеет вид:

$$h^{(k+1)} = \begin{cases} h^{(k)} & R(x^{(k)}) \leq R(x^{(k-1)}) \\ -\frac{h^{(k)}}{2} & R(x^{(k)}) > R(x^{(k-1)}) \end{cases} \quad (\text{IX, 39a})$$

В результате использования такой стратегии шаг спуска по осевому направлению будет уменьшаться в районе минимума целевой функции и по этому направлению и поиск минимума можно прекратить, когда величина шага $h^{(k)}$ станет меньше заданной точности определения минимума ε в осевом направлении. Затем отыскивается новое осевое направление, в котором функция изменяется наиболее сильно. Начальный шаг в новом направлении уже можно выбрать не как заданную долю диапазона изменения независимой переменной, а как заданную долю расстояния, пройденного вдоль предыдущего осевого направления. Это позволяет автоматически уменьшать начальный шаг по каждому следующему осевому направлению при приближении к оптимуму целевой функции, в районе которого спуск по каждой оси происходит на небольшое расстояние.

Можно применить и другие стратегии изменения шага в процессе поиска. Хорошие результаты, например, могут быть иногда получены с использованием алгоритма изменения шага, основанного на свойствах чисел Фибоначчи (см. стр. 505).

Существенной особенностью метода релаксации является зависимость времени поиска от ориентации системы координат. На рис. IX-9 показаны линии постоянного уровня одной и той же целевой функции в системах координат, отличающихся между собой поворотом осей.

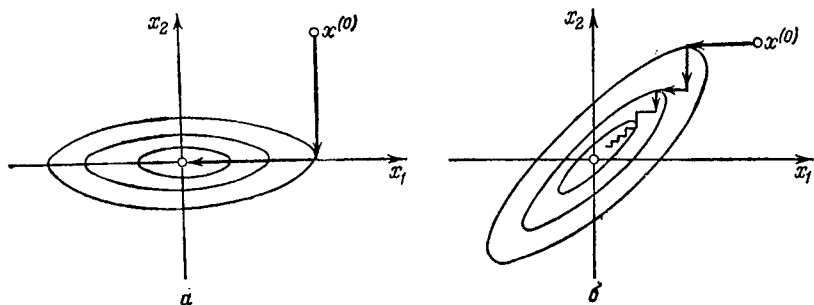


Рис. IX-9. Зависимость времени поиска оптимума методом релаксации от ориентации системы координат.

Если в случае, изображенном на рис. IX-9, а, для достижения минимума целевой функции необходимо только два цикла движения вдоль осевых направлений, то для случая, приведенного на рис. IX-9, б, число таких циклов возрастает весьма существенно.

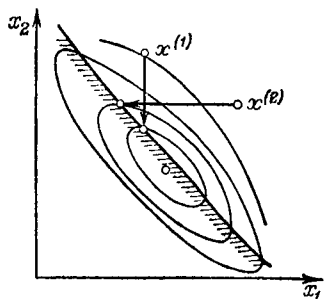


Рис. IX-10. Остановка поиска в методе релаксации на границе.

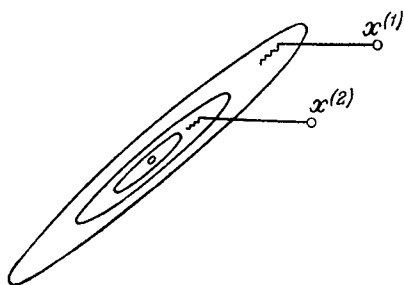


Рис. IX-11. Остановка поиска в методе релаксации на «дне оврага».

Если на область изменения независимых переменных наложены ограничения типа неравенств, то при применении метода релаксации иногда могут возникать значительные трудности. В качестве примера можно привести случай, изображенный на рис. IX-10, когда поиск оптимума методом релаксации «застревает» в любой точке границы. Точно так же обстоит дело, если у целевой функции имеются овраги, направление которых не совпадает с осевыми. При этом поиск «застревает» в любой точке «дна» оврага (рис. IX-11).

Как уже говорит само название метода, в нем используется градиент целевой функции. В отличие от рассмотренного выше метода релаксации в методе градиента шаги совершаются в направлении наискорейшего уменьшения целевой функции, что, естественно, ускоряет процесс поиска оптимума.

Поиск оптимума при использовании метода градиента также производится в два этапа. На первом находятся значения частных производных по всем независимым переменным, которое определяет направление градиента в рассматриваемой точке. На втором этапе осуществляется шаг в направлении, обратном направлению градиента, т. е. в направлении наискорейшего убывания целевой функции.

При выполнении шага одновременно изменяются значения всех независимых переменных. Каждая из них получает приращение, пропорциональное соответствующей составляющей градиента по данной оси.

По существу в методе градиента применяется та же информация о целевой функции, что и в методе релаксации при выборе осевого направления, однако спуск производится оптимально.

Алгоритм градиентного метода может быть записан следующим образом:

$$x_j^{(k+1)} = x_j^{(k)} - h^{(k)} \frac{\frac{\partial R(x^{(k)})}{\partial x_j}}{\sqrt{\sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial R(x^{(k)})}{\partial x_i} \right)^2}} \quad (\text{IX, 40})$$

В алгоритме (IX, 40) для градиентного поиска применяется нормализованный вектор градиента, указывающий лишь направление наискорейшего изменения целевой функции, но он не указывает скорости изменения по этому направлению. При использовании нормализованного вектора-градиента шаг спуска определяется величиной $h^{(k)}$, стратегию изменения которой можно строить независимо от абсолютной величины градиента.

Иногда применяется алгоритм градиентного поиска в виде:

$$x_j^{(k+1)} = x_j^{(k)} - h^{(0)} \frac{\partial R(x^{(k)})}{\partial x_j} \quad j = 1, \dots, n \quad (\text{IX, 41})$$

В этом случае величина шага $\Delta x_j^{(k)}$ при постоянном значении параметра $h^{(0)}$ изменяется автоматически в соответствии с изменением абсолютной величины градиента. Длина шага определяется

выражением:

$$\Delta x_j^{(k)} = -h^{(0)} \frac{\partial R(x^{(k)})}{\partial x_j} \quad j = 1, \dots, n \quad (\text{IX}, 42)$$

Алгоритм (IX, 41) обладает тем достоинством, что при приближении к оптимуму длина шага $\Delta x_j^{(k)}$ автоматически уменьшается.

Вообще задача выбора стратегии изменения величины шага в градиентном поиске более важна, чем в методе релаксации. Это объясняется тем, что после каждого шага здесь находятся производные целевой функции, расчет которых связан с вычислением n значений целевой функции. Если, с одной стороны, размер шага слишком мал, то движение к оптимуму будет долгим из-за необходимости расчета целевой функции в очень многих точках. С другой стороны, если, например, в алгоритме (IX, 41) шаг $h^{(0)}$ выбран слишком большим, в районе оптимума может возникнуть «рыскание», которое либо не затухает, либо затухает слишком медленно.

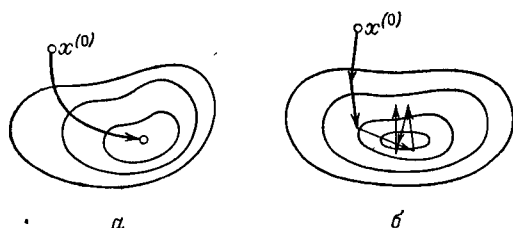


Рис. IX-12. Характер движения к оптимуму в методе градиента с малой (а) и большой (б) величиной шага.

Характер поиска оптимума при малой и большой величинах шага показан на рис. IX-12.

В методе градиента направление шага обуславливается значениями частных производных оптимизируемой функции в рассматриваемой точке. Всегда следует иметь в виду, что градиент ортогонален к поверхности постоянного уровня функции цели только в точке его вычисления, да и то с определенным приближением, поскольку производные обычно находятся с помощью приближенной формулы (IX, 33).

В точке $x^{(k+1)}$, получаемой после выполнения шага от точки $x^{(k)}$, градиент $\nabla R(x^{(k)})$ уже не ортогонален поверхности постоянного уровня целевой функции, проходящей через точку $x^{(k+1)}$. Другими словами, градиент $\nabla R(x^{(k)})$ и градиент $\nabla R(x^{(k+1)})$ отличаются по направлению, что может быть использовано в стратегии изменения шага. Например, в алгоритме (IX, 40) изменение шага Δx_j можно производить в соответствии с правилом:

$$h^{(k+1)} = \begin{cases} 2h^{(k)}, & \alpha^{(k)} < \alpha_{\min} \\ h^{(k)}, & \alpha_{\min} < \alpha^{(k)} < \alpha_{\max} \\ \frac{1}{3} h^{(k)}, & \alpha^{(k)} > \alpha_{\max} \end{cases} \quad (\text{IX}, 43)$$

где $\alpha^{(k)}$ — угол поворота градиента на k -ом шаге, определяемый выражением:

$$\cos \alpha^{(k)} = \frac{\sum_{j=1}^n \frac{\partial R(x^{(k)})}{\partial x_j} \cdot \frac{\partial R(x^{(k-1)})}{\partial x_j}}{\sqrt{\sum_{j=1}^n \left(\frac{\partial R(x^{(k)})}{\partial x_j} \right)^2 \sum_{j=1}^n \left(\frac{\partial R(x^{(k-1)})}{\partial x_j} \right)^2}} \quad (\text{IX}, 44)$$

$\alpha_{\min}$, $\alpha_{\max}$ — допустимые пределы угла поворота градиента.

Достоинством алгоритма изменения шага (IX, 43) является то, что при его использовании возможно как увеличение, так и уменьшение величины шага. При этом увеличение и уменьшение шага Δx_j производятся не в кратном соотношении, для того чтобы уменьшить вероятность возникновения «рыскания» при резких изменениях направления градиента.

Можно также применять алгоритм изменения шага, рассмотренный для метода релаксации. Однако он обладает недостатком, не позволяющим увеличивать шаг в процессе поиска.

Момент окончания поиска определяется по выполнению некоторых предварительно заданных условий. Один из возможных вариантов окончания поиска для случая, когда оптимум находится внутри области X , заключается в проверке на каждом шаге соотношения (IX, 38).

Другой вариант определения момента окончания поиска заключается в следующем. После каждой серии с заданным числом s шагов запоминается значение целевой функции. Число шагов s в серии выбирается таким, чтобы при выполнении серий на начальных этапах поиска происходило заметное изменение значения целевой функции. Если последующая серия шагов дает меньшее значение целевой функции, то поиск продолжается. Если же при выполнении следующей серии меньшее значение целевой функции не находится, то поиск прекращается и полученное наименьшее значение рассматривается как искомый оптимум.

Недостатком градиентного поиска является то, что при его использовании можно обнаружить только локальный минимум целевой функции. Для того чтобы найти у функции другие локальные минимумы, необходимо производить поиск из других начальных точек. Таким образом, с помощью метода градиента каждый локальный минимум целевой функции можно охарактеризовать некоторой областью «притяжения», обладающей тем свойством, что при задании начального состояния в границах этой области метод градиента всегда приводит в один и тот же локальный минимум.

Метод наискорейшего спуска

При применении метода градиента на каждом шаге нужно определять значения всех частных производных оптимизируемой функции по всем независимым переменным. Если расчет одного

значения данной функции требует значительного объема вычислений, то время поиска оптимума, особенно при большом числе независимых переменных, может быть весьма большим.

Метод релаксации в этом смысле обладает определенными достоинствами, так как при спуске вдоль выбранного осевого направления не требует вычисления производных. Однако в данном случае движение происходит не в оптимальном направлении, поскольку градиент в общем случае не совпадает с осевым направлением.

Сочетание основных идей методов релаксации и градиента даст метод *наискорейшего спуска*, который заключается в следующем. После того как в начальной точке найден градиент оптимизируемой функции и тем самым определено направление ее наиболее быстрого убывания в указанной точке, в данном направлении делается шаг спуска. Если значение функции в результате этого шага уменьшилось, производится очередной шаг в том же направлении, и так до тех пор, пока в этом направлении не будет найден минимум, после чего вычисляется градиент и определяется новое направление наискорейшего убывания целевой функции.

В сопоставлении с методом градиента метод наискорейшего спуска оказывается более выгодным из-за сокращения объема вычислений. По существу метод наискорейшего спуска по вычислительным затратам эквивалентен методу релаксации, однако выгодно отличается от него тем, что по крайней мере первые шаги после определения градиента производятся в оптимальном направлении. Очевидно, что чем менее резко изменяется направление градиента целевой функции, тем выгоднее использовать метод наискорейшего спуска по сравнению с методом градиента, т. е. вдали от оптимума. Вблизи оптимума направление градиента меняется резко, поэтому указанный метод автоматически переходит в метод градиента, так как минимум по каждому направлению находится за небольшое число шагов.

На рис. IX-13 показаны возможная траектория движения к оптимуму при применении метода наискорейшего спуска и траектория движения к оптимуму при использовании метода градиента.

Важной особенностью метода наискорейшего спуска является то, что при его применении каждое новое направление движения к оптимуму ортогонально предшествующему. Это объясняется тем, что движение в одном направлении производится до тех пор, пока направление движения не окажется касательным к какой-либо линии постоянного уровня (рис. IX-13, а). Тем самым метод наискорейшего спуска имеет сходство с методом релаксации, для которого новое направление также ортогонально предшествующему; однако в отличие от метода релаксации скорость сходимости к оптимуму не зависит от ориентации системы координат.

В качестве критерия окончания поиска могут использоваться те же условия, что и в рассмотренных выше методах. Кроме того,

можно также применять условие окончания поиска в форме соотношения

$$\sqrt{\sum_{j=1}^n (x_j^{(A)} - x_j^{(B)})^2} < \varepsilon \quad (\text{IX, 45})$$

причем $x_j^{(A)}$ и $x_j^{(B)}$ — координаты начальной и конечной точек последнего отрезка спуска (рис. IX-14).

Этот же критерий может использоваться в сочетании с контролем значений целевой функции в точках $x^{(A)}$ и $x^{(B)}$:

$$|R(x^{(A)}) - R(x^{(B)})| < \varepsilon \quad (\text{IX, 46})$$

Совместное применение условий (IX, 45) и (IX, 46) оправдано в тех случаях, когда оптимизируемая функция имеет резко выраженный минимум.

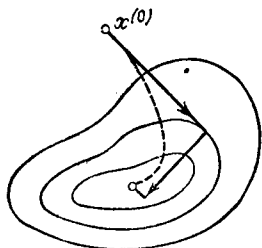


Рис. IX-13. Характер движения к оптимуму в методе наискорейшего спуска и методе градиента.

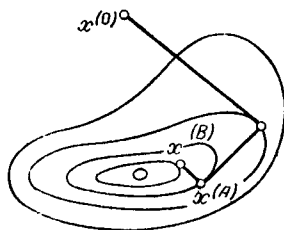


Рис. IX-14. К определению окончания поиска в методе наискорейшего спуска.

Относительно выбора стратегии изменения шага остаются справедливыми все релаксации. Рассмотрим еще один метод выбора величины шага в заданном направлении, в котором используется информация, полученная на предыдущих шагах по этому же направлению. Сущность метода заключается в том, что в процессе движения вдоль заданного направления характер изменения целевой функции аппроксимируется по результатам трех последних шагов полиномом второго порядка.

При движении по заданному направлению целевая функция может считаться функцией переменного параметра h , характеризующего положение точки x на заданной прямой. Рассмотрим значения целевой функции при трех последовательных значениях h : h_1, h_2 и h_3 (рис. IX-15).

Через точки $R(h_1), R(h_2)$ и $R(h_3)$ можно провести параболу

$$R'(h) = a(h - h_1)^2 + b(h - h_1) + c \quad (\text{IX, 47})$$

коэффициенты a, b, c которой определяются решением системы уравнений

$$R'(h_1) = R(h_1) \quad R'(h_2) = R(h_2) \quad R'(h_3) = R(h_3) \quad (\text{IX, 48})$$

и равны

$$\left. \begin{aligned} a &= \frac{R(h_3)(h_2 - h_1) - R(h_2)(h_3 - h_1) + R(h_1)(h_3 - h_2)}{(h_3 - h_2)(h_3 - h_1)(h_2 - h_1)} \\ b &= \frac{[R(h_3) - R(h_1)](h_2 - h_1)^2 - [R(h_2) - R(h_1)](h_3 - h_1)^2}{(h_3 - h_2)(h_3 - h_1)(h_2 - h_1)} \\ c &= R(h_1) \end{aligned} \right\} \quad (\text{IX}, 49)$$

Уравнение (IX, 47) позволяет найти значение $h_{\min}$, при котором достигается минимум $R'(h)$:

$$h_{\min} = h_1 - \frac{b}{2a} \quad (\text{IX}, 50)$$

Полученное таким образом значение $h_{\min}$ применяется в качестве задаваемого следующего значения h_4 . Так как минимум $R'(h)$, вообще говоря, не совпадает с минимумом $R(h)$, при определении следующего значения h_5 используется новая аппроксимация для точек h_2, h_3, h_4 и т. д.

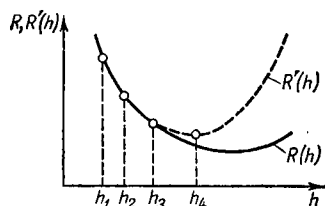


Рис. IX-15. Определение оптимального шага спуска с использованием аппроксимирующего полинома

Изложенный метод расчета величины шага в некоторых случаях значительно ускоряет поиск оптимума. Его можно также применять и в методе релаксации при поиске минимума для осевого направления.

Поиск оптимума при известном аналитическом выражении градиента

Если можно найти аналитически производные оптимизируемой функции, задача поиска оптимума представляется как задача интегрирования системы дифференциальных уравнений

$$\frac{dx_j}{dt} = - \frac{\partial R(x)}{\partial x_j} \quad j = 1, \dots, n \quad (\text{IX}, 51)$$

являющейся непрерывным аналогом дискретного алгоритма градиентного метода поиска.

Для интегрирования системы (IX, 51) могут быть использованы стандартные программы, имеющиеся для большинства цифровых вычислительных машин. Если же вид производных $\partial R / \partial x_j$ не слишком сложен, то для решения задачи отыскания оптимума функции $R(x)$ можно с успехом применять и аналоговые вычислительные машины.

Решение задачи оптимизации определяется интегрированием системы (IX, 51) как стационарная точка системы уравнений, т. е. совокупность значений переменных x_j , не изменяющихся в процессе продолжающегося интегрирования, при этом получается траектория $x(t)$, приводящая к оптимуму кратчайшим путем из заданного исходного состояния. Эта траектория при практическом решении задач оптимизации может иногда иметь самостоятельный интерес.

Пример IX-1. Найти минимум критерия оптимальности:

$$R = x_1^2 - x_1 x_2 + x_2^2 + x_1 - x_2 \quad (\text{IX, 52})$$

Решение. Система уравнений (IX, 51), интегрированием которой можно определить положение минимума, имеет в данном случае вид:

$$\left. \begin{aligned} \frac{dx_1}{dt} &= -\frac{\partial R}{\partial x_1} = -2x_1 + x_2 - 1 \\ \frac{dx_2}{dt} &= -\frac{\partial R}{\partial x_2} = x_1 - 2x_2 + 1 \end{aligned} \right\} \quad (\text{IX, 53})$$

и ее решение легко может быть найдено как сумма частного решения неоднородной системы (IX, 53) и общего решения однородной системы:

$$\left. \begin{aligned} \frac{dx_{10}}{dt} &= -2x_{10} + x_{20} \\ \frac{dx_{20}}{dt} &= x_{10} - 2x_{20} \end{aligned} \right\} \quad (\text{IX, 54})$$

Частное решение неоднородной системы (IX, 53) ищется в форме постоянных из решения системы линейных уравнений

$$\left. \begin{aligned} -2\bar{x}_1 + \bar{x}_2 - 1 &= 0 \\ \bar{x}_1 - 2\bar{x}_2 + 1 &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (\text{IX, 55})$$

которая в данном случае представляет собой не что иное, как конкретное выражение необходимого условия экстремума функции (IX, 52):

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial R(x_1, x_2)}{\partial x_1} &= 0 \\ \frac{\partial R(x_1, x_2)}{\partial x_2} &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (\text{IX, 56})$$

Решением системы уравнений (IX, 55) будет:

$$\bar{x}_1 = -\frac{1}{3} \quad \bar{x}_2 = \frac{1}{3} \quad (\text{IX, 57})$$

Общее решение однородной системы дифференциальных уравнений (IX, 54) имеет вид [1]:

$$\left. \begin{aligned} x_{10}(t) &= A_1 \exp(\lambda_1 t) + B_1 \exp(\lambda_2 t) \\ x_{20}(t) &= A_2 \exp(\lambda_1 t) + B_2 \exp(\lambda_2 t) \end{aligned} \right\} \quad (\text{IX, 58})$$

Здесь A_1, A_2, B_1 и B_2 — константы, из которых только две независимы, а λ_1 и λ_2 — корни характеристического уравнения системы (IX, 54):

$$\begin{vmatrix} -(2+\lambda) & 1 \\ 1 & -(2+\lambda) \end{vmatrix} = 0 \quad (\text{IX, 59})$$

записываемого после раскрытия определителя как

$$\lambda^2 + 4\lambda + 3 = 0 \quad (\text{IX}, 60)$$

Решением уравнения (IX, 60) являются значения:

$$\lambda_1 = -1 \quad \lambda_2 = -3 \quad (\text{IX}, 61)$$

Поскольку найденные значения λ_1 и λ_2 отрицательны, легко видеть, что общее решение однородной системы уравнений (IX, 58) при $t \rightarrow \infty$ стремится к нулю. Поэтому значения переменных в стационарной точке решения описываются частным решением неоднородной системы (IX, 53) и равны значениям (IX, 57), которые и определяют положение точки минимума функции (IX, 52).

Пример IX-2. Найти экстремум критерия оптимальности

$$R = x_1^2 - 3x_1x_2 + x_2^2 + x_1 - x_2 \quad (\text{IX}, 62)$$

соответствующий точке минимума.

Решение. Система уравнений (IX, 51) имеет в данном случае вид:

$$\left. \begin{aligned} \frac{dx_1}{dt} &= -\frac{\partial R}{\partial x_1} = -2x_1 + 3x_2 - 1 \\ \frac{dx_2}{dt} &= -\frac{\partial R}{\partial x_2} = 3x_1 - 2x_2 + 1 \end{aligned} \right\} \quad (\text{IX}, 63)$$

Частное решение системы уравнений (IX, 63), определяющее точку, в которой выполняются необходимые условия экстремума функции (IX, 62), будет:

$$\bar{x}_1 = \frac{1}{5} \quad \bar{x}_2 = \frac{1}{5} \quad (\text{IX}, 64)$$

Характеристическое уравнение однородной системы уравнений, соответствующей неоднородной системе (IX, 63), записывается как

$$\begin{vmatrix} -(2 + \lambda) & 3 \\ 3 & -(2 + \lambda) \end{vmatrix} = \lambda^2 + 4\lambda - 5 = 0 \quad (\text{IX}, 65)$$

а его решение имеет вид:

$$\lambda_1 = 1 \quad \lambda_2 = -5 \quad (\text{IX}, 66)$$

Одно из найденных значений корней характеристического уравнения имеет положительный знак, и следовательно, общее решение однородной системы (IX, 54) не будет стремиться к нулю при $t \rightarrow \infty$.

Таким образом, стационарной точки решения системы уравнений (IX, 63) не существует, поэтому у функции (IX, 62) отсутствует экстремальная точка, в которой данная функция имеет минимум. Можно также показать, что значения (IX, 64) определяют «седло» функции (IX, 62).

Заметим, что в приведенных выше примерах вопрос о существовании экстремума целевой функции решался анализом устойчивости решения системы дифференциальных уравнений, в связи с чем представляет интерес рассмотреть связь этих условий с достаточными условиями экстремума.

Ограничимся анализом случая двух переменных и критерия оптимальности, заданного в виде квадратичной формы от этих переменных:

$$R = \frac{1}{2} a_{11}x_1^2 + a_{12}x_1x_2 + \frac{1}{2} a_{22}x_2^2 + b_1x_1 + b_2x_2 \quad (\text{IX}, 67)$$

С одной стороны, вычисляя значения частных производных

$$\frac{\partial^2 R}{\partial x_1^2} = a_{11} \quad \frac{\partial^2 R}{\partial x_1 \partial x_2} = a_{12} \quad \frac{\partial^2 R}{\partial x_2^2} = a_{22} \quad (\text{IX}, 68)$$

через которые выражаются достаточные условия (III, 16) и (III, 17) минимума функции (IX, 67) в экстремальной точке, получим:

$$a_{11}a_{22} - a_{12}^2 > 0 \quad a_{11} > 0 \quad (\text{IX}, 69)$$

С другой стороны, система дифференциальных уравнений (IX, 51) для функции (IX, 67) имеет вид:

$$\left. \begin{aligned} \frac{dx_1}{dt} &= -\frac{\partial R}{\partial x_1} = -a_{11}x_1 - a_{12}x_2 - b_1 \\ \frac{dx_2}{dt} &= -\frac{\partial R}{\partial x_2} = -a_{12}x_1 - a_{22}x_2 - b_2 \end{aligned} \right\} \quad (\text{IX}, 70)$$

Характеристическое уравнение для этой системы может быть записано как

$$\begin{vmatrix} -(a_{11} + \lambda) & -a_{12} \\ -a_{12} & -(a_{22} - \lambda) \end{vmatrix} = \lambda^2 + (a_{11} + a_{22})\lambda + a_{11}a_{22} - a_{12}^2 = 0 \quad (\text{IX}, 71)$$

Корни уравнения (IX, 71) имеют отрицательные действительные части и система уравнений будет устойчивой (существует стационарная точка решения) лишь при положительных коэффициентах этого уравнения, т. е.

$$\left. \begin{aligned} a_{11}a_{22} - a_{12}^2 &> 0 \\ a_{11} + a_{22} &> 0 \end{aligned} \right\} \quad (\text{IX}, 72)$$

Первое из условий (IX, 72) в точности совпадает с первым условием (IX, 69). Нетрудно показать, что и вторые условия в соотношениях (IX, 69) и (IX, 72) эквивалентны. Действительно, требование положительности величины a_{11} в условии (IX, 69) требует также и положительности a_{22} , так как иначе нарушается первое условие (IX, 69). Следовательно, из условия (IX, 69) вытекает, что сумма $a_{11} + a_{22}$ должна быть положительной.

Обратно, второе условие (IX, 72) означает, что по крайней мере одна из величин a_{11} или a_{22} должна быть положительной. Кроме того, из первого условия (IX, 72) следует, что a_{11} и a_{22} должны иметь один знак, т. е. обе величины a_{11} и a_{22} положительны, и, таким образом, условия (IX, 69) и (IX, 72) эквивалентны.

При решении практических задач исследование устойчивости системы решений (IX, 51) в общем случае может оказаться весьма сложным. Поэтому проще всего попытаться найти решение данной системы в достаточно большом интервале интегрирования. При этом в процессе интегрирования не лишним является контроль изменения величины оптимизируемой функции $R[x(t)]$, который может показать наличие или отсутствие стационарной точки в процессе

наблюдения за значением $R(t)$. Разумеется, при этом возможны также случаи, когда при различных начальных условиях системы уравнений (IX, 51) будут определяться разные локальные минимумы функции $R(x)$.

Метод «тяжелого шарика»

Уравнение, описывающее движение тела с конечной массой («тяжелого шарика») в среде, обладающей вязкостью, под действием силы — $\nabla R(x)$, величина и направление которой зависят от местонахождения тела в рассматриваемый момент времени, может быть представлено в виде

$$\rho \frac{d^2x}{dt^2} + \nu \frac{dx}{dt} + \nabla R(x) = 0 \quad (\text{IX, 73})$$

причем ν — коэффициент вязкого трения.

Уравнение (IX, 73), как и аналог метода градиента в форме уравнений (IX, 51), можно применять для отыскания экстремальных точек целевой функции $R(x)$, определяемых его интегрированием. Воспользовавшись конечно-разностными выражениями для производных, нетрудно записать также и дискретный аналог этого алгоритма.

Наличие коэффициента ρ (массы «тяжелого шарика») в уравнении (IX, 73) обеспечивает определенную инерционность процессу поиска оптимума, которая проявляется в том, что при применении этого алгоритма появляется возможность «проскакивать» небольшие локальные минимумы целевой функции. Задаваясь различными значениями параметров ρ и ν , можно так «отрегулировать» процесс поиска, что в результате его находится глобальный минимум целевой функции.

Поэтому метод «тяжелого шарика» и используется в задачах с целевыми функциями, имеющими несколько локальных экстремумов, и в этом смысле может быть охарактеризован как *метод поиска глобального экстремума*.

3. БЕЗГРАДИЕНТНЫЕ МЕТОДЫ ДЕТЕРМИНИРОВАННОГО ПОИСКА

До сих пор рассматривались методы поиска оптимума, в которых для определения величины и направления шага поиска применялся предварительный анализ производных оптимизируемой функции по всем независимым переменным задачи. Нахождение производных при наличии трудновычислимого критерия оптимальности связано с необходимостью выполнения большого объема вычислений, что может привести к существенному увеличению времени поиска, особенно при большом числе независимых переменных.

Существует другая группа методов — *безградиентные методы*, использующие в процессе поиска информацию, получаемую не при

анализе производных, а от сравнительной оценки критерия оптимальности в результате выполнения очередного шага.

Некоторые из этих методов целесообразно применять в сочетании с градиентными методами, что позволяет иногда построить довольно эффективные алгоритмы для решения задач нелинейного программирования.

Безградиентные методы, кроме того, по характеру наиболее пригодны для оптимизации действующих промышленных и лабораторных установок в условиях отсутствия математического описания объекта оптимизации. Неизбежные погрешности при измерениях величин, характеризующих значение целевой функции для действующего объекта, могут привести к существенным ошибкам в определении направления движения к оптимуму с помощью градиентных методов, поскольку при расчетах производной как разности значений критерия оптимальности ошибка может достигать сотен процентов даже при небольшой относительной погрешности вычислений значения критерия оптимальности. В таких случаях целесообразнее выполнить несколько измерений критерия оптимальности в одной и той же точке (чтобы найти наиболее вероятное его значение), чем провести столько же замеров в различных точках, необходимых для расчета производных.

Прежде чем перейти к изложению методов многомерного поиска, рассмотрим также ряд алгоритмов *одновременного поиска*, т. е. поиска экстремума функции одной переменной, которые часто используются не только как самостоятельные методы оптимизации, но также и как вспомогательные (например, при спуске по направлению) в многомерных методах оптимизации.

Метод локализации экстремума функции одной переменной

Предположим, что задача состоит в определении положения экстремума функции одной переменной на интервале $[a, b]$. Для решения этой задачи разобьем весь интервал на N равных частей. На рис. IX-16 показано такое разбиение для $N = 4$. На границах всех подынтервалов, включая конечные точки интервала $[a, b]$, вычисляются значения функции $R(x)$.

Среди полученных значений $R(x^{(k)})$ ($k = 0, \dots, 4$) находится то, которое соответствует типу отыскиваемого экстремума. Например, при отыскании минимума функции $R(x)$ (рис. IX-16) наименьшее значение $R(x^{(k)})$ среди вычисленных значений $R(x^{(k)})$ ($k = 0, \dots, 4$) будет в точке $x^{(3)}$.

Далее выбирается новый интервал, включающий два подынтервала с наименьшим вычисленным значением функции $R(x^{(k)})$ на их общей границе. На рис. IX-16 таким интервалом является $[x^{(2)}, x^{(4)}]$. Очевидно, что поскольку на границах нового интервала значение функции $R(x)$ больше, чем в его середине, минимум расположен в интервале $[x^{(2)}, x^{(4)}]$. Тем самым искомый минимум

локализован в интервале, размеры которого в 2 раза меньше исходного.

Применяя к новому интервалу тот же прием разбиения и вычисляя значение $R(x)$ на границах полученных подынтервалов, можно еще более сузить интервал, где находится искомый минимум. Повторяя эту процедуру достаточное число раз, получим необходимую точность определения

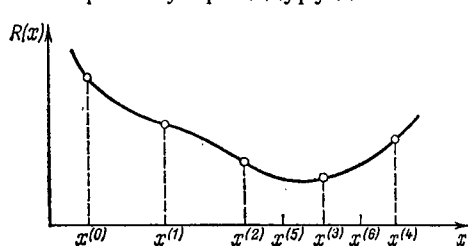


Рис. IX-16. Одномерный поиск методом локализации экстремума.

положения оптимума.

Нетрудно показать, что наилучшие результаты поиска могут быть достигнуты в том случае, если используется разбиение на четыре подынтервала ($N = 4$). При этом для каждого разбиения нужно вычислять значения целевой функции только в двух новых точках, так как

ее значения на концах нового интервала и в его середине известны из предыдущих расчетов.

Абсолютная ошибка в нахождении положения экстремума с увеличением числа точек, в которых вычисляется значение целевой функции, определяется выражением

$$\Delta(b-a)2^{\frac{s-1}{2}} \quad (\text{IX, 74})$$

причем s — число расчетов значений целевой функции, которое в используемом методе может быть только нечетным. Так, при $s = 21$ относительная ошибка в нахождении положения экстремума составляет:

$$\frac{|\Delta|}{b-a} = 2^{-10} \approx 0,001 \quad (\text{IX, 74a})$$

Метод «золотого сечения»

Оказывается, что еще лучшие результаты могут быть получены, если деление интервала $[a, b]$, в котором находится экстремум, производить не на целое число частей, а в определенном иррациональном отношении.

Допустим, что на концах интервала $[a, b]$, т. е. при $x^{(0)} = a$ и $x^{(3)} = b$, а также в двух некоторых внутренних его точках $x^{(1)}$ и $x^{(2)}$ значения функции $R(x)$ известны. Это дает возможность выбрать один из подынтервалов $[x^{(0)}, x^{(2)}]$ или $[x^{(1)}, x^{(3)}]$, где будет локализовано экстремальное значение функции $R(x)$.

Предположим, что экстремум локализован в интервале $[x^{(1)}, x^{(3)}]$ (рис. IX-17). Поставим теперь задачу, как выбрать точку $x^{(4)}$ внутри интервала $[x^{(1)}, x^{(3)}]$, чтобы точки $x^{(2)}$ и $x^{(4)}$ делили интервал $[x^{(1)}, x^{(3)}]$ в таком отношении, в каком точки $x^{(1)}$ и $x^{(2)}$ делят исход-

ный интервал $[x^{(0)}, x^{(3)}]$. Очевидно, что это накладывает определенные условия и на выбор точек $x^{(1)}$ и $x^{(2)}$ внутри исходного интервала $[x^{(0)}, x^{(3)}]$.

Естественно принять, что длины подынтервалов $[x^{(0)}, x^{(2)}]$ и $[x^{(1)}, x^{(3)}]$ одинаковы, т. е.

$$x^{(2)} - x^{(0)} = x^{(3)} - x^{(1)} \quad (\text{IX, 75})$$

и, следовательно, интервалы $[x^{(0)}, x^{(1)}]$ и $[x^{(2)}, x^{(3)}]$ также равны.

Введем обозначение:

$$y_1 = x^{(1)} - x^{(0)} = x^{(3)} - x^{(2)} \quad (\text{IX, 76})$$

Тогда для интервала $[x^{(1)}, x^{(3)}]$ потребуем также, чтобы его подынтервалы $[x^{(1)}, x^{(2)}]$ и $[x^{(2)}, x^{(3)}]$ были равны и обозначим:

$$y_2 = x^{(2)} - x^{(1)} = x^{(3)} - x^{(4)} \quad (\text{IX, 77})$$

Для того чтобы точки $x^{(2)}$ и $x^{(4)}$ делили интервал $[x^{(1)}, x^{(3)}]$ в таком отношении, как точки $x^{(1)}$ и $x^{(2)}$ делят интервал $[x^{(0)}, x^{(3)}]$, необходимо выполнение условия:

$$\frac{y_1}{x^{(3)} - x^{(0)}} = \frac{y_2}{x^{(3)} - x^{(1)}} \quad (\text{IX, 78})$$

Обозначим длину исходного интервала $[x^{(0)}, x^{(3)}]$ через y , т. е. положим:

$$y = x^{(3)} - x^{(0)} = b - a \quad (\text{IX, 79})$$

Тогда можно записать:

$$x^{(3)} - x^{(1)} = y - y_1 \quad (\text{IX, 80})$$

$$y_2 = y - 2y_1 \quad (\text{IX, 81})$$

Подставляя выражения (IX, 79) — (IX, 80) в условие (IX, 78), после преобразований получим:

$$z^2 - 3z + 1 = 0 \quad (\text{IX, 82})$$

Здесь через z обозначено отношение

$$z = \frac{y_1}{y} = \frac{x^{(1)} - x^{(0)}}{x^{(3)} - x^{(0)}} \quad (\text{IX, 83})$$

которое, естественно, должно быть меньше 1, поэтому решением уравнения (IX, 82) будет:

$$z = \frac{3 - \sqrt{5}}{2} \approx 0,38 \quad (\text{IX, 84})$$

Найденное значение отношения z носит название *золотого сечения*. Его замечательная особенность заключается в следующем. Если в исходном делении интервала $[x^{(0)}, x^{(3)}]$ точки $x^{(1)}$ и $x^{(2)}$ отстоят на $z(x^{(3)} - x^{(0)})$ от концов, то в его любом подынтервале

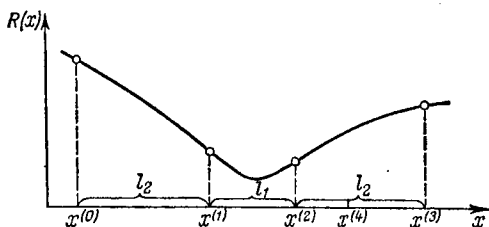


Рис. IX-17. Одномерный поиск методом „золотого сечения“.

$[x^{(0)}, x^{(2)}]$ или $[x^{(1)}, x^{(3)}]$ можно так выбрать положение следующей точки $x^{(4)}$, которая также отстоит на расстоянии $z(x^{(2)} - x^{(0)})$ от конца подынтервала, что деление подынтервала будет подобно делению исходного интервала.

Таким образом, при использовании «золотого сечения» имеется возможность с помощью одного вычисления на каждом этапе локализовать положение экстремума в интервале, длина которого составляет

$$1 - z = \frac{\sqrt{5} - 1}{2} \approx 0,62 \quad (\text{IX}, 85)$$

от длины исходного.

Алгоритм поиска экстремума при этом складывается из следующих этапов:

1. Вычисляются и запоминаются значения функции $R(x)$ на концах исходного интервала $[x^{(0)}, x^{(3)}]$, т. е. значения $R(x^{(0)})$ и $R(x^{(3)})$.
2. Вычисляется и запоминается значение функции $R(x^{(1)})$, где

$$x^{(1)} = x^{(0)} + \frac{3 - \sqrt{5}}{2} (x^{(3)} - x^{(0)}) \quad (\text{IX}, 86)$$

3. Вычисляются и запоминаются значения функции $R(x^{(2)})$, где

$$x^{(2)} = x^{(3)} - \frac{3 - \sqrt{5}}{2} (x^{(3)} - x^{(0)}) \quad (\text{IX}, 87)$$

4. По найденным значениям $R(x^{(0)})$, $R(x^{(1)})$, $R(x^{(2)})$ и $R(x^{(3)})$ определяется подынтервал, в котором локализован экстремум, состоящий из двух подынтервалов l_1 и l_2 неравной длины.

5. Внутри большего интервала l_2 находится точка, отстоящая от конца общего интервала $l_1 + l_2$ на расстоянии

$$l = (l_1 + l_2) \frac{3 - \sqrt{5}}{2} \quad (\text{IX}, 88)$$

В этой точке рассчитывается значение функции $R(x)$, после чего снова выбирается сокращенный подынтервал в интервале $l_1 + l_2$, локализуемый экстремум, т. е. вычисления повторяются, начиная с п. 4 до тех пор, пока не будет получена требуемая точность нахождения положения экстремума.

Для изложения алгоритма нетрудно вывести следующую формулу для оценки точности определения экстремума при заданном числе расчетов значений функции $R(x)$:

$$\Delta = \frac{b - a}{2} \left(\frac{\sqrt{5} - 1}{2} \right)^{s-3} \quad (\text{IX}, 89)$$

где Δ — абсолютная ошибка в определении положения экстремума после s вычислений значений $R(x)$.

Для сравнения с рассмотренным выше алгоритмом поиска делением интервала на четыре части при $s = 21$ из формулы (IX, 89) находим:

$$\frac{\Delta}{b-a} \approx \frac{1}{2} (0,62)^{18} \approx 0,9 \cdot 10^{-4} \quad (\text{IX, 89a})$$

Другими словами, при применении метода «золотого сечения» для того же числа расчетов значений $R(x)$ достигаемая точность в 10 раз выше. Для больших значений s выигрыш в точности будет еще существеннее.

Метод поиска с использованием чисел Фибоначчи

Показано, что свойства последовательности чисел Фибоначчи, описываемой рекуррентным соотношением

$$F_k = F_{k-1} + F_{k-2} \quad F_0 = F_1 = 1 \quad (\text{IX, 90})$$

можно использовать для организации оптимального поиска экстремума функции одной переменной [2]. В табл. 14 приведены некоторые из чисел Фибоначчи, рассчитанные с помощью соотношения (IX, 90).

Доказывается [2], что если требуется найти положение экстремума функции $R(x)$, определенной на интервале $[a, b]$ с абсолютной ошибкой, не превышающей

$$\Delta = \frac{b-a}{F_s} \quad (\text{IX, 91})$$

где F_s — s -ое число Фибоначчи, то для отыскания положения экстремума достаточно вычислить не более s значений функции $R(x)$. Так, например, при выполнении $s = 21$ расчетов точность определения экстремума составит:

$$\frac{\Delta}{b-a} = \frac{1}{F_{21}} \approx 0,56 \cdot 10^{-4} \quad (\text{IX, 91a})$$

т. е. оказывается более высокой, чем в приведенных ниже методах поиска делением интервала на равные части и «золотого сечения».

ТАБЛИЦА 14
Числа Фибоначчи

k	1	2	3	4	5	6	7
F_k	1	2	3	5	8	13	21
k	8	9	10	11	12	13	14
F_k	34	55	89	144	233	377	610
k	15	16	17	18	19	20	21
F_k	987	1 597	2 584	4 181	6 765	10 946	17 711

Рассмотрим теперь алгоритм поиска, использующий числа Фибоначчи. Порядок его выполнения при поиске минимума складывается из следующих этапов:

1. По заданной точности Δ , с которой необходимо найти положение экстремума функции $R(x)$ в интервале $[a, b]$, рассчитывается вспомогательное число N :

$$N = \frac{b-a}{\Delta} \quad (\text{IX, 92})$$

2. Для получения значения N находится такое число Фибоначчи F_s , чтобы выполнялось неравенство:

$$F_{s-1} < N < F_s \quad (\text{IX, 93})$$

3. Определяется минимальный шаг поиска по формуле:

$$\Delta_m = \frac{b-a}{F_s} \quad (\text{IX, 94})$$

4. Рассчитывается значение функции $R(x)$ в начале интервала, т. е. $R(a)$.

5. Следующая точка, в которой вычисляется значение $R(x)$, находится по формуле:

$$x^{(1)} = a + \Delta_m F_{s-2} \quad (\text{IX, 95})$$

6. Если этот шаг оказался удачным, т. е. $R(x^{(1)}) < R(a)$, то следующая точка определяется как

$$x^{(2)} = x^{(1)} + \Delta_m F_{s-3} \quad (\text{IX, 96})$$

При $R(x^{(1)}) > R(a)$ (шаг неудачный)

$$x^{(2)} = x^{(1)} - \Delta_m F_{s-3} \quad (\text{IX, 97})$$

7. Последующие шаги выполняются с уменьшающейся величиной шага, которая для i -го шага будет равна

$$\Delta x^{(i)} = \pm \Delta_m F_{s-i-2} \quad (\text{IX, 98})$$

в соответствии со следующим правилом. Если при выполнении шага $\Delta x^{(i)}$ значение функции в точке

$$x^{(i+1)} = x^{(i)} + \Delta x^{(i)} \quad (\text{IX, 99})$$

оказывается меньше, т. е. $R(x^{(i+1)}) < R(x^{(i)})$ (шаг удачный), то следующий $(i+1)$ -й шаг выполняется из точки

$$x^{(i+2)} = x^{(i+1)} + \Delta x^{(i+1)} \quad (\text{IX, 100})$$

Если же i -й шаг оказался неудачным, т. е. $R(x^{(i+1)}) > R(x^{(i)})$, то следующий $(i+1)$ -й шаг выполняется из точки $x^{(i)}$:

$$x^{(i+2)} = x^{(i)} - \Delta x^{(i+1)} \quad (\text{IX, 101})$$

Указанный процесс продолжается до тех пор, пока не будут исчерпаны все числа Фибоначчи в убывающей последовательности:

$$F_{s-i-2} = F_{s-i} - F_{s-i-1} \quad i = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{IX}, 102)$$

На рис. IX-18 показана процедура такого поиска при $N = 21$ ($s = 7$), что отвечает точности поиска порядка 5%. На рисунке цифрами отмечена последовательность вычисления значений функции $R(x)$. Видно, что в процессе поиска третий и пятый шаги оказываются неудачными, что вызывает изменение направления последующих шагов.

Можно показать, что алгоритм поиска с использованием чисел Фибоначчи в пределе при $s \rightarrow \infty$, т. е. при поиске с высокой точностью, совпадает с методом «золотого сечения». Это следует

из того, что, как можно доказать [2], отношение F_{s-1}/F_s очень быстро стремится к величине $1 - z$, где значение z определяется формулой (IX, 84).

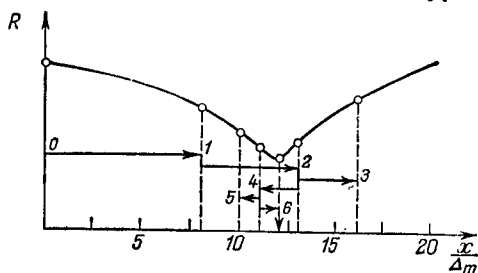


Рис. IX-18. Одномерный поиск с использованием чисел Фибоначчи.

Метод поочередного изменения переменных

Метод поочередного изменения переменных, называемый также *методом Гаусса—Зейделя*, по существу аналогичен рассмотренному выше методу релаксации. Отличие заключается лишь в том, что в этом методе не определяется осевое направление, вдоль которого значение целевой функции изменяется наиболее сильно, а поочередно изменяются все независимые переменные так, чтобы по каждой из них достигалось наименьшее (наибольшее) значение целевой функции. Очередность варьирования независимых переменных при этом устанавливается произвольно и обычно не меняется в процессе поиска. Заметим, что для двух независимых переменных оба метода поиска, т. е. метод релаксации и метод поочередного изменения переменных, совпадают.

Как и в методе релаксации, каждая уточняемая переменная варьируется до тех пор, пока в данном осевом направлении не будет найден минимум, после чего начинается процесс шагового поиска по следующему осевому направлению. Стратегия поиска минимума по каждой переменной при этом может быть также любая. В частности, можно использовать один из описанных выше методов поиска экстремума функции одной переменной.

Очевидно, что поскольку варьирование независимых переменных происходит в установленном порядке, метод их поочередного изменения приводит к оптимуму более длинным путем. Однако общий объем вычислений по сравнению с методом релаксации в

данном случае может оказаться меньше, так как при переходе к уточнению следующей переменной производные целевой функции не вычисляются.

Естественно, что недостатки метода релаксации, к которому относятся трудности поиска при наличии ограничений или особенностей целевой функции (овраги), целиком присущи и методу очередного изменения переменных. Вместе с тем, простота метода и сравнительно небольшой объем вычислений, необходимых для его реализации, обусловили его распространение в системах автоматического отыскания экстремума [3, 4].

Метод сканирования

Метод сканирования заключается в последовательном просмотре значений критерия оптимальности в ряде точек, принадлежащих области изменения независимых переменных, и нахождении среди этих точек такой, в которой критерий оптимальности имеет минимальное (максимальное) значение. Точность метода, естественно, определяется тем, насколько «густо» располагаются выбранные точки в допустимой области изменения независимых переменных.

Основным достоинством метода сканирования является то, что при его использовании с достаточно «густым» расположением исследуемых точек всегда гарантируется отыскание глобального оптимума, так как анализируется вся область изменения независимых переменных. Другое достоинство — независимость поиска от вида оптимизируемой функции.

К недостаткам метода относится, в первую очередь, необходимость вычисления значений целевой функции для большего числа точек. Это должно гарантировать, что оптимум не будет пропущен при применении данного метода поиска.

Общий недостаток градиентных методов в оптимизации, за исключением, может быть, метода «тяжелого шарика», состоит в том, что все они «застревают» в ближайшем локальном оптимуме, в область «притяжения» которого попадает выбранная начальная точка спуска. В отличие от этих методов метод сканирования никак не связан с наличием локальных оптимумов целевой функции. Поэтому его можно использовать иногда для предварительного грубого установления границ областей «притяжения» указанных оптимумов, после чего могут уже применяться градиентные методы спуска для измерения точной «глубины» каждого локального оптимума.

Наиболее простой алгоритм поиска оптимума методом сканирования, называемый еще иногда *поиском на сетке переменных*, заключается в том, что по каждой независимой переменной даются приращения в соответствующем порядке, обеспечивающем заполнение всей области изменения этих переменных равномерной и достаточно густой сеткой. В простейшем случае двух переменных x_1 и x_2 сканирование сводится к просмотру значений критерия

оптимальности при заданном значении одной переменной x_2 для ряда значений другой x_1 , которые определяются как отстоящие друг от друга на величину шага Δx_1 по переменной x_1 . После того как весь диапазон изменения переменной x_1 при заданном значении x_2 исследован и для него найдено минимальное значение критерия оптимальности, изменяется значение переменной x_2 также на величину некоторого шага Δx_2 по этой переменной и т. д. Графическое представление поиска методом сканирования при двух переменных показано на рис. IX-19.

Для произвольного числа независимых переменных шаг по каждой следующей переменной производится после того, как полностью завершён цикл по предыдущей.

Дополнительные ограничения на независимые переменные по существу не усложняют процедуры использования метода сканирования, так как в этом случае точки, которые не удовлетворяют заданным условиям, просто исключаются из рассмотрения и значения критерия оптимальности в них не вычисляются. Наличие дополнительных ограничений на независимые переменные даже ускоряет решение задачи, если, конечно, эти ограничения не заданы в виде трудновычислимых соотношений, поскольку возможный диапазон изменения при этом сужается и значения критерия оптимальности рассчитываются с меньшим числом точек.

Особенно просто обстоит дело, если ограничения заданы в виде неравенств (IX, 2б), когда приемлемость точки решается простой проверкой этих условий. Однако метод сканирования можно применить также и в случае, если ограничения имеют вид равенств (IX, 2а). Наиболее простой путь при этом состоит в замене ограничений типа

$$\varphi(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \quad (\text{IX, 103})$$

ограничением

$$|\varphi(x_1, x_2, \dots, x_n)| \leq \delta \quad (\text{IX, 104})$$

определяющим некоторую ε -окрестность гиперповерхности, описываемой уравнением (IX, 103), где и используется метод сканирования.

Другой прием, который может быть применен при ограничениях типа равенств (IX, 2а), используется тогда, когда ограничение (IX, 103) представляется в виде:

$$x_j = \psi(x_1, \dots, x_{j-1}, x_{j+1}, \dots, x_n) \quad (\text{IX, 105})$$

При этом сканирование ведется по $n - 1$ переменным, а соответствующее значение переменной x_j рассчитывается из выражения (IX, 105). Разумеется, что найденное значение x_j также

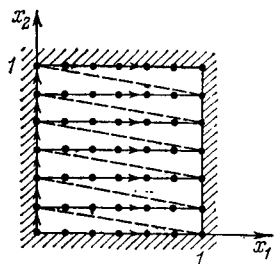


Рис. IX-19. Характер поиска в методе сканирования.

должно проверяться на допустимый диапазон изменения, который для нормализованных переменных, например, равен $[0, 1]$.

Нетрудно получить оценку вычислительных затрат при применении метода сканирования. Так, в случае поиска оптимума целевой функции при условии, что точность определения положения этого оптимума равна Δ , т. е. искомые значения нормализованных переменных не должны отличаться от истинного положения оптимума на величину, большую, чем Δ , число рассчитываемых значений целевой функции составит:

$$s = \left(\frac{1}{\Delta}\right)^n \quad (\text{IX, } 106)$$

где n — число независимых переменных решаемой задачи (размерность задачи).

Для отыскания оптимума функции двух переменных $R(x_1, x_2)$ с точностью $\Delta = 10^{-3}$ по формуле (IX, 106) находим:

$$s = (10^3)^2 = 10^6 \quad (\text{IX, } 106a)$$

Для отыскания оптимума функции трех переменных $R(x_1, x_2, x_3)$ с той же точностью получим:

$$s = (10^3)^3 = 10^9 \quad (\text{IX, } 106b)$$

Таким образом, число вычислений критерия оптимальности при определении положения оптимума методом сканирования возрастает в показательной зависимости от размерности решаемой задачи. Поэтому эффективное применение данного метода в основном ограничивается задачами невысокой размерности $n = 2-3$, если используется простейший алгоритм поиска, рассмотренный выше, для отыскания оптимума с невысокой точностью.

Существуют различные модификации метода сканирования, применяемые в основном для сокращения объема вычислений. Одна из таких модификаций заключается в том, что используется алгоритм с *переменным шагом сканирования*. Вначале величина шага выбирается достаточно большой, по возможности значительно превышающей требуемую точность определения положения оптимума, и выполняется грубый поиск, который локализует область нахождения глобального оптимума. После того как область определена, производится поиск с меньшим шагом только в пределах указанной области. Практически можно организовать целый ряд таких процедур последовательного уточнения оптимума. Необходимый объем вычислений значений целевой функции при этом существенно сокращается и может быть подсчитан по формуле

$$s = k^{-rn} \left(\frac{1}{\Delta}\right)^n + r(2k)^n \quad (\text{IX, } 107)$$

в которой n — размерность задачи; Δ — точность определения оптимума; r — число этапов уточнения поиска, на которых шаг поиска уменьшается в k раз.

Начальный шаг сетки переменных в данном случае определяется формулой:

$$\Delta_0 = k^r \Delta \quad (\text{IX}, 108)$$

Например, при поиске оптимума функции двух переменных ($n=2$) с точностью $\Delta = 10^{-3}$, используя два этапа уточнения величины шага ($r=2$) в $k=10$ раз, т. е. с начальным шагом $\Delta_0 = 0,1$, необходимый объем вычислений составит

$$s = 10^{-4} (10^3)^2 + 2 \cdot (20)^2 = 900 \quad (\text{IX}, 107a)$$

что более чем в 1000 раз сокращает объем вычислений при сканировании с постоянным шагом [см. уравнение (IX, 106a)].

Для функции трех переменных $R(x_1, x_2, x_3)$ соответственно можно найти:

$$s = 10^{-6} (10^3)^3 + 2 (20)^3 = 17000 \quad (\text{IX}, 107b)$$

т. е. выигрыш по сравнению с применением постоянного шага еще более значителен [см. уравнение (IX, 106b)].

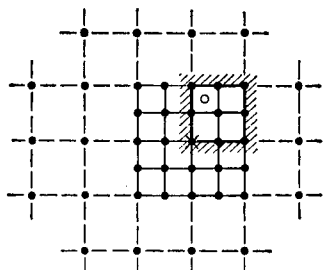


Рис. IX-20. Поиск методом сканирования с переменным шагом.

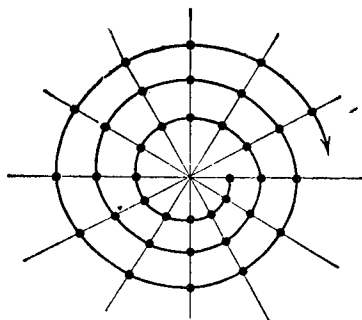


Рис. IX-21. Сканирование по спирали.

На рис. IX-20 показан поиск с переменным шагом для функции двух переменных. Кружком обозначено истинное положение оптимума, а крестом — приближение, найденное в результате грубого поиска.

Важнейшим моментом при использовании метода сканирования с переменным шагом является выбор начального грубого шага поиска. Если начальная величина шага Δ_0 выбрана слишком большой, может возникнуть опасность пропуска глобального оптимума. Если же начальный шаг выбран слишком малым, может быть велик необходимый для поиска объем вычислений. При выборе величины начального шага существенную помощь может оказать информация о поведении целевой функции, наличии локальных экстремумов и т. д.

Имеются и другие модификации метода сканирования, например *сканирование по спирали* (рис. IX-21), за счет чего также удастся сократить объем вычислений. При этом можно иногда предположить, что если при очередном витке спирали меньшее значение функции цели не найдено, оптимум расположен внутри данного витка.

Положение оптимума может быть уточнено, если перенести центр сканирования в определенную на предыдущем этапе точку наименьшего значения функции цели и новое сканирование проводить с уменьшенным приращением радиуса витка.

Следует отметить, что сканирование по спирали удобно применять лишь для случая двух независимых переменных, так как при большем числе переменных расчеты положения очередной проверяемой точки существенно усложняются. Например, для трех переменных исследуемыми точками нужно покрывать уже сферическую поверхность.

Симплексный метод

Попыткой избежать необходимости вычисления производных для определения направления наискорейшего продвижения к оптимуму и в то же время сохранить возможность достаточно быстрого движения к нему является алгоритм симплексного метода [5].

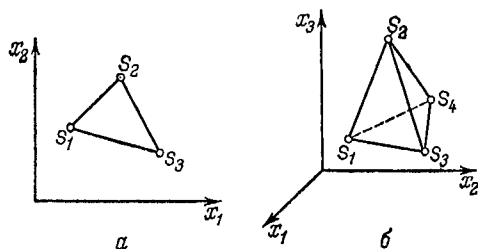


Рис. IX-22. Примеры симплексов на плоскости (а) и в пространстве (б).

Основная идея этого метода заключается в том, что по известным значениям целевой функции в вершинах выпуклого многогранника, называемого симплексом, находится направление, в котором требуется сделать следующий шаг, чтобы получить наибольшее уменьшение (увеличение) критерия оптимальности. При этом под симплексом в n -мерном пространстве понимается многогранник, имеющий ровно $n + 1$ вершин, каждая из которых определяется пересечением n гиперплоскостей данного пространства. Примером симплекса в двухмерном пространстве, т. е. на плоскости, является треугольник (рис. IX-22, а). В трехмерном пространстве симплексом будет любая четырехгранная пирамида, имеющая четыре вершины, каждая из которых образована пересечением трех плоскостей — граней пирамиды. (рис. IX-22, б).

Отметим одно свойство симплекса: против любой из вершин симплекса S_j расположена только одна грань, на которой можно

построить новый симплекс, отличающийся от прежнего расположением новой вершины S_j , тогда как остальные вершины обоих симплексов совпадают. Вершина S_j нового симплекса, вообще говоря, может находиться и по другую сторону грани от вершины S_j . Именно это свойство симплекса и обусловило возможность его применения при решении оптимальных задач, в которых требуется отыскать экстремальные точки целевых функций.

Рассмотрим наглядную иллюстрацию алгоритма симплексного метода на примере задачи отыскания наименьшего значения целевой функции двух независимых переменных с линиями постоянного уровня, изображенными на рис. IX-23.

Прежде всего производится расчет значений целевой функции в трех точках S_{10} , S_{20} и S_{30} , соответствующих вершинам симплекса (треугольника). Из найденных значений целевой функции выбирается наибольшее. В представленном на рис. IX-23 случае наибольшее значение целевой функции получается в точке S_{10} .

Далее строится новый симплекс, для чего вершина S_{10} исходного симплекса заменяется вершиной S_{11} , расположенной симметрично вершине S_{10} относительно центра грани симплекса, находящейся против вершины S_{10} . Для варианта, изображенного на рис. IX-23, построение нового симплекса осуществляется определением центра A стороны треугольника $S_{20}S_{30}$, после чего на продолжении прямой, проведенной через вершину S_{10} и точку A , откладывается отрезок $AS_{11} = AS_{10}$. Пунктирная стрелка, соединяющая прежнюю вершину с новой, показывает путь преобразования симплекса.

В новой вершине S_{11} вычисляется значение целевой функции, которое сравнивается с известными значениями для других вершин нового симплекса (S_{20} и S_{30}), и снова находится вершина S_{30} с наибольшим значением целевой функции, подлежащая исключению при построении следующего симплекса $S_{11}S_{20}S_{31}$, и т. д.

В результате применения рассмотренной процедуры исключения вершин симплексов с наибольшим значением целевой функции процесс сходится к минимальному значению. На рис. IX-23 видно, что вблизи от оптимума может возникнуть заикливание, которое для рассматриваемого случая двух переменных сводится

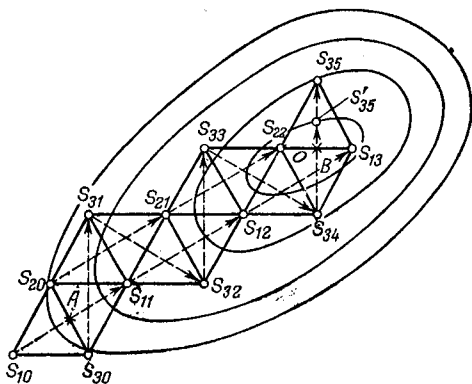


Рис. IX-23. Поиск оптимума симплексным методом.

к тому, что вновь полученная вершина S_{35} последнего симплекса $S_{13}S_{22}S_{35}$ исключается и образуется предыдущий симплекс $S_{13}S_{22}S_{34}$. Для того чтобы устранить заикливание, достаточно изменить размеры симплекса в сторону его уменьшения, что соответствует уменьшению шага спуска в районе оптимума, используемому и в градиентных методах. Наиболее просто это можно сделать, если вдоль прямой $S_{34}BS_{35}$ от точки B отложить отрезок, равный половине отрезка $S_{34}B$, в результате чего во вновь полученном деформированном симплексе $S_{13}S_{22}S'_{35}$ исключению уже будет подлежать вершина S_{13} . Если заикливание возникнет снова, размеры симплекса опять уменьшатся, пока не будет достигнута требуемая точность определения оптимума.

Критерием окончания поиска могут служить размеры симплекса. Поиск можно прекратить, например, если все ребра симплекса станут меньше заданной достаточно малой величины.

Таким образом, алгоритм симплексного метода допускает автоматическое изменение величины шага, при использовании которого вдали от оптимума возможно применение симплексов большого размера, что обеспечивает более быстрый спуск.

Случаи заикливания могут встретиться и в задачах более высокой размерности. Если на очередном шаге исключению подлежит вновь полученная вершина, то это и служит сигналом о возникновении заикливания. В этом случае размеры симплекса изменяются и поиск продолжается до обнаружения нового заикливания.

Рассмотрим порядок построения нового симплекса для задач произвольной размерности n .

Пусть вершинам $S_i (i = 1, \dots, n+1)$ исходного симплекса отвечают координаты:

$$\mathbf{x}^{(i)} = (x_1^{(i)}, x_2^{(i)}, \dots, x_n^{(i)}) \quad i = 1, \dots, n+1 \quad (\text{IX}, 109)$$

Предположим, что наибольшее значение целевой функции соответствует вершине S_j . Определим координаты вершин $\tilde{S}_j$ нового симплекса.

Согласно правилу построения вершины нового симплекса, вершина $\tilde{S}_j$ располагается в точке, симметричной вершине S_j относительно центра грани, находящейся против вершины S_j . Координаты центра этой грани $\mathbf{x}^{(A)}$ могут быть определены по формуле [6]

$$\mathbf{x}^{(A)} = \frac{1}{n} \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^{n+1} \mathbf{x}^{(i)} \quad (\text{IX}, 110)$$

где суммирование ведется только по тем векторам $\mathbf{x}^{(i)}$, которые отвечают вершинам $S^{(i)}$, образующим грань.

Вектор u , характеризующий расстояние от вершины S_j до центра противоположащей грани, в данном случае будет:

$$u = x^{(A)} - x^{(j)} \quad (\text{IX, 111})$$

Для того чтобы найти координаты вершины S_j нового симплекса, следует воспользоваться выражением

$$\tilde{x}^{(j)} = x^{(A)} + u = 2x^{(A)} - x^{(j)} \quad (\text{IX, 112})$$

подставляя в которое значение $x^{(A)}$ из формулы (IX, 110), в окончательном виде получим формулу

$$\tilde{x}^{(j)} = \frac{2}{n} \sum_{i=1}^{n+1} x^{(i)} - \left(1 + \frac{2}{n}\right) x^{(j)} \quad (\text{IX, 113})$$

определяющую координаты вершины S_j нового симплекса.

Если в процессе применения симплексного метода возникает заикливание, то для уменьшения размеров симплекса вместо формулы (IX, 112) можно пользоваться выражением

$$\tilde{x}^{(j)} = x^{(A)} + \frac{1}{2} u = \frac{3}{2} x^{(A)} - \frac{1}{2} x^{(j)} \quad (\text{IX, 114})$$

которое после подстановки в него значения $x^{(A)}$ из формулы (IX, 110) может быть представлено в виде:

$$\tilde{x}_j = \frac{3}{2n} \sum_{i=1}^{n+1} x^{(i)} - \frac{1}{2} \left(1 + \frac{3}{n}\right) x^{(j)} \quad (\text{IX, 115})$$

В качестве начального симплекса при применении симплексного метода поиска лучше всего использовать правильный симплекс со всеми вершинами и гранями, соответственно одинаково удаленными от центра симплекса. Для таких начальных симплексов поиск производится наиболее эффективно. Примерами правильных симплексов на плоскости и в трехмерном пространстве являются соответственно равносторонний треугольник и тетраэдр, образованный равносторонними треугольниками.

Доказано [5], что при применении правильных симплексов направление движения в симплексном методе совпадает с направлением градиента, если, естественно, симплекс достаточно мал. Вместе с тем, реализация данного метода не требует существенного увеличения вычислительных затрат с повышением размерности решаемой задачи, поскольку на каждом шаге рассчитывается только одно значение целевой функции независимо от числа переменных. В то же время при использовании градиентных методов поиска с возрастанием числа независимых переменных соответственно увеличивается число вычисляемых значений целевой функции при расчете производных по всем переменным.

Поиск при наличии «оврагов» целевой функции

Приведенные выше методы оптимального поиска для функций многих переменных имеют малую эффективность при наличии «оврагов» у целевой функции. Для примера рассмотрим функцию двух переменных

$$R = \alpha x_1^2 - \beta x_1 x_2 + \alpha x_2^2 \quad (\text{IX}, 116)$$

линии постоянного уровня которой изображены на рис. IX-24 и которая получена из функции

$$R' = \frac{x_1^2}{a^2} + \frac{x_2^2}{b^2} \quad (\text{IX}, 117)$$

поворотом осей координат на угол 45° .

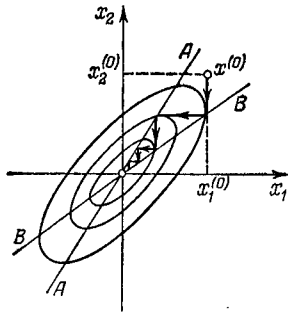
Нетрудно показать, что между коэффициентами в выражениях (IX, 116) и (IX, 117) при этом имеется следующая связь:

$$\alpha = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{a^2} + \frac{1}{b^2} \right) \quad \beta = \frac{1}{b^2} - \frac{1}{a^2} \quad (\text{IX}, 118)$$

Условием наличия «оврага» является выполнение неравенства:

$$a^2 \gg b^2 \quad (\text{IX}, 119)$$

Воспользуемся методом релаксации для отыскания минимума функции (IX, 116). Пусть начальное состояние поиска определяется точкой $x^{(0)}$ с координатами $x_1^{(0)}$ и $x_2^{(0)}$.



Движение к минимуму будет происходить по ступенчатой линии, заключенной между прямыми AA' и BB', на которых производные $\partial R / \partial x_1$ и $\partial R / \partial x_2$ обращаются в нуль. Нетрудно получить уравнения этих прямых, которые записываются в виде:

$$x_2^{(A)} = \frac{a^2 + b^2}{a^2 - b^2} x_1 \quad x_2^{(B)} = \frac{a^2 - b^2}{a^2 + b^2} x_1 \quad (\text{IX}, 120)$$

Уравнения (IX, 120) позволяют найти зависимость шага спуска по координате x_2 как функцию значения координаты x_1 :

$$\Delta x_2 = x_2^{(A)} - x_2^{(B)} = \frac{4a^2 b^2}{a^4 - b^4} x_1 \approx 4 \frac{b^2}{a^2} x_1 \quad (\text{IX}, 121)$$

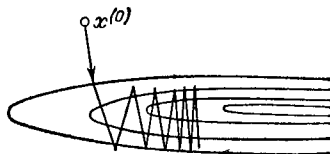
Поскольку для «оврага» рассматриваемой функции предполагается выполнение неравенства (IX, 119), размер шага, определяемый формулой (IX, 121), может стать весьма малым еще на значительном удалении от минимума и процесс поиска прекратится.

При использовании метода градиента с переменной величиной шага в случае спуска на «дно оврага» шаг может также уменьшиться настолько, что поиск прекратится на большом рас-

стоянии от минимума. Если же в методе градиента применяется постоянный шаг, то при этом возникает «рыскание» по склонам «оврага» (рис. IX-25) и перемещение к минимуму происходит с весьма малой скоростью.

Аналогичные трудности возникают и при любых других методах поиска для минимизации функции с «оврагами». Поэтому при решении оптимальных задач, целевые функции которых имеют особенности типа «оврагов», разработаны специальные методы поиска. Один из таких методов, называемый *методом шагов по «оврагу»* [7], и описывается ниже.

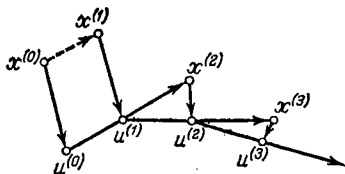
Рис. IX-25. Поиск оптимума методом градиента с постоянным шагом при наличии «оврага».



Предполагается, что все независимые переменные могут быть разбиты на две группы: к первой относятся те переменные, изменения которых существенно влияют на значение целевой функции, ко второй — переменные, при изменении которых значение целевой функции изменяется не столь значительно.

Алгоритм поиска заключается в следующем (рис. IX-26). Из некоторой начальной точки $x^{(0)}$ производится поиск минимума

Рис. IX-26. Поиск оптимума методом «шагов по оврагу».



любым методом локального поиска. Если целевая функция имеет «овраг», процесс поиска заканчивается на его «дне», в результате чего находится некоторая критическая точка $u^{(0)}$. На этом первый этап поиска заканчивается.

Далее из точки $x^{(0)}$ делается шаг в направлении наибольшего изменения переменных, несущественно влияющих на значение целевой функции. При этом получается некоторое состояние $x^{(1)}$. Из этого нового состояния повторяется процесс поиска минимума, в результате которого находится еще одна критическая точка $u^{(1)}$, расположенная на «дне оврага».

Полученные критические точки $u^{(0)}$ и $u^{(1)}$ соединяются прямой, и в направлении убывания целевой функции выполняется «шаг по оврагу». Это дает новое исходное состояние $x^{(2)}$, из которого снова производится спуск на «дно оврага» и находится критическая точка $u^{(2)}$. Затем получается состояние $x^{(3)}$ и т. д.

Описанный процесс продолжается до тех пор, пока значение целевой функции во вновь найденной критической точке $u^{(k+1)}$ не

оказывается больше, чем в предыдущей точке $u^{(k)}$. Тогда можно сделать заключение, что искомым минимум находится между точками $u^{(k-1)}$ и $u^{(k+1)}$, после чего можно повторить процесс поиска с уже меньшими «шагами по оврагу», пока не будет достигнута требуемая точность.

Разбиение переменных на группы по характеру их влияния на величину оптимизируемой функции производится либо перед началом поиска, либо во время его выполнения. Например, если в процессе первого спуска на «дно оврага» обнаружено, что некоторые переменные изменились незначительно, новое состояние $x^{(1)}$ можно найти изменением именно этой группы переменных.

Разумеется, могут представиться случаи, когда все переменные примерно одинаково влияют на значение оптимизируемой функции, но, тем не менее, «овраг» существует [см. функцию (IX, 116)]. При этом для поиска состояния $x^{(1)}$ можно сделать любой шаг из начального состояния $x^{(0)}$, после чего поиск производится так, как описано выше.

Особенностью рассмотренного метода «шагов по оврагу» является то, что если кривизна линии «оврага» небольшая, движение к оптимуму может происходить с весьма высокой скоростью. Если же кривизна линии «оврага» велика, процесс поиска может замедлиться.

4. МЕТОДЫ СЛУЧАЙНОГО ПОИСКА

Основная идея методов случайного поиска заключается в том, чтобы перебором случайных совокупностей значений независимых переменных найти оптимум целевой функции или направление движения к нему.

Существует значительное число методов случайного поиска [8], из которых далее описаны лишь некоторые, наиболее распространенные. Общим для всех методов случайного поиска является применение случайных чисел в процессе поиска. Подробные сведения о свойствах случайных чисел и их последовательностей можно найти в специальной литературе [9], а ниже приведены лишь самые необходимые сведения, используемые при рассмотрении изложенных в этом разделе методов.

Введем понятие случайного вектора

$$a = (a_1, a_2, \dots, a_n) \quad (\text{IX, 122})$$

определенного в n -мерном пространстве. Относительно вектора a предположим, что он с равной вероятностью может принимать любое направление в n -мерном пространстве и имеет длину, равную 1. Такой вектор может быть получен из последовательности случайных чисел β_j ($j = 1, \dots, n$), равномерно распределенных на числовом интервале $[-b, b]$.

Для нахождения случайного вектора a с помощью последовательности случайных чисел β_j , выразим компоненты случайного

вектора α соотношениями:

$$\alpha_j = \frac{\beta_j}{\sqrt{\sum_{k=1}^n \beta_k^2}} \quad j = 1, \dots, n \quad (\text{IX}, 123)$$

При таком способе определения случайного вектора α его длина будет равна 1, так как в силу соотношений (IX, 123) можно записать очевидное равенство:

$$\sum_{j=1}^n \alpha_j^2 = 1 \quad (\text{IX}, 124)$$

Таким образом, вектор α , компоненты которого рассчитываются по формуле (IX, 123), характеризует случайное направление в n -мерном пространстве.

Кроме понятия выбора случайного направления в n -мерном пространстве, определим также понятие выбора случайной точки в заданной области этого пространства. Под случайным выбором некоторой точки в заданной области пространства в дальнейшем понимается случайный выбор с вероятностью попадания в заданную окрестность любой точки указанной области, равной отношению объема окрестности точки к объему всей области.

Координаты случайной точки в n -мерном пространстве ξ_j ($j = 1, \dots, n$) также могут быть найдены с помощью совокупности случайных чисел β_j ($j = 1, \dots, n$), равномерно распределенной на интервале $[-b, b]$.

Пусть область пространства нормированных переменных x_j ($j = 1, \dots, n$) задана условиями:

$$0 \leq x_j \leq 1 \quad j = 1, \dots, n \quad (\text{IX}, 125)$$

В этом случае для определения координат случайной точки в заданной неравенствами (IX, 125) области можно воспользоваться соотношениями:

$$\xi_j = \frac{\beta_j + b}{2b} \quad j = 1, \dots, n \quad (\text{IX}, 126)$$

Некоторые способы получения случайных чисел β_j на вычислительных машинах рассмотрены ниже (см. стр. 523).

Слепой поиск

При использовании слепого поиска в допустимой области изменения независимых переменных, определенной неравенствами (IX, 125), случайным образом выбирается точка, в которой вычисляется значение целевой функции. Далее аналогично выбирается другая точка, где также рассчитывается значение функции цели, с которым сравнивается полученное ранее. Если новое

значение функции оказывается меньше (в случае поиска минимума) предыдущего, то это значение запоминается вместе с координатами точки, для которой оно было вычислено. Затем продолжается выборка случайных точек и сравнение значений целевой функции в этих точках с уже найденным. Каждый раз, когда получается меньшее значение целевой функции, оно запоминается вместе с соответствующими значениями координат, после чего продолжается поиск лучшего приближения к оптимуму.

Теоретически при применении такой стратегии и достаточно большом числе испытаний можно достигнуть сколь угодно высокой степени точности в определении положения оптимума. Однако на практике использование слепого метода поиска существенно ограничивается размерностью решаемой задачи и сложностью вычисления значений целевой функции. Так, например, если требуется найти положение оптимума с точностью Δ , определяемой как допустимое отклонение координат от истинной точки оптимума, то при выборе случайных точек необходимо хотя бы один раз попасть в Δ -окрестность точки оптимума.

Пусть допустимая область изменения переменных X имеет объем V_x , равный 1, а объем Δ -окрестности точки оптимума

$$V_{\Delta} = \Delta^n \quad (\text{IX}, 127)$$

Тогда вероятность попадания случайной точки в Δ -окрестность точки оптимума будет:

$$p_{\Delta}^{(1)} = \frac{V_{\Delta}}{V_x} = \Delta^n \quad (\text{IX}, 128)$$

Если теперь производится s выборок случайных точек, вероятность попадания хотя бы одной точки в заданную Δ -окрестность оптимума $P_{\Delta}(s)$ в соответствии с правилами исчисления вероятностей [9] составляет:

$$P_{\Delta}(s) = 1 - [1 - p_{\Delta}(1)]^s = 1 - (1 - \Delta^n)^s \quad (\text{IX}, 129)$$

Из формулы (IX, 129) определяется число выборок случайных точек s , необходимое для того, чтобы с вероятностью p_{Δ} можно было утверждать, что найденное положение оптимума с точностью до Δ соответствует истинному:

$$s = \frac{\ln(1 - p_{\Delta})}{-\ln(1 - \Delta^n)} \approx \left(\frac{1}{\Delta}\right)^n \ln \frac{1}{1 - p_{\Delta}} \quad (\text{IX}, 130)$$

Так, например, для $n = 2$ и $p_{\Delta} = 1/2$, т. е. для уверенности наполовину в том, что положение оптимума определено с точностью $\Delta = 10^{-3}$, нужно выполнить не менее

$$s = (10^3)^2 \ln 2 = 1,4 \cdot 10^6 \quad (\text{IX}, 130a)$$

выборок случайных точек.

Таким образом, в методе слепого поиска число требуемых вычислений значений целевой функции весьма резко увеличивается с возрастанием размерности решаемой задачи. Аналогичные проблемы уже встречались при рассмотрении поиска оптимума методом сканирования, где для устранения трудностей с размерностью иногда может использоваться поиск с переменным шагом сканирования. Точно такой же пример можно применить и в методе слепого поиска, если после выполнения определенной серии проб дальнейший поиск (уточнение) производить в некоторой суженной области, охватывающей найденную в предыдущей серии точку наименьшего значения функции цели. При этом вероятность попадания в заданную Δ -окрестность оптимума возрастает, за счет чего можно существенно сократить общий объем вычислений.

Метод случайных направлений

Алгоритм этого метода заключается в том, что из точки n -мерного пространства, для которой значение $R(x^{(k)})$ функции цели уже рассчитано, производится шаг в случайном направлении, определяемом случайным вектором $\alpha^{(k)}$. Величина шага задается параметром h . В результате находится новая точка

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + h\alpha^{(k)} \quad (\text{IX, 131})$$

в которой вычисляется значение функции цели.

Если при выполнении случайного шага $h\alpha^{(k)}$, приводящего в точку $x^{(k+1)}$, получается меньшее значение функции цели, то он считается удовлетворительным (удачным) и новое значение $R(x^{(k+1)})$ запоминается совместно с координатами точки $x^{(k+1)}$. Затем делается новый шаг $h\alpha^{(k+1)}$ в случайном направлении и т. д.

Если же случайный шаг $h\alpha^{(k)}$ оказывается неудачным, то производится выборка следующего случайного вектора α и из точки $x^{(k)}$ снова выполняется шаг. Пробные шаги из точки $x^{(k)}$ делаются до тех пор, пока не будет найдена точка $x^{(k+1)}$, в которой функция цели имеет меньшее значение, после чего пробные шаги выполняются уже из точки $x^{(k+1)}$.

Поиск заканчивается, если после выполнения серии из s шагов меньшего значения функции цели найти не удастся. Для практических расчетов число шагов в серии s часто принимается равным размерности решаемой задачи n .

Можно несколько изменить изложенный выше алгоритм поиска, используя шаг $h^{(k)}$ переменной величины. При этом эффективность поиска может несколько возрасти вследствие применения более крупного шага поиска вдали от оптимума. В данном случае после выполнения серии из s неудачных шагов поиск не заканчивают, а уменьшают только величину шага $h^{(k)}$, вслед за чем отсчет шагов в серии возобновляется. Критерием окончания поиска служит минимальный размер шага $h_{\min}$, которым и задается точность определения оптимума.

Метод случайных направлений с обратным шагом

Этот метод случайного поиска по существу представляет собой улучшение алгоритма, рассмотренного выше. Отличительной его особенностью является то, что при неудачном шаге $h\alpha^{(k)}$ из точки $x^{(k)}$ сразу производится шаг в обратном направлении — $h\alpha^{(k)}$. При достаточном удалении от оптимума такая стратегия поиска оказывается весьма эффективной. Если и обратный шаг оказывается неудачным, можно либо сделать новый случайный шаг из точки $x^{(k)}$, либо, что более целесообразно, перейти к поиску с уменьшенным размером шага. В последнем случае, правда, существует опасность замедления поиска вдали от оптимума, особенно когда оптимизируемая функция имеет «овраги».

Метод случайных направлений с линейным пересчетом

Эта модификация метода случайных направлений может использоваться, если кривизна оптимизируемой функции относительно невысока и в пределах одного шага поиска изменение целевой функции можно аппроксимировать линейной зависимостью.

Основная особенность алгоритма состоит в том, что после неудачного шага из исходной точки $x^{(k)}$ в случайном направлении из той же точки делается шаг в противоположном направлении, как и в методе с обратным шагом, но значение целевой функции в точке $x^{(k)} - h\alpha^{(k)}$ не определяется, а в соответствии с вычисленными значениями $R(x^{(k)})$ и $R(x^{(k)} + h\alpha^{(k)})$ пересчитывается в предположении линейности целевой функции по формуле

$$R(x^{(k+1)}) = R(x^{(k)} - h\alpha^{(k)}) = 2R(x^{(k)}) - R(x^{(k)} + h\alpha^{(k)}) \quad (\text{IX}, 132)$$

и дальнейший поиск производится из точки $x^{(k+1)}$.

Метод спуска «с наказанием случайностью»

Этот метод по существу представляет собой аналог метода наискорейшего спуска или метода релаксации с той разницей, что направление спуска выбирается случайным образом. После того как шаги в выбранном случайном «удачном» направлении приводят в точку минимума функции цели по данному направлению и следующий шаг оказывается неудачным, находится новое случайное направление, по которому спуск продолжается.

Следует заметить, что эффективность такого спуска вряд ли превышает эффективность методов случайных направлений, рассмотренных выше, в которых на каждом шаге определяется новое направление. Это объясняется тем, что вычислительные затраты на поиск направления на каждом шаге и спуск шагами по одному направлению отличаются лишь наличием или отсутствием выбора случайного вектора, а по сравнению с расчетом одного значения целевой функции объем вычислений, необходимый для указан-

ного выбора, может оказаться незначительным. Поэтому метод спуска «с наказанием случайностью» целесообразно использовать лишь тогда, когда для нахождения значения целевой функции не требуется больших вычислительных затрат.

Получение случайных чисел

При реализации методов случайного поиска нужно иметь возможность получать наборы случайных чисел, равномерно распределенных на некотором числовом интервале.

Наиболее простым способом получения случайных чисел является *выборка* их из специальных таблиц, которые при расчетах на цифровых вычислительных машинах должны быть предварительно введены в запоминающее устройство машины. Недостаток данного способа заключается в том, что при решении сложных задач в машину необходимо вводить большие массивы случайных чисел. С одной стороны, это требует соответствующего времени, а с другой, — что, пожалуй, важнее, приводит к излишней загрузке памяти вычислительной машины.

Другой способ получения последовательностей случайных чисел состоит в использовании специальных *датчиков* случайных чисел, действие которых основано на физических явлениях, обладающих соответствующими случайными характеристиками, например шумах радиоэлектронных ламп, радиоактивном распаде и т. д. Основной недостаток этого способа — необходимость применения специального оборудования, которое должно работать согласованно с вычислительной машиной.

Поэтому наибольшее распространение при решении различных задач методами случайного поиска нашли *программные способы* получения последовательностей случайных чисел [10], основанные на использовании определенных алгоритмов. Найденные алгоритмически последовательности случайных чисел на самом деле не являются случайными, так как не удовлетворяют необходимым статистическим оценкам [10]. Однако при решении практических задач программно получаемую последовательность чисел часто все же можно рассматривать как случайную при условии, что объем выборки случайных чисел не слишком велик. В связи с этим для случайных чисел, найденных программным путем, часто применяется название *псевдослучайные числа*.

Обычно для программных способов получения случайных чисел используется рекуррентное соотношение, с помощью которого каждое последующее число образуется из предыдущего в соответствии с правилом, задаваемым в виде набора арифметических и логических операций, выполняемых вычислительной машиной.

Основной недостаток этих методов заключается в том, что получаемая последовательность случайных чисел является периодической. Однако при решении практических задач ее период часто оказывается достаточным, чтобы это существенно не сказалось на

результатах вычислений. Вместе с тем, программные способы получения случайных чисел обладают тем неоспоримым достоинством по сравнению с использованием специальных датчиков, что позволяют при необходимости воспроизвести решение задачи. Последнее особенно важно, если задача в течение долгого времени решается на ЭВМ и возможны сбои в ее работе.

Ниже приведены различные алгоритмы получения последовательностей случайных чисел, которые можно применять для решения оптимальных задач методами случайного поиска на цифровых вычислительных машинах [10].

Метод произведений. Произвольно выбираются два числа β_0 и β_1 , имеющие одинаковое число значащих цифр m , и находится их произведение $q_2 = \beta_0 \beta_1$. Если $m > 1$, то число значащих цифр в произведении q_2 будет больше, чем m . Тогда из всех значащих цифр произведения q_2 выбираются m цифр, расположенных в середине числа q_2 , и эти цифры используются как случайное число β_2 . Следующее случайное число β_3 получается аналогично из произведения $\beta_1 \beta_2$ и т. д.

Недостатком этого метода является возможность вырождения последовательности находимых псевдослучайных чисел, т. е. возможность получения на некотором этапе случайного числа, равного нулю, после чего все остальные числа, определяемые с помощью изложенного правила, оказываются равными нулю.

Метод вычетов. Применение метода вычетов основано на том, что каждое последующее случайное число β_{k+1} образуется из предыдущего β_k согласно рекуррентному соотношению

$$\beta_{k+1} = \lambda \beta_k \pmod{N} \quad (\text{IX, 133})$$

которое означает, что число β_{k+1} равно остатку от деления на N произведения числа β_k на постоянный множитель λ .

Очевидно, что остаток от деления на N в общем случае имеет такую же разрядность, как и число N , т. е. выбором числа N по существу определяется разрядность получаемых случайных чисел.

С использованием этого алгоритма была, например, найдена следующая последовательность псевдослучайных чисел β_k , равномерно распределенных на интервале $[0,1]$:

$$\delta_{k+1} = 5^{17} \delta_k \pmod{2^{42}} \quad \delta_0 = 1 \quad (\text{IX, 133a})$$

$$\beta_k = 2^{-42} \delta_k \quad (\text{IX, 133б})$$

Первая из формул (IX, 133a) является записью алгоритма (IX, 133), вторая применяется для того, чтобы привести случайные числа к интервалу $[0,1]$. Период последовательности псевдослучайных чисел, получаемых с помощью формулы (IX, 133a), примерно равен 10^{12} .

Другая последовательность псевдослучайных чисел может быть получена с использованием рекуррентного соотношения (IX, 133), если принять:

$$\lambda = 5^{13} \quad N = 2^{38} \quad (\text{IX, 134})$$

Эта последовательность имеет период, оцениваемый числом $22 \cdot 10^{10}$.

Получение псевдослучайных последовательностей из иррациональных чисел. Этот способ основан на свойстве иррациональных чисел образовывать неупорядоченную последовательность цифр дробной части при вычислении иррационального числа с достаточно высокой степенью точности. В наиболее простой форме данный способ реализуется при расчете дробной части произведения иррационального числа z на последовательность натуральных чисел. При этом алгоритм может быть записан в виде следующей формулы:

$$\beta_k = \{kz\} \quad k = 1, 2, 3, \dots \quad (\text{IX}, 135)$$

Фигурные скобки в выражении (IX, 135) означают, что из произведения kz берется только дробная часть, которая должна вычисляться с необходимой степенью точности, характеризующей разрядность находимых псевдослучайных чисел.

Следует иметь в виду, что при использовании случайных чисел для решения задач на вычислительных машинах получаемые программным способом случайные числа всегда имеют определенную конечную разрядность. Большинство алгоритмов получения случайных чисел на вычислительных машинах с двоичной системой числения предназначены для нахождения таких чисел, у которых с равной вероятностью в каждом разряде может получиться как 1, так и 0.

Если при решении задачи применяются m -разрядные двоичные псевдослучайные числа β_k из интервала $[0,1]$, нетрудно видеть, что общее число этих чисел равно 2^m . Можно показать [11], что математическое ожидание M_m такой случайной величины выражается формулой:

$$M_m = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{2^m} \right) \quad (\text{IX}, 136)$$

т. е. зависит от разрядности случайных чисел m , а для случайной величины β , равномерно распределенной на интервале $[0,1]$, математическое ожидание M составляет:

$$M = \frac{1}{2} \quad (\text{IX}, 137)$$

Таким образом, если разрядность псевдослучайных чисел выбрана малой, то это может сказаться на степени приближения псевдослучайной последовательности к случайной.

Можно также показать [11], что дисперсия последовательности m -разрядных псевдослучайных чисел определяется выражением

$$\sigma_m^2 = \frac{1}{12} \left(1 - \frac{1}{4^m} \right) \quad (\text{IX}, 138)$$

а дисперсия равномерно распределенной последовательности случайных чисел будет

$$\sigma^2 = \frac{1}{12} \quad (\text{IX}, 139)$$

Разумеется, легко провести нормировку m -разрядных псевдослучайных чисел, чтобы сделать математическое ожидание в точности равным $1/2$, как для идеальной последовательности равномерно распределенных случайных чисел. Для этого достаточно каждое число псевдослучайной последовательности умножить на коэффициент:

$$\eta = \frac{M}{M_m} = \frac{2^m}{2^m - 1} \quad (\text{IX}, 140)$$

Однако дисперсия получаемой последовательности все равно отличается от дисперсии идеальной последовательности и составляет:

$$(\sigma'_m)^2 = \frac{1}{12} \frac{2^m + 1}{2^m - 1} \quad (\text{IX}, 141)$$

При $m \rightarrow \infty$ дисперсия $(\sigma'_m)^2$ стремится к σ^2 . Скорость приближения для нескольких значений m иллюстрируется табл. 15.

ТАБЛИЦА 15

Зависимость дисперсии последовательности m -разрядных псевдослучайных чисел от числа разрядов m

m	$(\sigma'_m)^2$	m	$(\sigma'_m)^2$	m	$(\sigma'_m)^2$	m	$(\sigma'_m)^2$
2	0,139	8	0,084	4	0,095		
3	0,107	10	0,0835	6	0,086		0,0833

Из таблицы видно, что для того, чтобы дискретность представления псевдослучайных чисел не оказывала существенного влияния на вероятностные характеристики последовательности этих чисел, количество двоичных разрядов m должно быть выбрано достаточно большим: $m > 10$.

Заметим, что использование последовательностей псевдослучайных чисел, резко отличающихся по вероятностным оценкам от идеальной последовательности равномерно распределенных случайных чисел, в некоторых случаях может существенно увеличить время решения оптимальной задачи методом случайного поиска.

71/

5. ПОИСК ОПТИМУМА В ЗАДАЧАХ С ОГРАНИЧЕНИЯМИ ТИПА РАВЕНСТВ

Решение задач нелинейного программирования с ограничениями типа равенств (IX, 2а), как правило, всегда более сложно, чем решение аналогичных задач без ограничений. В особенности

это относится к случаям, когда указанные ограничения нельзя решить аналитически в явном виде относительно хотя бы некоторых независимых переменных. Однако и тогда, когда ограничения (IX, 2a) могут быть представлены в форме соотношений:

$$x_i = \psi_i(x_1, x_2, \dots, x_{n-m}) \quad i = n-m, \dots, n \quad (\text{IX}, 142)$$

явный вид которых известен, при решении оптимальной задачи все равно необходимо учитывать ограничения, уже имеющие вид неравенств

$$\psi_i(x_1, x_2, \dots, x_{n-m}) \geq 0 \quad i = n-m+1, \dots, n \quad (\text{IX}, 143)$$

и появление которых обусловлено требованием положительности нормализованных переменных исходной оптимальной задачи.

Решение задач с ограничениями типа неравенств рассмотрено в следующем разделе, поэтому ниже всегда предполагается, что ограничения типа равенств исходной оптимальной задачи (IX, 2a) нельзя записать в форме соотношений (IX, 142).

Отыскание начальной точки спуска и коррекция нарушений ограничений в процессе поиска

В начале решения задачи поиска оптимума с ограничениями типа равенств (IX, 2a) возникает задача выбора начальной точки поиска, удовлетворяющей системе ограничений. Кроме того, в процессе поиска при выполнении некоторых шагов спуска ограничения (IX, 2a) могут быть нарушены и для выполнения следующего шага это нарушение нужно скорректировать. Обе задачи по существу эквивалентны задаче решения системы уравнений (IX, 2a). Однако они отличаются тем, что если при отыскании начальной точки поиска ее положение в n -мерном пространстве совершенно не определено и ограничено лишь неравенствами

$$0 \leq x_j \leq 1 \quad j = 1, \dots, n \quad (\text{IX}, 144)$$

характеризующими допустимую область изменения значений нормализованных переменных, то при коррекции нарушения ограничений положение искомой точки локализовано в значительно меньшей области, размеры которой не превышают величины последнего выполненного шага спуска. Поэтому целесообразно исследовать обе указанные задачи в отдельности и для их решения использовать отмеченные выше особенности.

Отыскание начальной точки спуска. Разберем один из возможных методов нахождения начальной точки спуска при наличии ограничений:

$$\psi_i(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{IX}, 145)$$

Поскольку всегда $m < n$, при определении начальной точки спуска значения $n-m$ независимых переменных можно задать произвольно. Тогда значения остальных m переменных следует вычислить решением системы m уравнений. Предположим, что

задаются значения переменных x_j ($j = m + 1, \dots, n$). Для остальных переменных в этом случае имеем систему уравнений:

$$f_i(x_1, x_2, \dots, x_m) = 0 \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{IX}, 146)$$

Для решения системы уравнений (IX, 146) можно использовать любой метод локального спуска, если с помощью уравнений (IX, 146) составить целевую функцию вида:

$$U(x_1, x_2, \dots, x_m) = \sum_{i=1}^m [f_i(x_1, x_2, \dots, x_m)]^2 \quad (\text{IX}, 147)$$

Рассмотрим теперь следующий метод наискорейшего спуска [12], для чего запишем формулу спуска по направлению градиента функции $U(x)$:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - h \nabla U(x^{(k)}) \quad (\text{IX}, 148)$$

и проанализируем функцию

$$\Phi(h) = U[x^{(k)} - h \nabla U(x^{(k)})] \quad (\text{IX}, 149)$$

определяющую значение функции $U(x)$ в зависимости от величины шага h по выбранному направлению.

Величина шага h должна быть выбрана таким образом, чтобы функция $\Phi(h)$ имела при этом значении минимум. Поэтому можно записать необходимое для данного случая условие:

$$\frac{d\Phi(h)}{dh} = 0 \quad (\text{IX}, 150)$$

или

$$\frac{d}{dh} U[x^{(k)} - h \nabla U(x^{(k)})] = 0 \quad (\text{IX}, 151)$$

Если вид функции $f_i(x)$ известен в явной форме, то условие (IX, 151) позволяет найти также в явном виде уравнение относительно одной неизвестной h , которое может быть решено любым численным методом. При этом решение существенно облегчается тем, что не обязательно определять все без исключения корни уравнения (IX, 151), так как для выбора величины шага используется лишь наименьший положительный корень указанного уравнения.

В некоторых случаях хорошие результаты можно получить при применении приближенного метода расчета значения $h^{(k)}$, заключающегося в следующем.

С учетом уравнений (IX, 146) выражение для функции $\Phi(h)$ (IX, 149) может быть представлено в виде:

$$\Phi(h) = \sum_{i=1}^m \{f_i[x^{(k)} - h \nabla U(x^{(k)})]\}^2 \quad (\text{IX}, 152)$$

Разложим функции $f_i(x)$, стоящие под знаком суммы, в ряд по степеням параметра h с точностью до членов первого порядка малости. Это можно сделать, если предположить, что h — малая

величина, степенями которой выше первой можно пренебречь. Тогда находим:

$$\Phi(h) = \sum_{i=1}^m \left[f_i(x^{(k)}) - h \sum_{j=1}^m \frac{\partial f_i(x^{(k)})}{\partial x_j} \nabla_j U(x^{(k)}) \right]^2 \quad (\text{IX, 153a})$$

Выполняя дифференцирование, вместо уравнения (IX, 151) теперь получим:

$$-2 \sum_{i=1}^m \left\{ \left[f_i(x^{(k)}) - h \sum_{j=1}^m \frac{\partial f_i(x^{(k)})}{\partial x_j} \nabla_j U(x^{(k)}) \right] \times \right. \\ \left. \times \sum_{j=1}^m \frac{\partial f_i(x^{(k)})}{\partial x_j} \nabla_j U(x^{(k)}) \right\} = 0 \quad (\text{IX, 153б})$$

откуда уже можно определить оптимальное значение $h^{(k)}$:

$$h^{(k)} = \frac{\sum_{i=1}^m \left[f_i(x^{(k)}) \sum_{j=1}^m \frac{\partial f_i(x^{(k)})}{\partial x_j} \nabla_j U(x^{(k)}) \right]}{\sum_{i=1}^m \left[\sum_{j=1}^m \frac{\partial f_i(x^{(k)})}{\partial x_j} \nabla_j U(x^{(k)}) \right]^2} \quad (\text{IX, 154})$$

Остается заметить, что выражение, стоящее в знаменателе в квадратных скобках, можно записать как произведение i -й строки матрицы

$$W(x^{(k)}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1(x^{(k)})}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1(x^{(k)})}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_1(x^{(k)})}{\partial x_m} \\ \frac{\partial f_2(x^{(k)})}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2(x^{(k)})}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_2(x^{(k)})}{\partial x_m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_m(x^{(k)})}{\partial x_1} & \frac{\partial f_m(x^{(k)})}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_m(x^{(k)})}{\partial x_m} \end{bmatrix} \quad (\text{IX, 155})$$

на вектор $\nabla U(x^{(k)})$:

$$\nabla U(x^{(k)}) = \begin{bmatrix} \nabla_1 U(x^{(k)}) \\ \nabla_2 U(x^{(k)}) \\ \vdots \\ \nabla_m U(x^{(k)}) \end{bmatrix} \quad (\text{IX, 156})$$

результат чего является, в свою очередь, компонентом некоторого вектора Y :

$$Y = W(x^{(k)}) \nabla U(x^{(k)}) \quad (\text{IX, 157})$$

Сумма квадратов компонентов вектора Y будет скалярным произведением данного вектора на самого себя, и, следовательно, в знаменателе выражения (IX, 154) стоит скалярный квадрат вектора Y .

Числитель выражения (IX, 154) при этом определении может рассматриваться как произведение вектора-функции $f(x^{(k)})$:

$$f(x^{(k)}) = \begin{bmatrix} f_1(x^{(k)}) \\ f_2(x^{(k)}) \\ \vdots \\ f_m(x^{(k)}) \end{bmatrix} \quad (\text{IX, 158})$$

на вектор Y .

Нетрудно также видеть, что вектор $\nabla U(x^{(k)})$ можно представить в виде удвоенного произведения вектора-функции $f(x^{(k)})$ (IX, 158) на транспонированную матрицу $W(x^{(k)})$ (IX, 155), т. е.

$$\nabla U(x^{(k)}) = 2W^T(x^{(k)}) f(x^{(k)}) \quad (\text{IX, 159})$$

Подставляя выражение (IX, 159) в соотношение (IX, 157) и затем в формулу (IX, 154), получим:

$$h^{(k)} = \frac{1}{2} \frac{(f^{(k)}, W^{(k)} W^{(k)T} f^{(k)})}{(W^{(k)} W^{(k)T} f^{(k)}, W^{(k)} W^{(k)T} f^{(k)})} \quad (\text{IX, 160})$$

причем индекс k у матриц $W^{(k)}$, $W^{(k)T}$ и у вектора $f^{(k)}$ указывает на то, что их значения вычисляются в точке $x^{(k)}$.

Возможно, что при произвольном задании значений $n - m$ переменных и нельзя получить решение системы (IX, 146), и этот метод приведет лишь к минимуму функции (IX, 147), не равному нулю. Тогда можно продолжить поиск решения, фиксируя при этом другую совокупность значений $n - m$ переменных.

Коррекция нарушений ограничений в процессе поиска. Задачу коррекции нарушений ограничений в процессе поиска можно также представить как задачу минимизации функции

$$H(x) = \sum_{i=1}^m [\varphi_i(x)]^2 \quad (\text{IX, 161})$$

и для ее решения использовать прием, рассмотренный выше. Однако недостатком описанного метода является необходимость задания значений $n - m$ переменных, что равносильно заданию некоторых направлений в n -мерном пространстве переменных x_j . Поиск оптимума при наличии ограничений типа равенств можно считать движением в n -мерном пространстве вдоль определенной гиперповерхности, характеризующейся пересечением гиперповерхностей, соответствующих каждому из равенств (IX, 2а). Поэтому спуск на данную гиперповерхность в процессе минимизации функции $H(x)$ (IX, 161) с фиксированными значениями некоторых не-

зависимых переменных может привести к существенному отклонению от направления движения к оптимуму целевой функции.

На основании сказанного для коррекции нарушений ограничений следует использовать методы, которые позволяют двигаться от точки нарушения ограничений в направлении кратчайшего расстояния до гиперповерхности ограничений, т. е. по направлению ее нормали. Так как величина нарушений ограничений при выполнении очередного шага спуска обычно мала, иногда можно применить следующий прием для попадания на гиперповерхность ограничений практически за один шаг.

Пусть в результате выполнения шага спуска система ограничений (IX, 2а) оказалась нарушенной. При этом для найденной точки x будут справедливы соотношения

$$\varphi_i(x) = b_i \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{IX, 162})$$

в которых по крайней мере некоторые из b_i отличны от нуля.

Предположим, что, осуществляя спуск по направлению нормали n к гиперповерхности ограничений (IX, 2а), можно попасть в точку x' , расположенную на этой гиперповерхности, для которой выполняется равенство:

$$\varphi_i(x') = 0 \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{IX, 163})$$

Точка x' связана с точкой x соотношением

$$x' = x - \delta n \quad (\text{IX, 164})$$

в котором δn — вектор, совпадающий по направлению с вектором нормали к гиперповерхности ограничений (IX, 2а).

Вектор δn может быть выражен через векторы нормалей n_i к гиперповерхностям, отвечающим каждому из равенств (IX, 2а), с помощью соотношения:

$$\delta n = \sum_{i=1}^m n_i \delta z_i \quad (\text{IX, 165})$$

Поскольку векторы n_i совпадают по направлению с градиентами к соответствующим гиперповерхностям, соотношение (IX, 165) можно также переписать в виде:

$$\delta n = \sum_{i=1}^m \nabla \varphi_i(x) \delta z_i \quad (\text{IX, 166})$$

причем z_i — коэффициенты, все (или некоторые) отличные от нуля.

Наиболее наглядно соотношение (IX, 166) можно представить для трехмерного пространства (рис. IX-27) при наличии двух ограничений:

$$\begin{aligned} \varphi_1(x_1, x_2, x_3) &= 0 \\ \varphi_2(x_1, x_2, x_3) &= 0 \end{aligned} \quad (\text{IX, 167})$$

Поверхность ограничений, определяемая уравнениями (IX, 167), в данном случае представляет собой пространственную кривую l . Совокупность векторов,

нормальных к ней, лежит в плоскости P , перпендикулярной кривой l в рассматриваемой точке O .

Поскольку векторы $\nabla\varphi_1$ и $\nabla\varphi_2$ нормальны к поверхностям, определяемым соответствующими уравнениями системы (IX, 167), то они также лежат в плоскости P . Любой другой вектор δn , расположенный в этой плоскости, можно выразить в виде линейной комбинации векторов $\nabla\varphi_1$ и $\nabla\varphi_2$:

$$\delta n = \nabla\varphi_1 \delta z_1 + \nabla\varphi_2 \delta z_2 \quad (\text{IX, 168})$$

Следовательно, формула (IX, 168) представляет собой частный случай более общей формулы (IX, 166).

Определяя из соотношения (IX, 164) точку x как

$$x = x' + \delta n \quad (\text{IX, 169})$$

и подставляя выражение (IX, 169) в уравнения (IX, 162), находим:

$$\varphi_i(x' + \delta n) = b_i \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{IX, 170})$$

Рис. IX-27. Определение нормали к поверхности ограничений.

Считая величину δn малой, что соответствует малости нарушений ограничений (IX, 2а), разложим левые части уравнений (IX, 170) в ряд по степеням величины δn с точностью до членов первого порядка малости. В результате получим следующую систему соотношений:

$$\Delta\varphi_i(x') \delta n = \varphi_i(x) \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{IX, 171})$$

которая может быть также записана в векторной форме

$$W(x') \delta n = \varphi(x) \quad (\text{IX, 172})$$

где введены обозначения:

$$W(x') = \begin{bmatrix} \frac{\partial\varphi_1(x')}{\partial x_1} & \frac{\partial\varphi_1(x')}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial\varphi_1(x')}{\partial x_n} \\ \frac{\partial\varphi_2(x')}{\partial x_1} & \frac{\partial\varphi_2(x')}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial\varphi_2(x')}{\partial x_n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial\varphi_m(x')}{\partial x_1} & \frac{\partial\varphi_m(x')}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial\varphi_m(x')}{\partial x_n} \end{bmatrix} \quad (\text{IX, 173})$$

$$\varphi(x) = \begin{bmatrix} \varphi_1(x) \\ \varphi_2(x) \\ \vdots \\ \varphi_m(x) \end{bmatrix} \quad (\text{IX, 174})$$

Величина δn , определяемая формулой (IX, 166), с помощью матрицы W (IX, 173) может быть также представлена как

$$\delta n = W^T(x') \delta z \quad (\text{IX, 175})$$

Здесь W^T — транспонированная матрица W , а δz — вектор:

$$\delta z = \begin{pmatrix} \delta z_1 \\ \delta z_2 \\ \vdots \\ \delta z_m \end{pmatrix} \quad (\text{IX, 176})$$

Подставляя выражение (IX, 175) в уравнение (IX, 172), получим уравнение, из которого можно найти вектор δz :

$$W(x') W^T(x') \delta z = \varphi(x) \quad (\text{IX, 177})$$

Это уравнение с учетом обозначения

$$A(x') = W(x') W^T(x') \quad (\text{IX, 178})$$

можно записать в виде:

$$A(x') \delta z = \varphi(x) \quad (\text{IX, 179})$$

Для решения уравнения (IX, 179) необходимо вычислить значения производных $\partial \varphi_i / \partial x_j$, определяющие W (IX, 173), в точке x' , которая по предположению находится на гиперповерхности ограничений, т. е. в искомой точке. Поскольку эта точка заранее не известна, вместо матрицы $W(x')$ в уравнении (IX, 177) приходится использовать матрицу $W(x)$, которая находится в точке x . Если нарушение ограничений невелико, то в первом приближении можно считать, что $W(x') \approx W(x)$ и решать приближенное уравнение:

$$A(x) \delta z = \varphi(x) \quad (\text{IX, 179a})$$

Уравнение (IX, 179) может быть решено, если определитель матрицы A не равен нулю. Можно показать, что определитель $|A|$, порядок которого равен m , отличается от нуля, если матрица W имеет ранг, равный m , что соответствует независимости ограничений (IX, 2a). Таким образом, если система ограничений (IX, 2a) образована линейно независимыми функциями $\varphi_i(x)$, то ранг матрицы W равен m и система уравнений (IX, 179) может быть решена. Отсюда определяется вектор δz , с помощью которого по формуле (IX, 175) находится вектор δn . Последний, в свою очередь, характеризует направление и величину шага спуска, и с его помощью можно попасть на гиперповерхность ограничений (IX, 2a) по кратчайшему пути.

Если после выполнения найденного таким образом шага ограничения (IX, 2a) еще не будут соблюдаться с заданной степенью точности, то можно сделать еще один шаг с использованием рассмотренного выше метода. Иногда, чтобы сделать еще один шаг, может оказаться достаточным выполнение только последнего этапа вычислений, т. е. решения системы уравнений (IX, 179) для новой совокупности значений $\varphi_i(x')$ ($i \equiv 1, \dots, m$), получаемой в результате первого шага.



Метод прямого поиска с возвратом

Отличительной особенностью данного метода является то, что ограничения типа равенств (IX, 2а) представляются в виде:

$$\sum_{i=1}^m [\varphi_i(x_1, x_2, \dots, x_n)]^2 < \delta \quad (\text{IX, 180})$$

причем δ является заданной величиной, определяющей некоторую окрестность гиперповерхности ограничений (IX, 2а).

Направление шага спуска при применении этого метода выбирается без учета ограничений (IX, 2а). В выбранном направлении делается один или несколько шагов вплоть до нарушения условия (IX, 180), после чего производится возврат на поверхность ограничений по направлению ее нормали. Графическое изображение процесса поиска оптимума представлено на рис. IX-28.

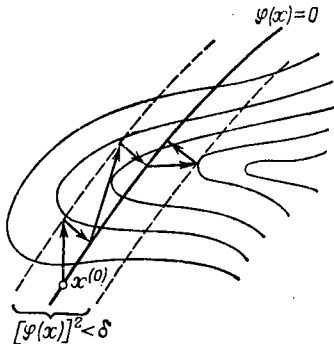


Рис. IX-28. Прямой поиск с возвратом для задач с ограничениями типа равенств.

Поиск прекращается, если расстояние между точками гиперповерхности ограничений, в которые происходит возврат после двух последующих нарушений условия (IX, 180), не превышает заданной функции.

Недостаток рассмотренного метода поиска заключается в том, что когда оптимум целевой функции расположен на значительном удалении от гиперповерхности ограничений, скорость движения к условному оптимуму, находящемуся на гиперповерхности, мала и к тому же существенно замедляется при приближении к нему.

Метод проектирования вектора-градиента [16]

Высокая скорость приближения к условному оптимуму может быть обеспечена при спуске в направлении, касательном к гиперповерхности ограничений. Касательное направление при этом определяется как направление, ортогональное вектору нормали гиперповерхности ограничений, который может быть представлен как

$$n = \sum_{i=1}^m \nabla \varphi_i'(x) z_i \quad (\text{IX, 181})$$

Условием того, что вектор u ортогонален вектору нормали, будет выполнение равенства:

$$(u, n) = 0 \quad (\text{IX, 182})$$

которое эквивалентно системе уравнений:

$$\sum_{j=1}^n u_j \frac{\partial \varphi_i(x)}{\partial x_j} = 0 \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{IX}, 183)$$

При решении задачи отыскания минимума целевой функции $R(x)$ при наличии ограничений (IX, 2a) (условный минимум) вектор u , характеризующий направление, вдоль которого производится движение по гиперповерхности ограничений, должен отвечать направлению наибо́льшего убывания функции $R(x)$. Это значит, что проекция вектора-градиента целевой функции $\nabla R(x)$ на направление вектора u должна иметь максимальное значение.

Таким образом, задача определения направления наискорейшего спуска при движении вдоль гиперповерхности ограничений, описываемой равенствами (IX, 2a), может быть сформулирована как задача максимизации функции

$$G(u) = (u, \nabla R) = \sum_{j=1}^n u_j \frac{\partial R(x)}{\partial x_j} \quad (\text{IX}, 184)$$

при ограничениях на переменные u_j ($j = 1, \dots, n$), заданных в виде равенств (IX, 183), и дополнительном условии

$$\sum_{j=1}^n (u_j)^2 = 1 \quad (\text{IX}, 185)$$

означающем, что находится только направление, т. е. вектор, имеющий единичную длину.

Для решения этой задачи можно воспользоваться методом неопределенных множителей Лагранжа (стр. 148). Составляя вспомогательную функцию:

$$\Phi = \sum_{j=1}^n u_j \frac{\partial R(x)}{\partial x_j} + \sum_{i=1}^m \lambda_i \sum_{j=1}^n u_j \frac{\partial \varphi_i(x)}{\partial x_j} + \lambda_0 \left(1 - \sum_{j=1}^n (u_j)^2 \right) \quad (\text{IX}, 186)$$

где λ_i ($i = 1, \dots, m$) — множители Лагранжа, и определяя производные от Φ по всем u_j ($j = 1, \dots, n$), получим систему уравнений

$$\frac{\partial R(x)}{\partial x_j} + \sum_{i=1}^m \lambda_i \frac{\partial \varphi_i(x)}{\partial x_j} - 2\lambda_0 u_j = 0 \quad j = 1, \dots, n \quad (\text{IX}, 187)$$

которая должна решаться совместно с уравнениями (IX, 183) и (IX, 185).

Из системы уравнений (IX, 187) можно найти:

$$u_j = \frac{\frac{\partial R(x)}{\partial x_j} + \sum_{i=1}^m \lambda_i \frac{\partial \varphi_i(x)}{\partial x_j}}{2\lambda_0} \quad (\text{IX}, 188)$$

Существенным достоинством описанного метода является большая скорость движения к условному оптимуму. Недостаток метода — довольно большой объем вычислений, который необходим для выполнения одного шага вдоль гиперповерхности. При использовании этого метода для выполнения одного шага требуется рассчитать m градиентов функции n переменных $\nabla \varphi_i(x)$ ($i = 1, \dots, m$) и $\nabla R(x)$. Кроме того, при этом нужно решить систему m линейных уравнений (IX, 189) для определения значений λ_i .

По сравнению с рассмотренным выше методом прямого поиска с возвратом, для реализации которого требуется вычисление градиента только для целевой функции при выполнении одного шага спуска, метод проектирования вектора-градиента зачастую оказывается все же более быстрым, поскольку в данном случае движение к оптимуму происходит вблизи от гиперповерхности ограничений и необходимость возврата на нее возникает значительно реже.

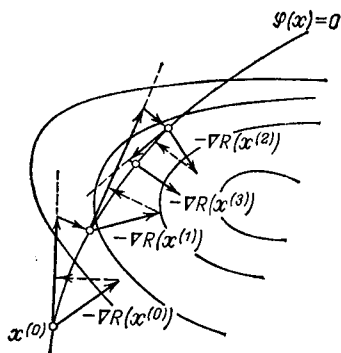


Рис. IX-29. Поиск оптимума методом проектирования вектора-градиента.

Метод обобщенного критерия

Метод обобщенного критерия, называемый также иногда *методом «штрафов»*, заключается в замене задачи отыскания условного оптимума с ограничениями типа равенств (IX, 2а) задачей на отыскание безусловного оптимума некоторой новой целевой функции. В качестве новой целевой функции обычно используется выражение:

$$Q(x) = R(x) + \alpha H(x) \quad (\text{IX, 193})$$

Здесь

$$H(x) = \sum_{i=1}^m [\varphi_i(x)]^2 \quad (\text{IX, 194})$$

и α — положительное число, величина которого должна быть выбрана достаточно большой, чтобы условие

$$\alpha \left| \frac{\partial H(x)}{\partial x_j} \right| \gg \left| \frac{\partial R(x)}{\partial x_j} \right| \quad j = 1, \dots, n \quad (\text{IX, 195})$$

выполнялось во всей области изменения независимых переменных

$$0 \leq x_j \leq 1 \quad j = 1, \dots, n \quad (\text{IX, 196})$$

за исключением лишь некоторой ε -окрестности гиперповерхности ограничений, характеризуемой условием:

$$H(x) < \delta \quad (\text{IX, 197})$$

Таким образом, согласно условию (IX, 195), при применении любого из изложенных выше методов поиска спуск из любого исходного состояния $x^{(0)}$ происходит по направлению к гиперповерхности ограничений. Лишь в ε -окрестности этой гиперповерхности, где неравенство (IX, 195) ослабляется, так как на самой гиперповерхности выполнено условие

$$\frac{dH(x)}{dx_j} = 2 \sum_{i=1}^m \varphi_i(x) \frac{\partial \varphi_i(x)}{\partial x_j} = 0 \quad (\text{IX, 198})$$

существенную роль в определении направления движения к оптимуму начинает играть градиент исходной оптимизируемой функции $R(x)$.

Следовательно, если в процессе спуска сделан шаг, приводящий к значительному нарушению ограничений (IX, 2а), то последующие шаги приведут к автоматическому исправлению этого нарушения. Очевидно, что чем больше выбрано значение α , тем в более узкой окрестности гиперповерхности ограничений будет производиться поиск оптимума функции $Q(x)$. Поскольку на самой гиперповерхности ограничений функция $Q(x)$ совпадает с функцией $R(x)$, положение минимума $Q(x)$ при достаточно большом значении α совпадает с положением минимума $R(x)$, определяемого с учетом ограничений (IX, 2а), с точностью до размеров ε -окрестности, за пределами которой выполняется условие (IX, 195).

Нетрудно заметить, что обобщенный критерий оптимальности (IX, 193) имеет «овраг», расположенный вдоль гиперповерхности ограничений, так как при удалении от нее функция $\alpha H(x)$ и, следовательно, функция $Q(x)$ резко возрастают. Размерность этого «оврага» выражается числом ограничений (IX, 2а) и равна $n - m$. Поэтому для решения оптимальных задач с ограничениями типа равенств (IX, 2а) при использовании обобщенного критерия с успехом может быть использован метод «шагов по оврагу», рассмотренный выше (см. стр. 516).

Необходимо иметь в виду, что, с одной стороны, при увеличении значения α в уравнении обобщенного критерия (IX, 193) «овраг» становится более «узким», и если гиперповерхность ограничений обладает значительной кривизной, то сходимость процесса поиска оптимума может существенно замедлиться при больших значениях α .

С другой стороны, при слишком малом α точность определения положения оптимума может оказаться недостаточной. Поэтому следует несколько раз повторить решение оптимальной задачи с обобщенным критерием при различных значениях α , увеличивая α при каждой следующей попытке, например, в 2 раза. Поиск наилучшего значения α может начинаться при достаточно малом значении α_0 , при котором обеспечивается высокая скорость сходимости. После того как оптимум найден, значение α увеличивается

и из полученной точки поиск продолжается. Поиск оптимума прекращается, если дальнейшее возрастание α не приводит к существенному уточнению положения оптимума.

N

6. ПОИСК ОПТИМУМА В ЗАДАЧАХ С ОГРАНИЧЕНИЯМИ ТИПА НЕРАВЕНСТВ

Отличительной особенностью задач нелинейного программирования с ограничениями типа неравенств (IX, 26) является то, что если оптимум целевой функции находится внутри допустимой области изменения независимых переменных X , ограниченной неравенствами (IX, 26), то иногда задачу можно решить любым методом поиска без учета ограничений, что обычно невозможно, когда ограничения заданы в виде равенств (IX, 2а). Если же оптимум расположен на границе области X , то для его отыскания приходится применять специальные методы (см. ниже).

Заметим, что число ограничений типа неравенств (IX, 26) в постановке оптимальной задачи может быть любым, т. е. меньше и больше числа независимых переменных. В качестве примера на

Рис. IX-30. Примеры задания допустимой области X различным слоем неравенств: а — $m=5$; б — $m=1$.

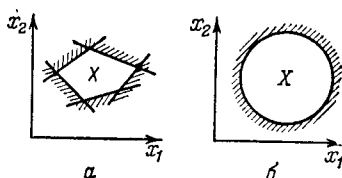


рис. IX-30, а показано ограничение допустимой области изменения независимых переменных X системой пяти линейных неравенств вида:

$$a_i x_1 + b_i x_2 + c_i \leq 0 \quad i = 1, \dots, 5 \quad (\text{IX, 199})$$

На рис. IX-30, б представлен также случай, когда допустимая область X ограничивается только одним неравенством:

$$(x_1 - a)^2 + (x_2 - b)^2 - r^2 \leq 0 \quad (\text{IX, 200})$$

В частном случае ограничения типа неравенств (IX, 26) могут иметь вид ограничений, обусловленных нормировкой независимых переменных задачи:

$$0 \leq x_j \leq 1 \quad j = 1, \dots, n \quad (\text{IX, 201})$$

Метод прямого поиска с возвратом

Основная идея этого метода при его использовании для решения задач с ограничениями типа неравенств (IX, 26), как и в случае равенств (IX, 2а), состоит в том, что оптимум ищется до тех пор с применением любого метода спуска без учета ограничений, пока некоторые из неравенств (IX, 26) не окажутся нарушен-

ными. Как только произойдет нарушение одного или нескольких ограничений (IX,26), определяющих гиперповерхности ограничивающие область X , спуск прекращается и осуществляется возврат в допустимую область изменения переменных x_j по направлению антиградиентов к тем гиперповерхностям, ограничения которых оказались нарушенными.

При использовании метода прямого поиска с возвратом, когда оптимум находится внутри допустимой области X и начальная точка спуска выбрана удачно (рис. IX-31, точка $x^{(1)}$), нарушений ограничений в процессе спуска может не быть вообще. Если же

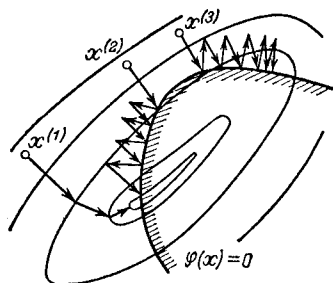


Рис. IX-31. Прямой поиск с возвратом для задач с ограничениями типа неравенств.

начальная точка спуска выбрана менее удачно, в процессе поиска ограничения могут нарушаться и необходим возврат в допустимую область (рис. IX-31, точка $x^{(2)}$). При этом возможны также случаи, когда поиск «застрянет» в локальном минимуме на границе области X (рис. IX-31, спуск из точки $x^{(3)}$).

При практическом применении рассматриваемого метода в случае нарушения ограничений (IX,26) «отскок» от гиперповерхности, ограничивающей область допустимых значений независимых переменных X , выполняется по антиградиенту функции $H^*(x)$, определяемой соотношением:

$$H^*(x) = \sum_{i=1}^m \varphi_i^*(x) \quad (\text{IX, 202})$$

где

$$\varphi_i^*(x) = \begin{cases} \varphi_i(x) & \text{при } \varphi_i(x) > 0 \\ 0 & \text{при } \varphi_i(x) \leq 0 \end{cases} \quad (\text{IX, 202a})$$

Шаг в сторону исправления нарушенных ограничений производится по формуле

$$x' = x - h \nabla H^*(x) \quad (\text{IX, 203})$$

в которой x — точка нарушения ограничений; $\nabla H^*(x)$ — градиент функции $H^*(x)$ (IX,202) в этой точке; h — параметр шага в направлении исправления ограничений.

Можно несколько изменить алгоритм «отскока», если вместо формулы (IX,203) использовать следующую:

$$x'_j = x_j - h (W^{*T}(x), \varphi^*(x))_j \quad (\text{IX, 204})$$

причем произведение $(W^{*T}, \varphi^*)_j$ представляется как

$$(W^{*T}(x), \varphi^*(x))_j = \sum_{i=1}^m \frac{\partial \varphi_i^*(x)}{\partial x_j} \varphi_i^*(x) \quad (\text{IX, 204a})$$

Применение формулы (IX, 204) при определении величины и направления «отскока» позволяет автоматически корректировать величину шага для исправления наиболее сильно нарушенных ограничений. На рис. IX-32 показано определение направления «отскока» при одновременном нарушении двух ограничений.

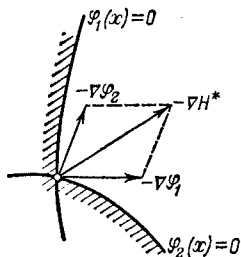


Рис. IX-32. Направление „отскока“ при нарушении двух ограничений.

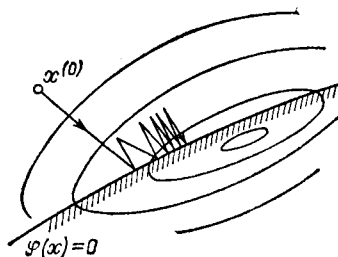


Рис. IX-33. Замедление поиска вблизи оптимума.

Недостатком рассмотренного метода является сравнительно небольшая скорость поиска при движении вдоль гиперповерхности ограничений. В особенности это проявляется в тех случаях, когда искомый оптимум расположен на границе области X . Процесс поиска вблизи от оптимума при этом существенно замедляется (рис. IX-33).

Метод проектирования вектора-градиента

Процесс поиска при движении вдоль гиперповерхности, ограничивающей допустимую область X , как и при ограничениях типа равенств, можно значительно ускорить с использованием метода проектирования вектора-градиента. Однако при решении задач с ограничениями типа неравенств данный метод имеет некоторые особенности, обусловленные способом задания функции $H^*(x)$, определяющей степень нарушения ограничений.

Поскольку предполагается, что внутри допустимой области X функция $H^*(x)$ (IX, 202) тождественно равна нулю, положение точки при выполнении очередного шага должно оставаться за пределами области X , где градиент функции $H^*(x)$ отличен от нуля. Таким образом, если в результате выполнения очередного шага произойдет слишком большое нарушение ограничений (рис. IX-34, шаг из точки $x^{(1)}$), то коррекция этого нарушения должна осуществляться до того положения, пока

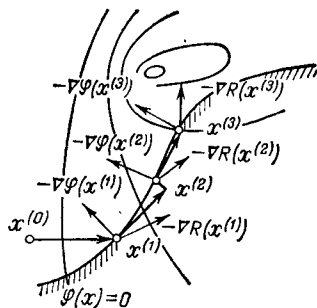


Рис. IX-34. Поиск оптимума методом проектирования вектора-градиента при ограничениях типа неравенств.

функция $H^*(x)$ еще отлична от нуля, т. е. при коррекции необходимо соблюдать условие:

$$0 < H^*(x) < \delta \quad (\text{IX, 205})$$

Очевидно, что движение вдоль гиперповерхности ограничений продолжается до тех пор, пока не будет выполняться условие

$$(\nabla R, \nabla H) < 0 \quad (\text{IX, 206})$$

т. е. пока искомым оптимум находится за пределами касательной плоскости, проведенной через рассматриваемую точку, расположенную на границе.

Если условие (IX, 206) оказывается нарушенным (рис. IX-34, точка $x^{(3)}$), происходит «отрыв» от границы области X и дальнейший спуск происходит уже без влияния ограничений.

Метод обобщенного критерия

Отличие этого метода при решении задач с ограничениями типа неравенств (IX, 26) от аналогичного метода, используемого при наличии равенств, состоит лишь в способе определения «штрафной» функции $H^*(x)$, характеризующей нарушение ограничений, которая для случая неравенств задается выражением

(IX, 202). Обобщенный критерий при этом описывается соотношением:

$$Q^*(x) = R(x) + \alpha H^*(x) \quad (\text{IX, 207})$$

где α — достаточно большое положительное число, выбираемое таким образом, чтобы условие

$$\alpha \left| \frac{\partial H^*(x)}{\partial x_j} \right| \gg \left| \frac{\partial R(x)}{\partial x_j} \right| \quad j = 1, \dots, n \quad (\text{IX, 208})$$

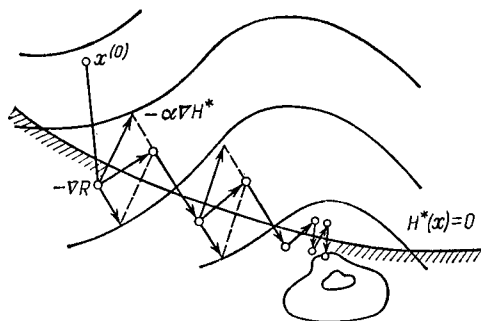


Рис. IX-35. Поиск оптимума с использованием обобщенного критерия.

выполнялось всюду за пределами области X .

При применении обобщенного критерия (IX, 207) процесс поиска протекает так же, как и при отсутствии ограничений. При переходе границы области X происходит скачек градиента функции от значения $\nabla R(x)$ в точке перехода границы x до величины $\nabla R(x) + \alpha \nabla H^*(x)$. На следующем шаге теперь производится возврат в область допустимых значений независимых переменных X . Однако в отличие от рассмотренных выше методов этот возврат осуществляется не по нормали к гиперповерхности ограничений, а под некоторым углом в сторону уменьшения значений целевой функции $R(x)$ (рис. IX-35). Таким образом получается некоторый выигрыш во времени поиска.

Следует заметить, что данный выигрыш возможен лишь при малом значении величины α . Если же величину α для выполнения условия (IX, 208) нужно выбрать большой, то указанное преимущество метода обобщенного критерия практически сводится к нулю. При этом вдоль границы как бы возникает «овраг», один «склон» которого образован функцией $R(x)$, а другой — функцией $H^*(x)$. Разумеется, что «овраг» возникает только при выполнении условия $(\nabla R, \nabla H^*) < 0$, т. е. когда градиент функции $R(x)$ образует с градиентом функции $H^*(x)$ тупой угол. Если ограничения образуют вдоль границы «овраг» такого рода, то при этом в процессе поиска, естественно, могут использоваться «овражные» методы (см. стр. 516).

Методы случайного поиска

Методы случайного поиска при решении задач нелинейного программирования обладают определенными достоинствами, когда ограничения заданы в виде неравенств (IX, 26). В случае их применения нет необходимости предусматривать специальную стратегию поиска при наличии ограничений. Достаточно считать, что если очередной случайный шаг приводит к нарушению ограничений, то этот шаг следует отнести к категории неудачных и далее руководствоваться обычной стратегией случайного поиска.

7. СРАВНЕНИЕ РАЗЛИЧНЫХ МЕТОДОВ ПОИСКА

Большое разнообразие методов решения задач нелинейного программирования (некоторые из них описаны в этой главе) указывает, прежде всего, на сложность проблемы поиска и трудности, связанные с оценкой эффективности использования того или иного метода для решения конкретной задачи. Тем не менее очень важно хотя бы с определенной степенью идеализации сопоставить практическую эффективность вычислительных возможностей разных методов. Такие оценки проводились для методов различных групп, что позволяет иногда наметить границы применимости этих методов с учетом соответствующих критериев.

Одним из таких критериев, имеющим чисто практическое значение, являются так называемые *потери на поиск*, под которыми обычно понимают среднее число значений функции цели, которое необходимо при расчете для достижения оптимума.

Сделана попытка сравнить методы градиента, наискорейшего спуска и поочередного изменения переменных для функции цели квадратичной формы [13]. Показано, что средние потери на поиск для всех этих методов примерно одинаковы, если принять, что в методе градиента и методе поочередного изменения переменных используется один и тот же шаг спуска.

Следует отметить, что вблизи от оптимума метод наискорейшего спуска фактически вырождается в метод градиента, так как в данной области наблюдается резкое изменение направления

градиента целевой функции. Поэтому методы наискорейшего спуска и градиента целесообразно применять в сочетании: вдали от оптимума — метод наискорейшего спуска, вблизи — метод градиента. При этом критерием для перехода от метода наискорейшего спуска к методу градиента может служить частая смена направления спуска, т. е. малое число шагов по каждому направлению.

Представляет интерес сравнение градиентных методов с методами случайного поиска, поскольку последние относительно просто реализуются на вычислительных машинах. Такое сопоставление проведено для случая, когда в процессе отыскания оптимума целевой функции, заданной в виде квадратичной формы, используются методы градиента и случайных направлений с одинаковыми размерами шагов [8]. Оказывается, что эти методы в смысле вычислительных затрат имеют примерно одинаковую эффективность при размерности задачи, равной 3, и достаточно большом

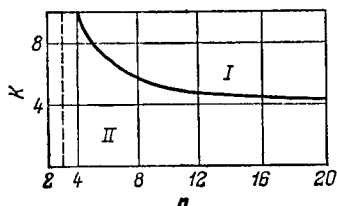


Рис. IX-36. Сравнение метода градиента и метода случайных направлений: I — область более высокого быстродействия метода случайных направлений; II — область более высокого быстродействия метода градиента.

удалении от оптимума. При увеличении размерности задачи более эффективным оказывается метод случайных направлений.

На рис. IX-36 показаны границы применимости указанных методов в зависимости от размерности задачи и удаления от оптимума, измеряемом в данном случае в единицах шага спуска. Область, расположенная над кривой, является областью более высокой эффективности метода случайного поиска и, наоборот, область под кривой — областью более высокой эффективности градиентного метода.

Эти результаты позволяют построить алгоритм решения задач нелинейного программирования высокой размерности, которые представляют собой сочетание метода случайных направлений с градиентным методом. При этом на значительном расстоянии от оптимума поиск производится методом случайных направлений, а при приближении к оптимуму осуществляется переход к градиентному методу.

Критерием для перехода к градиентному методу служит резкое возрастание относительного числа неудачных шагов. Вместе с тем, в подобном случае иногда достаточно эффективным оказывается также метод случайных направлений с переменным шагом. При уменьшении шага как бы производится возврат в область преимущественного использования случайного метода, так как число шагов до оптимума при этом, естественно, возрастает.

Проводилось также сравнение метода случайных направлений с обратным шагом и симплексного метода [5]. Показано, что симплексный метод эффективнее, чем случайный поиск, причем эта эффективность возрастает с увеличением размерности решаемой задачи.

Следует иметь в виду, что приведенные выше оценки относятся к тем редким случаям, когда сопоставление проводилось в идентичных условиях, одним из которых является условие равенства шагов спуска в разных методах. При практической же реализации любого метода возможны улучшения за счет использования особенностей целевой функции, стратегии выбора размера шагов спуска в различные моменты поиска, сочетания разных методов поиска и т. д. Поэтому не следует слишком категорично относиться к этим оценкам и только на их основании выбирать тот или иной метод для решения конкретной оптимальной задачи. Однако рассмотренные оценки весьма интересны, поскольку позволяют установить хотя бы приблизительные границы областей возможного применения различных методов.

* *

*

В предыдущих главах неоднократно встречались случаи, когда при использовании того или иного метода решения задачи оптимизации, например принципа максимума или динамического программирования, на некоторых этапах их применения возникала необходимость решения типичной задачи нелинейного программирования.

Таким образом, следует еще раз подчеркнуть, что методы нелинейного программирования служат не только для решения специфических задач, но, кроме того, являются необходимым средством, к которому приходится обращаться и при решении оптимальных задач другими методами, а также задач вычислительной математики. Простейший пример — проблема решения системы нелинейных уравнений с большим числом неизвестных, где практическая возможность получения решения в общем случае связана с применением методов нелинейного программирования.

Нужно также отметить, что ряд алгоритмов нелинейного программирования применяют для решения проблем обучения, самообучения и адаптации в автоматических системах [14], т. е. в области теории автоматического управления, возникшей относительно недавно и в настоящее время переживающей период бурного развития.

По существу методы нелинейного программирования предусматривают решение задач на вычислительных машинах, особенно на цифровых. Рассматриваемые методы используются также при создании современных систем экстремального регулирования, в связи с чем некоторые из этих методов претерпели значительные изменения, упрощающие их аппаратную реализацию. Сейчас

имеется достаточное число примеров построения таких систем, в которых в той или иной модификации применяются методы нелинейного программирования [15, 16].

Наконец, по мере развития математического моделирования роль этих методов в решении оптимальных задач будет несомненно возрастать, что, в свою очередь, приведет к еще более глубокой разработке существующих и созданию новых алгоритмов поиска оптимума в задачах нелинейного программирования.

ЛИТЕРАТУРА

1. Степанов В. В. Курс дифференциальных уравнений. М., Гостехтеоретиздат, 1960. 468 с.
2. Беллман Р., Дрейфус С. Прикладные задачи динамического программирования. М., «Наука», 1965. 458 с.
3. Фицнер Л. Н. Автоматика и телемеханика, 1961, т. 22, № 1.
4. Описание аналоговой вычислительной машины МН-11. М., НИИсчетмаш, 1960.
5. Spendley D. N., Hext G. R., Himsworth F. R. Technometrics, 1962, N 4.
6. Привалов И. И. Аналитическая геометрия. М., Физматгиз, 1957. 299 с.
7. Гельфанд И. М., Цейтлин М. Л. ДАН СССР, 1961, т. 137, № 2.
8. Растргин Л. А. Случайный поиск в задачах оптимизации многопараметрических систем. Рига, «Зинатне», 1965. 190 с.
9. Вентцель Е. С. Теория вероятностей. М., Физматгиз, 1962. 564 с.
10. Голенко Д. И. Моделирование и статистический анализ псевдослучайных чисел на электронных вычислительных машинах. М., Физматгиз, 1965. 227 с.
11. Бусленко Н. П., Шрейдер Ю. А. Метод статистических испытаний и его реализация в цифровых машинах. М., Физматгиз, 1961. 331 с.
12. Демидович Б. П., Марон И. А. Основы вычислительной математики. М., Физматгиз, 1963. 659 с.
13. Стаховский Р. И. Труды конференции по теории и применению дискретных автоматических систем. М., Изд-во АН СССР, 1958.
14. Цыпкин Я. Э. Адаптация и обучение в автоматических системах. М., «Наука», 1968. 399 с.
15. Грубов В. И., Ивахненко А. Г., Мандровский-Соколов Б. Ю. Промышленная кибернетика. Киев, «Наукова думка», 1966. 447 с.
16. Деннис Д. Б. Математическое программирование и электрические цепи. Пер. с англ. М., Издательство, 1961.

ГЕОМЕТРИЧЕСКОЕ ПРОГРАММИРОВАНИЕ

Рассмотренные в главе IX методы нелинейного программирования предназначены для решения задач оптимизации с критерием оптимальности, сформулированным как нелинейная функция независимых переменных, на допустимую область изменения которых накладываются ограничения, имеющие вид равенств или неравенств, возможно также нелинейного вида. Как правило, решение подобных задач методами нелинейного программирования требует значительного объема вычислений и сопряжено с определенными трудностями, обусловленными особенностями целевой функции и ограничений.

Поэтому создание методов решения задач нелинейного программирования, использующих специфический характер целевых функций и ограничений для построения эффективных вычислительных схем, несомненно имеет большое практическое значение. К числу таких методов, интенсивно развиваемых в последние годы, относится метод геометрического программирования [1], изложению основ которого и посвящена настоящая глава.

1. ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ

Метод геометрического программирования возник и развивался в связи с задачами инженерного проектирования и имеет целью решение задач оптимизации, в которых критерий оптимальности и ограничения на переменные представляются в виде положительных полиномов, называемых также *позиномами* [1], вида:

$$g(x) = \sum_{j=1}^m c_j \prod_{i=1}^n x_i^{a_{ij}} \quad (X, 1)$$

причем c_j — положительные константы, а показатели степени a_{ij} — произвольные вещественные числа. Предполагается, что независимые переменные x_i ($i = 1, \dots, n$) принимают только положительные значения.

В общем случае задача геометрического программирования заключается в *минимизации* позинома $g_0(x)$ при наличии ограничений

$$g_k(x) \leq 1 \quad k = 1, \dots, p \quad (X, 2)$$

Поэиномиальные выражения достаточно широко распространены в науке и технике, примером чего являются известные критерийные соотношения, представляющие собой ни что иное как одночленные поэиномы. Кроме того, во многих случаях поэиномы могут использоваться для аппроксимации функциональных зависимостей различной степени сложности, определяемых математическими моделями или же свойствами рассматриваемых объектов.

Таким образом, метод геометрического программирования может применяться во всех тех случаях, когда либо в самой постановке задачи присутствуют поэиномиальные выражения, либо имеющиеся зависимости аппроксимируются поэиномами.

Свойства геометрического неравенства

В основе метода геометрического программирования лежит использование свойств неравенства, называемого *геометрическим*, согласно которому среднее геометрическое неотрицательных чисел не превышает их среднего арифметического. Для случая двух чисел U_1 и U_2 это неравенство имеет вид:

$$\frac{1}{2} U_1 + \frac{1}{2} U_2 \geq U_1^{1/2} \cdot U_2^{1/2} \quad (X, 3)$$

и легко доказывается элементарными преобразованиями выражения

$$(U_1 - U_2)^2 \geq 0 \quad (X, 4)$$

из которого следует:

$$U_1^2 - 2U_1U_2 + U_2^2 \geq 0 \quad (X, 4a)$$

или

$$U_1^2 + 2U_1U_2 + U_2^2 \geq 4U_1U_2 \quad (X, 4b)$$

откуда

$$(U_1 + U_2)^2 \geq 4U_1U_2 \quad (X, 5)$$

После извлечения квадратного корня из обеих частей соотношения (X, 5) и получается неравенство (X, 3).

Обобщение геометрического неравенства на случай произвольного числа членов с произвольными положительными *веса*ми приводит к соотношению [1]:

$$\sum_{j=1}^m \delta_j U_j \geq \prod_{j=1}^m U_j^{\delta_j} \quad (X, 6)$$

в котором U_j ($j = 1, \dots, m$) — произвольные неотрицательные числа, а δ_j ($j = 1, \dots, m$) — произвольные положительные *веса*, удовлетворяющие *условию нормализации*:

$$\sum_{j=1}^m \delta_j = 1 \quad (X, 7)$$

Воспользовавшись заменой переменных

$$u_j = \delta_j U_j \quad (X, 8)$$

неравенство (X, 6) можно представить в виде:

$$\sum_{j=1}^m u_j \geq \prod_{j=1}^m \left(\frac{u_j}{\delta_j} \right)^{\delta_j} \quad (X, 9)$$

Последнее выражение и будет использоваться при выводе соотношений геометрического программирования.

Двойственная функция

В геометрическом программировании рассматривается задача минимизации критерия оптимальности, заданного в форме позинома вида (X, 1). Обозначая каждый одночлен, входящий в позином (X, 1), через

$$u_j(x) = c_j \prod_{i=1}^n x_i^{a_{ij}} \quad (X, 10)$$

и применяя геометрическое неравенство (X, 6), можно получить следующее соотношение:

$$\sum_{j=1}^m c_j \prod_{i=1}^n x_i^{a_{ij}} \geq \prod_{j=1}^m \left(\frac{c_j}{\delta_j} \right)^{\delta_j} \prod_{i=1}^n x_i^{D_i} \quad (X, 11)$$

в котором величины D_i определяются как

$$D_i = \sum_{j=1}^m \delta_j a_{ij} \quad (X, 12)$$

т. е. являются линейными функциями показателей a_{ij} .

Поскольку величины δ_j в соотношении (X, 11) являются произвольными неотрицательными числами, удовлетворяющими условию нормализации (X, 7), их можно выбрать до некоторой степени произвольным образом. Допустим, что δ_j могут быть выбраны так, чтобы все D_i равнялись нулю. Тогда соотношение (X, 11) может быть представлено в виде:

$$\sum_{j=1}^m c_j \prod_{i=1}^n x_i^{a_{ij}} \geq \prod_{j=1}^m \left(\frac{c_j}{\delta_j} \right)^{\delta_j} \quad (X, 13)$$

причем значения δ_j должны удовлетворять условию нормализации (X, 7), а также системе уравнений

$$\sum_{j=1}^m \delta_j a_{ij} = 0 \quad i = 1, \dots, n \quad (X, 14)$$

называемой условиями ортогональности.

В полученном выражении (X, 13) правая часть неравенства, являющаяся только функцией величин δ_j ($j = 1, \dots, m$)

$$v(\delta) = \prod_{j=1}^m \left(\frac{c_j}{\delta_j} \right)^{\delta_j} \quad (X, 15)$$

называется *двойственной функцией* задачи минимизации позинома (X, 1). Левая же часть неравенства (X, 13) является функцией только x_i ($i = 1, \dots, n$). Таким образом, неравенство (X, 13) означает, что позином $g(x)$ (X, 1) ни при каких значениях x_i ($i = 1, \dots, n$) не может быть меньше двойственной функции $v(\delta)$ (X, 15), в которой величины δ_j ($j = 1, \dots, m$) удовлетворяют уравнениям (X, 7) и (X, 14). Другими словами, минимальное значение функции $g(x)$ (X, 1) всегда не меньше максимального значения двойственной функции $v(\delta)$, определяемого при условиях (X, 7) и (X, 14). Поэтому, определяя при условиях (X, 7) и (X, 14) максимальное значение двойственной функции $v(\delta)$ (X, 15), можно получить оценку снизу минимизируемого позинома $g(x)$ (X, 1).

В действительности максимальное значение двойственной функции $v(\delta)$ оказывается в точности равным минимальному значению позинома $g(x)$. Для того чтобы показать это, предположим, что позином $g(x)$ (X, 1) имеет минимальное значение в точке x'_i ($i = 1, \dots, n$). Тогда в этой точке выполняются условия:

$$\frac{\partial g(x')}{\partial x_i} = 0 \quad i = 1, \dots, n \quad (X, 16)$$

Умножая каждое из уравнений (X, 16) на соответствующее значение x'_i и деля на $g(x')$, в результате элементарных преобразований получим:

$$\frac{x'_i}{g(x')} \frac{\partial g(x')}{\partial x_i} = \sum_{j=1}^m \frac{x'_i}{g(x')} \frac{\partial u_j(x')}{\partial x_i} = \sum_{j=1}^m \frac{u_j(x')}{g(x')} a_{ij} = 0 \quad (X, 17)$$

$i = 1, \dots, n$

Обозначим:

$$\delta'_j = \frac{u_j(x')}{g(x')} \quad (X, 18)$$

Тогда из уравнений (X, 17) найдем:

$$\sum_{j=1}^m \delta'_j a_{ij} = 0 \quad i = 1, \dots, n \quad (X, 19)$$

т. е. в результате получено, что величины δ'_j ($j = 1, \dots, m$) удовлетворяют условиям ортогональности (X, 14), а в силу определения (X, 18) они также удовлетворяют и условию нормализации (X, 7).

Поэтому можно записать:

$$g(x') = \prod_{j=1}^m [g(x')]^{\delta'_j} \quad (X, 20)$$

Но из выражения (X, 18) следует, что

$$g(x') = \frac{u_j(x')}{\delta'_j} \quad (X, 21)$$

Тогда, подставляя в соотношение (X, 20) выражение (X, 21), в результате преобразований с учетом условия (X, 19) получим:

$$g(x') = \prod_{j=1}^m \left[\frac{u_j(x')}{\delta'_j} \right]^{\delta'_j} = \prod_{j=1}^m \left(\frac{c_j}{\delta'_j} \right)^{\delta'_j} \prod_{i=1}^n x_i^{\sum_{j=1}^m \delta'_j a_{ij}} = \prod_{j=1}^m \left(\frac{c_j}{\delta'_j} \right)^{\delta'_j} = v(\delta') \quad (X, 22)$$

т. е. таким образом доказано, что условный максимум двойственной функции $v(\delta')$ в точности равен минимуму позинорма $g(x')$.

Итак, в результате решения задачи максимизации двойственной функции $v(\delta)$ (X, 15) при условиях (X, 7) и (X, 14) находится минимальное значение позинорма (X, 1), хотя величины x_i ($i = 1, \dots, n$), соответствующие этому минимальному значению, пока еще не определены. Для того чтобы найти значения x_i ($i = 1, \dots, n$), минимизирующие позинорм $g(x)$, воспользуемся доказанным выше равенством:

$$g(x') = v(\delta') \quad (X, 23)$$

Из выражения (X, 18) следует, что

$$u_j(x') = \delta'_j g(x') \quad j = 1, \dots, m \quad (X, 24)$$

или с учетом соотношения (X, 23):

$$u_j(x') = \delta_j v(\delta') \quad j = 1, \dots, m \quad (X, 25)$$

Логарифмируя уравнения (X, 25), их можно представить в виде

$$\sum_{i=1}^n a_{ij} z_i = b_j \quad j = 1, \dots, m \quad (X, 26)$$

где использованы обозначения:

$$z_i = \ln x_i \quad (X, 27a)$$

$$b_j = \ln \left[\frac{\delta_j v(\delta)}{c_j} \right] \quad (X, 27b)$$

Таким образом, при известном условном максимуме двойственной функции $v(\delta)$ совокупность значений x_i ($i = 1, \dots, n$) с учетом обозначений (X, 27) должна удовлетворять системе линейных уравнений (X, 26).

Задачи с ограничениями

В наиболее общей постановке задача геометрического программирования формулируется как задача минимизации позинорма $g_0(x)$ при наличии ограничений на переменные x_i ($i = 1, \dots, n$),

также выражающихся через позыномы:

$$g_k(x) \leq 1 \quad k=1, \dots, p \quad (\text{X}, 28)$$

Предположим, что все одночлены, входящие в минимизируемый позыном $g_0(x)$ и ограничения (X, 28), перенумерованы от 1 до m . Тогда

$$g_0(x) = \sum_{j=1}^{m_0} c_j \prod_{i=1}^n x_i^{a_{ij}} \quad (\text{X}, 29)$$

$$g_k(x) = \sum_{j=M_{k-1}+1}^{M_k} c_j \prod_{i=1}^n x_i^{a_{ij}} \quad (\text{X}, 30)$$

где

$$M_k = \sum_{l=0}^k m_l \quad M_{k-1} = 0 \quad (\text{X}, 31)$$

Для получения соотношений, позволяющих решать задачи минимизации позынома (X, 29) при наличии ограничений (X, 28), преобразуем геометрическое неравенство (X, 9) так, чтобы его можно было использовать с ненормализованными весами Δ_j .

Связь между нормализованными весами δ_j и ненормализованными Δ_j определяется соотношением:

$$\delta_j = \frac{\Delta_j}{\lambda} \quad (\text{X}, 32)$$

в котором

$$\lambda = \sum_{j=1}^m \Delta_j \quad (\text{X}, 33)$$

Подставляя выражение (X, 32) в неравенство (X, 9), получим:

$$\sum_{j=1}^m u_j \geq \prod_{j=1}^m \left(\frac{u_j}{\Delta_j} \right)^{\Delta_j/\lambda} \lambda^{\sum_{j=1}^m \Delta_j/\lambda} \quad (\text{X}, 34)$$

Так как

$$\sum_{j=1}^m \frac{\Delta_j}{\lambda} = 1 \quad (\text{X}, 35)$$

неравенство (X, 34) может быть представлено в виде:

$$\sum_{j=1}^m u_j \geq \lambda \prod_{j=1}^m \left(\frac{u_j}{\Delta_j} \right)^{\Delta_j/\lambda} \quad (\text{X}, 36)$$

или

$$\left(\sum_{j=1}^m u_j \right)^\lambda \geq \lambda^\lambda \prod_{j=1}^m \left(\frac{u_j}{\Delta_j} \right)^{\Delta_j} \quad (\text{X}, 37)$$

С использованием соотношения (X, 37) можно получить следующую оценку снизу для позинома $g_0(x)$:

$$[g_0(x)]^{\lambda_0} = \left(\sum_{j=1}^{m_1} u_j \right)^{\lambda_2} \geq \lambda_0^{\lambda_0} \prod_{j=1}^{m_0} \left(\frac{u_j}{\Delta_j} \right)^{\Delta_j} \quad (\text{X, 38})$$

причем

$$\lambda_0 = \sum_{j=1}^{m_0} \Delta_j \quad (\text{X, 39})$$

Аналогичным образом могут быть преобразованы и неравенства (X, 30):

$$1 \geq [g_k(x)]^{\lambda_k} \geq \lambda_k^{\lambda_k} \prod_{j=M_{k-1}+1}^{M_k} \left(\frac{u_j}{\Delta_j} \right)^{\Delta_j} \quad k = 1, \dots, p \quad (\text{X, 40})$$

где

$$\lambda_k = \sum_{j=M_{k-1}+1}^{M_k} \Delta_j \quad (\text{X, 41})$$

Поскольку решение оптимальной задачи должно удовлетворять всем неравенствам (X, 38) и (X, 40), оно также удовлетворяет и произведению этих неравенств. Поэтому можно записать соотношение:

$$[g_0(x)]^{\lambda_0} \geq \prod_{k=0}^p \lambda_k^{\lambda_k} \prod_{j=1}^m \left(\frac{u_j}{\Delta_j} \right)^{\Delta_j} \quad (\text{X, 42})$$

которое справедливо при любом выборе ненормализованных весов Δ_j ($j = 1, \dots, m$). С вычислительной точки зрения удобно принять:

$$\lambda_0 = \sum_{j=1}^{m_1} \Delta_j = 1 \quad (\text{X, 43})$$

после чего неравенство (X, 42) запишется в виде:

$$g_0(x) \geq \prod_{k=1}^p \lambda_k^{\lambda_k} \prod_{j=1}^m \left(\frac{u_j}{\Delta_j} \right)^{\Delta_j} \quad (\text{X, 44})$$

Подставляя в неравенство (X, 44) выражения для одночленов позинома (X, 10), найдем:

$$g_0(x) \geq \prod_{k=1}^p \lambda_k^{\lambda_k} \prod_{j=1}^m \left(\frac{c_j}{\delta_j} \right)^{\delta_j} \prod_{i=1}^n x_i^{D_i} \quad (\text{X, 45})$$

где для весов Δ_j снова использовано обозначение δ_j , а величины D_i определяются как

$$D_i = \sum_{j=1}^m a_{ij} \delta_j \quad i = 1, \dots, n \quad (X, 46)$$

Если теперь выбрать величины δ_j с учетом условия (X, 43) так, чтобы все D_i обращались в нуль, т. е.

$$\sum_{j=1}^m a_{ij} \delta_j = 0 \quad (X, 47)$$

то получим для минимизируемого позинорма $g_0(x)$ с учетом неравенств (X, 28) следующую нижнюю оценку:

$$g_0(x) \geq \prod_{k=1}^p \lambda_k^{\lambda_k} \prod_{j=1}^m \left(\frac{c_j}{\delta_j} \right)^{\delta_j} \quad (X, 48)$$

Правая часть неравенства (X, 48), являющаяся только функцией величин δ_j ($j = 1, \dots, m$), представляет собой двойственную функцию задачи с ограничениями:

$$v(\delta) = \prod_{k=1}^p \lambda_k^{\lambda_k} \prod_{j=1}^m \left(\frac{c_j}{\delta_j} \right)^{\delta_j} \quad (X, 49)$$

максимальное значение которой, как и в случае задачи без ограничений, определяет минимальное значение позинорма $g_0(x)$, что соответствует решению оптимальной задачи.

Можно также показать [1], что оптимальное решение для задачи минимизации позинорма $g_0(x)$ при ограничениях (X, 28) удовлетворяет соотношениям (X, 24) или (X, 25), в которых $u_j(x')$ являются одночленами позинорма $g_0(x)$, т. е.

$$u_j(x') = \delta'_j v(\delta) \quad j = 1, \dots, m_0 \quad (X, 50)$$

В соотношениях (X, 50) величины δ'_j представляют собой значения весов, максимизирующих двойственную функцию (X, 49) с учетом условий ортогональности (X, 47) и нормализации (X, 43), а величины x'_i определяют оптимальное решение задачи, которое также может быть найдено решением системы линейных уравнений (X, 26).

Вычислительные аспекты геометрического программирования

Рассмотренные выше соотношения позволяют свести задачу минимизации позинорма $g_0(x)$ при наличии ограничений (X, 28) к задаче максимизации двойственной функции (X, 49) при условиях ортогональности (X, 47) и нормализации (X, 43). Следует сразу отметить, что двойственная задача имеет только линейные ограничения типа равенств, поэтому решение ее обычно значительно проще,

чем решение прямой задачи минимизации поизнома $g_0(x)$ с нелинейными ограничениями (X, 28).

Для характеристики задач геометрического программирования используется понятие степени трудности s , определяемой выражением

$$s = m - n' - 1 \quad (\text{X, 51})$$

в котором m — общее число членов в минимизируемом поизноме и ограничениях, а n' — число независимых переменных.

Число независимых переменных задачи определяется рангом матрицы, составленной из показателей степеней a_{ij} переменных.

Величина степени трудности характеризует размерность задачи, которую необходимо решать при максимизации двойственной функции. Так, например, для задачи минимизации поизнома

$$g(x) = 2x_1x_2^3 + \frac{8}{x_1x_2^3} \quad (\text{X, 52})$$

$m = 2$, а величины a_{ij} равны:

$$a_{11} = 1, \quad a_{21} = 3, \quad a_{12} = -1, \quad a_{22} = -3$$

Соответствующая матрица имеет вид:

$$\begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 3 & -3 \end{bmatrix}$$

и, как нетрудно заметить, ее ранг равен 1, т. е. $n' = 1$.

Поэтому степень трудности рассматриваемой задачи оказывается равной нулю ($2 - 1 - 1 = 0$). Последнее означает, что в данном случае необходимость максимизации двойственной функции отсутствует.

Действительно, для задачи минимизации поизнома (X, 52) соответствующая двойственная функция имеет вид:

$$v(\delta) = \left(\frac{2}{\delta_1}\right)^{\delta_1} \left(\frac{8}{\delta_2}\right)^{\delta_2} \quad (\text{X, 52a})$$

где веса δ_1 и δ_2 удовлетворяют условию нормализации

$$\delta_1 + \delta_2 = 1$$

и условиям ортогональности

$$\begin{aligned} \delta_1 - \delta_2 &= 0 \\ 3\delta_1 - 3\delta_2 &= 0 \end{aligned}$$

Уравнения, соответствующие условиям ортогональности, в данном случае являются линейно зависимыми. Поэтому, решая любое из них совместно с условием нормализации, получим:

$$\delta_1 = \delta_2 = \frac{1}{2}$$

Подставляя найденные значения δ_1 и δ_2 в выражение для двойственной функции (X, 52a), найдем:

$$v(\delta) = 4^{1/2} (16)^{1/2} = 8 \quad (\text{X}, 53)$$

т. е. сразу найдено минимальное значение $g(x)$.

Если значение степени трудности задачи геометрического программирования больше 1, то для ее решения необходимо решать задачу максимизации двойственной функции соответствующей размерности. При наличии нескольких ограничений степень трудности может быть достаточно большой, и для решения задачи максимизации двойственной функции может потребоваться применение вычислительных машин.

Не всегда формулировка оптимальной задачи прямо удовлетворяет требованиям, соответствующим задачам геометрического программирования. Однако в целом ряде случаев можно воспользоваться приемами, позволяющими представить исходную задачу как задачу геометрического программирования. Рассмотрим в связи с этим некоторые случаи [1].

Пусть требуется минимизировать функцию

$$G(x) = f(x) + [q(x)]^a h(x) \quad (\text{X}, 54)$$

причем $f(x)$, $g(x)$ и $h(x)$ — полиномы от векторного переменного x и $a > 0$.

Для того чтобы свести поставленную задачу к задаче геометрического программирования, рассмотрим вместо функции (X, 54) функцию

$$g(x_0, x) = f(x) + x_0^a h(x) \quad (\text{X}, 55)$$

и ограничение

$$x_0^{-1} q(x) \leq 1 \quad (\text{X}, 56)$$

в которых используется дополнительная переменная x_0 .

Поскольку в силу условия (X, 56) величина x_0 не меньше полинома $q(x)$, очевидно, что условный минимум функции $g(x_0, x)$ (X, 55) совпадает с минимальным значением функции $G(x)$ (X, 54). Но соотношения (X, 55) и (X, 56) представляют собой полиномы. Поэтому исходная задача минимизации функции (X, 54) тем самым сведена к задаче геометрического программирования.

Аналогичным образом можно показать, что задача минимизации функции

$$G(x) = f(x) + \frac{q(x)}{[u(x) - h(x)]^a} \quad (\text{X}, 57)$$

в которой $f(x)$, $q(x)$ и $h(x)$ — полиномы, $u(x)$ — одночленный полином и $a > 0$, также сводится к задаче геометрического программирования.

С этой целью рассмотрим задачу минимизации полинома

$$g(x) = f(x) + x_0^{-a} q(x) \quad (\text{X}, 58)$$

при ограничении

$$u(x) - h(x) \geq x_0 \quad (X, 59)$$

в которой используется дополнительная переменная x_0 .

Очевидно, что исходная задача минимизации функции (X, 57) эквивалентна задаче минимизации поизнома (X, 58), если учесть, что ограничение (X, 59) может быть преобразовано к поизномиальной форме:

$$\frac{x_0}{u(x)} + \frac{h(x)}{u(x)} \leq 1 \quad (X, 60)$$

Обобщение этих задач показывает, что задачи оптимизации с критериями вида

$$G(x) = \sum_i \prod_j \frac{[q_{ij}(x)]^{\alpha_{ij}}}{[1 - p_{ij}(x)]^{\beta_{ij}}} \quad (X, 61)$$

где $q_{ij}(x)$ и $p_{ij}(x)$ — поизномы, а α_{ij} и β_{ij} — положительные числа, могут быть путем элементарных преобразований сведены к задаче геометрического программирования.

Другим важным приемом, позволяющим сводить задачи минимизации некоторых функций к задачам геометрического программирования, является аппроксимация исходных выражений поизномиальными соотношениями. Аппроксимация одночленными поизномами вообще не составляет особых затруднений и часто применяется на практике. Поэтому достаточно широкий класс задач нелинейного программирования удастся свести к поизномиальной форме и использовать для решения поставленных оптимальных задач эффективный математический аппарат геометрического программирования.

2. ПРИМЕРЫ ЗАДАЧ ГЕОМЕТРИЧЕСКОГО ПРОГРАММИРОВАНИЯ

Ниже приведен ряд примеров применения математического аппарата геометрического программирования к решению конкретных задач оптимизации. Представленные задачи, которые с успехом могут быть решены и другими методами, естественно не претендуют на то, чтобы показать все возможности рассматриваемого метода, а являются лишь иллюстрацией основных аспектов его использования.

Расчет оптимальных размеров емкости

Рассматриваемая задача заключается в расчете размеров цилиндрической емкости заданного объема V , которая имела бы минимальную поверхность S . Эта задача уже решалась с использованием метода неопределенных множителей Лагранжа (см. стр. 152) и была сведена к задаче минимизации величины

поверхности S , определяемой соотношением

$$S = 2\pi(r^2 + rh) \quad (X, 62)$$

при ограничении

$$V = \pi r^2 h \quad (X, 63)$$

причем r и h — соответственно радиус емкости и ее высота.

В данном случае ограничение (X, 63) может быть представлено в виде неравенства

$$V \leq \pi r^2 h \quad (X, 64)$$

которое записывается в виде полиномиального ограничения:

$$\frac{V}{\pi} r^{-2} h^{-1} \leq 1 \quad (X, 65)$$

Вводя обозначения:

$$\begin{aligned} c_1 &= 2\pi, & c_2 &= 2\pi, & c_3 &= \frac{V}{\pi} \\ x_1 &= r, & x_2 &= h \\ a_{11} &= 2, & a_{21} &= 0, & a_{12} &= 1 \\ a_{22} &= 1, & a_{13} &= -2, & a_{23} &= -1 \end{aligned} \quad (X, 66)$$

запишем поставленную задачу в стандартной форме обозначений полиномов:

$$g_0(x) = c_1 x_1^{a_{11}} x_2^{a_{21}} + c_2 x_1^{a_{12}} x_2^{a_{22}} \quad (X, 67)$$

$$g_1(x) = c_3 x_1^{a_{13}} x_2^{a_{23}} \leq 1 \quad (X, 68)$$

Матрица коэффициентов a_{ij} будет:

$$\begin{bmatrix} 2 & 1-2 \\ 0 & 1-1 \end{bmatrix} \quad (X, 69)$$

и, как нетрудно убедиться, имеет ранг, равный 2, т. е. в задаче есть две независимые переменные ($n' = 2$).

Число членов в полиномах (X, 67) и (X, 68) равно 3 ($m = 3$), поэтому степень трудности задачи в соответствии с выражением (X, 51) составляет:

$$s = m - n' - 1 = 3 - 2 - 1 = 0 \quad (X, 70)$$

Выражение для двойственной функции (X, 49) в данном случае имеет вид:

$$v(\delta) = \delta_3^{\delta_3} \left(\frac{c_1}{\delta_1} \right)^{\delta_1} \left(\frac{c_2}{\delta_2} \right)^{\delta_2} \left(\frac{c_3}{\delta_3} \right)^{\delta_3} \quad (X, 71)$$

поскольку

$$\lambda_1 = \delta_3 \quad (X, 72)$$

так как ограничение (X, 68) представляет собой одночленный полином.

Условие нормализации при этом записывается как

$$\delta_1 + \delta_2 = 1 \quad (X, 73)$$

и совместно с условиями ортогональности (X, 47):

$$\begin{aligned} 2\delta_1 + \delta_2 - 2\delta_3 &= 0 \\ \delta_2 - \delta_3 &= 0 \end{aligned} \quad (X, 74)$$

составляет систему трех уравнений относительно трех неизвестных δ_1 , δ_2 и δ_3 .

Решением системы уравнений (X, 73) и (X, 74) будет:

$$\delta_1 = \frac{1}{3}, \quad \delta_2 = \frac{2}{3}, \quad \delta_3 = \frac{2}{3} \quad (X, 75)$$

Подстановка значений c_i и δ_i в выражение двойственной функции (X, 71) дает соотношение

$$v(\delta) = \left(\frac{2}{3}\right)^{\frac{2}{3}} (6\pi)^{\frac{1}{3}} (3\pi)^{\frac{2}{3}} \left(\frac{3V}{2\pi}\right)^{\frac{2}{3}} = 3 \sqrt[3]{2\pi V^2} \quad (X, 76)$$

которое и определяет минимальное значение поверхности S .

Следующий этап решения задачи заключается в определении размеров емкости, для чего воспользуемся системой уравнений (X, 26), которая в данном случае имеет вид:

$$\begin{aligned} a_{11}z_1 + a_{21}z_2 &= b_1 \\ a_{12}z_1 + a_{22}z_2 &= b_2 \end{aligned} \quad (X, 77)$$

где a_{ij} определяются обозначениями (X, 66), а b_1 и b_2 в силу соотношений (X, 276) равны:

$$\begin{aligned} b_1 &= \ln \left(\frac{1}{2\pi} \sqrt[3]{2\pi V^2} \right) \\ b_2 &= \ln \left(\frac{1}{2\pi} \sqrt[3]{2\pi V^2} \right) \end{aligned} \quad (X, 78)$$

С использованием численных значений для a_{ij} система (X, 77) примет вид:

$$\begin{aligned} 2z_1 &= \ln \left(\frac{1}{2\pi} \sqrt[3]{2\pi V^2} \right) \\ z_1 + z_2 &= \ln \left(\frac{1}{2\pi} \sqrt[3]{2\pi V^2} \right) \end{aligned} \quad (X, 79)$$

откуда находим:

$$\begin{aligned} z_1 &= \frac{1}{2} \ln \left(\frac{1}{2\pi} \sqrt[3]{2\pi V^2} \right) \\ z_2 &= \frac{1}{2} \ln \left(\frac{2}{\pi} \sqrt[3]{2\pi V^2} \right) \end{aligned}$$

С учетом замены переменных (X, 27a) окончательно получим:

$$\begin{aligned} r_1 = x_1 &= \sqrt[3]{\frac{V}{2\pi}} \\ h = x_2 &= 2 \sqrt[3]{\frac{V}{2\pi}} \end{aligned} \quad (X, 79a)$$

т. е. найдено в точности то же самое решение, которое было определено при использовании метода множителей Лагранжа [см. выражения (IV, 25) и (IV, 26)].

Оптимальный цикл периодического процесса фильтрации

Многие промышленные установки фильтрации работают по периодическому принципу. Фильтр-пресс работает до тех пор, пока брикет отфильтрованного материала не достигнет определенной величины, после чего следует промывка отфильтрованного материала. После промывки производится разгрузка фильтр-пресса, после которой производственный цикл повторяется.

Время, потребное для отжима некоторого объема фильтрата V_c при постоянном давлении, пропорционально квадрату величины этого объема. Время, необходимое для промывки фильтрата, в свою очередь, пропорционально его объему и количеству промывной воды. Полагая объем промывной воды пропорциональным объему фильтрата, можно считать, что время промывки также пропорционально квадрату объема фильтрата. Очевидно, что с уменьшением объема единичной загрузки фильтр-пресса будет уменьшаться и суммарное время операций отжима и промывки при переработке заданного объема фильтрата. Однако при этом будет увеличиваться время, затрачиваемое на операции загрузки и разгрузки фильтр-пресса, поскольку при уменьшении объема единичной загрузки общее число этих операций возрастет.

В связи с этим возникает задача выбора оптимального числа циклов N , при котором общее время переработки заданного объема фильтрата V будет минимальным.

С учетом сделанных выше замечаний общее время операций отжима и промывки, требуемое для переработки объема V фильтрата за N циклов, составит:

$$\theta_1 = k \left(\frac{V}{N} \right)^2 N \quad (X, 80)$$

причем через k обозначен некоторый коэффициент пропорциональности, учитывающий эффективность операций отжима и промывки.

Время, затрачиваемое на выполнение всех операций загрузки и разгрузки, при этом будет равно:

$$\theta_2 = \theta_d N \quad (X, 81)$$

где через θ_d обозначено время выполнения одной операции загрузки (разгрузки).

Суммарное время переработки определяется как

$$\theta = \theta_1 + \theta_2 = kV^2 \frac{1}{N} + \theta_d N \quad (X, 82)$$

и должно быть минимизировано выбором оптимального числа циклов N .

Обозначая

$$\begin{aligned} c_1 &= kV^2, & c_2 &= \theta_d \\ x_1 &= N \\ a_{11} &= -1, & a_{12} &= 1 \end{aligned} \quad (X, 83)$$

запишем исходную задачу в стандартной форме обозначений позиномов:

$$g(x) = c_1 x_1^{a_{11}} + c_2 x_1^{a_{12}} \quad (X, 84)$$

Двойственная функция рассматриваемой задачи в данном случае имеет вид

$$v(\delta) = \left(\frac{c_1}{\delta_1} \right)^{\delta_1} \left(\frac{c_2}{\delta_2} \right)^{\delta_2} \quad (X, 85)$$

где значения δ_1 и δ_2 удовлетворяют условию нормализации

$$\delta_1 + \delta_2 = 1 \quad (X, 86)$$

и условию ортогональности

$$-\delta_1 + \delta_2 = 0 \quad (X, 87)$$

Решением системы уравнений (X, 86) и (X, 87) будут значения

$$\delta_1 = \delta_2 = \frac{1}{2}$$

которые после подстановки в соотношение (X, 85) с учетом выражений для коэффициентов c_j (X, 83) позволяют найти:

$$v(\delta) = (2kV^2)^{\frac{1}{2}} (2\theta_d)^{\frac{1}{2}} = 2(kV^2\theta_d)^{\frac{1}{2}} \quad (X, 88)$$

Тем самым определено минимальное время переработки заданного объема V фильтрата при оптимальном числе циклов N . Последнее при этом находится непосредственно из соотношения (X, 50), которое, например для $j = 2$, записывается в виде

$$\theta_d N = \frac{1}{2} 2(kV^2\theta_d)^{\frac{1}{2}} \quad (X, 89)$$

откуда окончательно получаем:

$$N_{\text{опт}} = \sqrt{\frac{kV^2}{\theta_d}} \quad (X, 90)$$

Таким образом, поставленная задача полностью решена.



Метод геометрического программирования сравнительно недавно стал применяться для решения задач оптимизации и в настоящее время находит все более широкое применение к решению самых различных задач. Геометрическое программирование представляет собой весьма удобный математический аппарат для решения целого ряда задач оптимизации в области техники, экономики и химической технологии. С некоторыми возможностями этого метода можно более детально познакомиться по опубликованным работам [1—4].

ЛИТЕРАТУРА

1. Даффин Р., Питерсон Э., Зенер К. Геометрическое программирование. Пер. с англ. М., «Мир», 1972. 311 с.
2. Зенер К. Геометрическое программирование и техническое проектирование. Пер. с англ. М., «Мир», 1973. 110 с.
3. Avriel M., Wilder D. J. Ind. and Eng. Chem. Proc. Design and Develop., 1967, v. 6, N 2, p. 256—261.
4. Lamonte R. R., Lederman P. B., BCE and Process. Technol., 1972, v. 17, N 1, p. 34—37.

СВЕДЕНИЯ ПО МАТЕМАТИКЕ

1. ЭЛЕМЕНТЫ МАТРИЧНОЙ АЛГЕБРЫ

Определения

Совокупность mn чисел, расположенных в прямоугольной таблице, имеющей m строк и n столбцов, называется *матрицей*:

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mn} \end{bmatrix} \quad (1)$$

Числа a_{ij} ($i = 1, 2, \dots, m$; $j = 1, 2, \dots, n$), составляющие матрицу, называются ее *элементами*. Индекс i обозначает номер строки матрицы, в которой расположен элемент a_{ij} , а индекс j — номер столбца.

Элементы матрицы A , находящиеся в j -м столбце, образуют *вектор-столбец*:

$$A_j = \begin{bmatrix} a_{1j} \\ a_{2j} \\ \vdots \\ a_{mj} \end{bmatrix} \quad (2)$$

а элементы, расположенные в i -й строке, образуют *вектор-строку*:

$$A_i = (a_{i1}, a_{i2}, \dots, a_{in}) \quad (3)$$

Для матрицы A используются также следующие обозначения:

$$A = [A] = [a_{ij}] = [A_j] = [A_1, A_2, \dots, A_n] \quad (4)$$

Если $m = n$, то матрица называется *квадратной* порядка n , в противном случае ее называют *прямоугольной*.

Совокупность некоторых из элементов матрицы, образующих матрицу, для которой $m' \leq m$ и $n' \leq n$, иногда называют *подматрицей* матрицы A . Например, для матрицы

$$A = \begin{bmatrix} \boxed{a_{11} \quad a_{12}} & a_{13} & \dots & a_{1n} \\ \boxed{a_{21} \quad a_{22}} & a_{23} & \dots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \dots & a_{3n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{m1} & a_{m2} & a_{m3} & \dots & a_{mn} \end{bmatrix} \quad (5)$$

совокупность элементов, очерченная пунктиром, образует подматрицу

$$A' = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} \quad (6)$$

В частном случае $m' = m$ и $n' = n$ подматрица A' совпадает с исходной матрицей A .

Квадратная матрица A , у которой все элементы, за исключением элементов, расположенных на главной диагонали, равны нулю, называется *диагональной*:

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & a_{22} & 0 & \dots & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & \dots & a_{nn} \end{bmatrix} \quad (7)$$

В случае, если все элементы диагональной матрицы равны 1, матрица называется *единичной* и обычно обозначается как

$$E = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix} \quad (8)$$

С квадратной матрицей A связан *определитель* или *детерминант* матрицы

$$\det A = |A| = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mn} \end{vmatrix} \quad (9)$$

представляющий собой число, значение которого связано с величинами элементов матрицы соотношением

$$\det A = \sum (-1)^v a_{1\alpha_1} a_{2\alpha_2} \dots a_{n\alpha_n} \quad (10)$$

($\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$)

Здесь суммирование производится по всем возможным перестановкам (α_k) элементов $1, 2, \dots, n$, вследствие чего сумма (10) содержит $1 \cdot 2 \cdot \dots \cdot n = n!$ слагаемых. Значение $v = 0$, если перестановка четная, и $v = 1$, если нечетная.

Для прямоугольной матрицы A размера $m \times n$ определитель квадратной подматрицы k -го порядка называется *минором* k -го порядка матрицы A .

Миноры, расположенные вдоль главной диагонали квадратной матрицы A , называют *главными минорами* матрицы A .

Рангом матрицы называется максимальный порядок минора матрицы, отличного от нуля. Другими словами, если матрица A имеет минор порядка r , который отличен от нуля, а любой другой минор порядка $r+1$ и выше равен нулю, то ранг матрицы равен r . Очевидно, что ранг может быть определен как для квадратной, так и для прямоугольной матрицы.

Матрица A^T , образуемая из исходной матрицы A (1) заменой строк столбцами, называется *транспонированной*:

$$A^T = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{21} & \dots & a_{m1} \\ a_{12} & a_{22} & \dots & a_{m2} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ a_{1n} & a_{2n} & \dots & a_{mn} \end{bmatrix} \quad (11)$$

В частном случае для вектора-строки

$$A_i = (a_{i1}, a_{i2}, \dots, a_{in}) \quad (12)$$

в результате транспонирования может быть получен вектор-столбец:

$$A_i = \begin{pmatrix} a_{i1} \\ a_{i2} \\ \vdots \\ a_{in} \end{pmatrix} \quad (13)$$

и наоборот.

Действия над матрицами

Матрицы A и B считаются *равными*, т. е. $A = B$, если они имеют одинаковое число строк и столбцов, и соответствующие элементы этих матриц равны:

$$a_{ij} = b_{ij} \quad i = 1, 2, \dots, m \quad j = 1, 2, \dots, n \quad (14)$$

Если матрицы A и B одинакового размера $m \times n$, то для них может быть определена *матрица суммы* C того же размера, элементы которой вычисляются по формуле:

$$c_{ij} = a_{ij} + b_{ij} \quad (15)$$

или

$$C = A + B = \begin{bmatrix} a_{11} + b_{11} & a_{12} + b_{12} & \dots & a_{1n} + b_{1n} \\ a_{21} + b_{21} & a_{22} + b_{22} & \dots & a_{2n} + b_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{m1} + b_{m1} & a_{m2} + b_{m2} & \dots & a_{mn} + b_{mn} \end{bmatrix} \quad (16)$$

Сумма матриц обладает следующими свойствами:

$$\begin{aligned} A + (B + C) &= (A + B) + C \\ A + B &= B + A \end{aligned}$$

Аналогично определяется и *разность* матриц A и B .

Результатом *умножения* матрицы на число является матрица того же размера, которая получается умножением каждого элемента исходной матрицы на это число:

$$\alpha A = \begin{bmatrix} \alpha a_{11} & \alpha a_{12} & \dots & \alpha a_{1n} \\ \alpha a_{21} & \alpha a_{22} & \dots & \alpha a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \alpha a_{m1} & \alpha a_{m2} & \dots & \alpha a_{mn} \end{bmatrix} \quad (17)$$

При умножении матрицы A на число имеем:

$$\begin{aligned} \alpha A &= A \alpha \\ \alpha (\beta A) &= (\alpha \beta) A \\ (\alpha + \beta) A &= \alpha A + \beta A \\ \alpha (A + B) &= \alpha A + \alpha B \end{aligned}$$

Отсюда следует, что для определителя квадратной матрицы можно записать соотношение:

$$\det(\alpha A) = \alpha^n \det A \quad (18)$$

Для матрицы A размера $m \times n$ и матрицы B размера $p \times q$ при выполнении условия $n = p$ можно определить *матрицу произведения* C , размер которой

$m \times q$. Элементы матрицы произведения C при этом вычисляются по формуле

$$c_{ij} = \sum_{k=1}^n a_{ik} b_{kj} \quad i = 1, 2, \dots, m_i \quad j = 1, 2, \dots, q \quad (19)$$

т. е. элемент c_{ij} , расположенный на пересечении i -й строки и j -го столбца матрицы C , получается суммированием произведений элементов i -й строки матрицы A на соответствующие элементы j -го столбца матрицы B .

Таким образом, произведение двух матриц AB имеет смысл только тогда, когда у матрицы A в строках столько элементов, сколько элементов в столбцах матрицы B .

Матричное произведение обладает следующими свойствами:

$$A(BC) = (AB)C$$

$$\alpha(AB) = (\alpha A)B$$

$$(A+B)C = AC + BC$$

$$A(B+C) = AB + AC$$

Для произведения матриц AB свойство перестановки отсутствует, т. е. в общем случае $AB \neq BA$. Более того, матрица AB может существовать, а матрица BA — нет, как, например, в случае умножения матрицы размера 2×3 на матрицу размера 3×3 .

Если для матриц A и B справедливо равенство $AB = BA$, то эти матрицы называются *перестановочными* (коммутативными). Например, матрица E коммутативна с любой квадратной матрицей A .

Для определителя произведения квадратных матриц A и B имеем:

$$\det(AB) = \det(BA) = \det A \det B \quad (20)$$

Транспонированная матрица суммы двух матриц A и B равна сумме транспонированных матриц:

$$(A+B)^T = A^T + B^T \quad (21)$$

Транспонированная матрица произведения $(AB)^T$ равна произведению транспонированных матриц A^T и B^T , взятому в обратном порядке:

$$(AB)^T = B^T A^T \quad (22)$$

Определитель транспонированной матрицы $|A^T|$ равен определителю матрицы $|A|$:

$$\det A^T = \det A \quad (23)$$

Обратной матрицей для матрицы A , обозначаемой как A^{-1} , называется такая матрица, которая при перемножении в любом порядке с матрицей A дает в результате *единичную* матрицу E , т. е.

$$AA^{-1} = A^{-1}A = E \quad (24)$$

Вычисление обратной матрицы A^{-1} по известной матрице A называется *обращением* матрицы A .

Для любой квадратной матрицы A , у которой определитель отличен от нуля, можно найти обратную матрицу A^{-1} , вычисляемую по формуле:

$$A^{-1} = \frac{1}{|A|} [A_{ij}]^T \quad (25)$$

где $|A|$ — определитель матрицы A ; $[A_{ij}]$ — квадратная матрица с элементами, являющимися *алгебраическими дополнениями* к элементам матрицы A .

Алгебраическое дополнение $[A_{ij}]$ матрицы A порядка n представляет собой минор матрицы A , получаемый вычеркиванием i -й строки и j -го столбца у матрицы A , которому присвоен знак $(-1)^{i+j}$.

Обратная матрица обладает следующими свойствами:

$$(AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1}$$

$$(A^{-1})^T = (A^T)^{-1}$$

$$|A^{-1}| = \frac{1}{|A|}$$

С помощью обратной матрицы решение матричного уравнения

$$AX = B \quad (26)$$

может быть записано как

$$X = A^{-1}B \quad (27)$$

2. НЕКОТОРЫЕ СВЕДЕНИЯ ИЗ ТЕОРИИ ВЕКТОРНЫХ ПРОСТРАНСТВ

Совокупность чисел

$$x = (x_1, x_2, \dots, x_n) \quad (28)$$

может рассматриваться как точка или вектор n -мерного пространства. Числа x_j ($j = 1, \dots, n$) при этом называются координатами точки или компонентами вектора x .

Два вектора $x^{(1)}$ и $x^{(2)}$ равны, если равны их соответствующие компоненты, т. е. $x_j^{(1)} = x_j^{(2)}$ ($j = 1, 2, \dots, n$).

Сумма двух векторов $x^{(1)}$ и $x^{(2)}$ определяется как вектор $x^{(3)}$, компоненты которого вычисляются по формуле:

$$x_j^{(1)} + x_j^{(2)} = x_j^{(3)} \quad (29)$$

Сложение векторов подчиняется перестановочному и сочетательному законам:

$$\begin{aligned} x^{(1)} + x^{(2)} &= x^{(2)} + x^{(1)} \\ (x^{(1)} + x^{(2)}) + x^{(3)} &= x^{(1)} + (x^{(2)} + x^{(3)}) \end{aligned}$$

Аналогично находится разность вектора $x^{(1)}$ и $x^{(2)}$.

Произведение вектора x на число α определяется как

$$\alpha x = (\alpha x_1, \alpha x_2, \dots, \alpha x_n) \quad (30)$$

и обладает следующими свойствами:

$$\begin{aligned} \alpha(x^{(1)} + x^{(2)}) &= \alpha x^{(1)} + \alpha x^{(2)} \\ (\alpha + \beta)x &= \alpha x + \beta x \\ \alpha(\beta x) &= (\alpha\beta)x \end{aligned}$$

Любое выражение вида $\alpha x^{(1)} + \alpha_2 x^{(2)}$ (возможно с произвольным числом слагаемых), где $x^{(1)}$ и $x^{(2)}$ — векторы, а α_1 и α_2 — числа, называется линейной комбинацией и характеризует некоторый вектор $x^{(k)}$, который, в частности, может быть нулевым вектором, т. е. вектором с равными нулю компонентами.

Векторы $x^{(1)}, x^{(2)}, \dots, x^{(m)}$ (m произвольно) называются линейно зависимыми, если в соотношении

$$\alpha_1 x^{(1)} + \alpha_2 x^{(2)} + \dots + \alpha_m x^{(m)} = 0 \quad (31)$$

имеются отличные от нуля коэффициенты α_i .

Если же соотношение (31) может выполняться только при условии равенства нулю всех без исключения коэффициентов α_i , то векторы $x^{(1)}, x^{(2)}, \dots, x^{(m)}$ называются линейно независимыми.

Максимальное число линейно независимых векторов n -мерного пространства в точности равно n , т. е. размерности пространства.

Любые n линейно независимых векторов n -мерного пространства можно принять в качестве базиса и любой другой вектор этого пространства $x^{(k)}$ можно единственным образом представить в виде линейной комбинации векторов базиса, т. е.

$$x^{(k)} = \alpha_{1k} x^{(1)} + \alpha_{2k} x^{(2)} + \dots + \alpha_{nk} x^{(n)} \quad (32)$$

В n -мерном пространстве находится скалярное произведение двух векторов $x^{(1)}$ и $x^{(2)}$, под которым понимается число

$$x^{(1)} x^{(2)} = (x^{(1)}, x^{(2)}) = \sum_{j=1}^n x_j^{(1)} x_j^{(2)} \quad (33)$$

Из определения скалярного произведения (33) следует, что скалярное произведение вектора x на самого себя всегда будет неотрицательной величиной, так как

$$(x, x) = \sum_{j=1}^n (x_j)^2 \geq 0 \quad (34)$$

Неотрицательное число

$$|x| = \sqrt{x, x} = \sqrt{\sum_{j=1}^n (x_j)^2} \quad (35)$$

равное корню квадратному из скалярного произведения вектора x на самого себя (скалярного квадрата вектора x), называется длиной вектора x в n -мерном пространстве.

С помощью скалярного произведения определяется также угол между векторами $x^{(1)}$ и $x^{(2)}$ в n -мерном пространстве:

$$\cos \theta = \frac{(x^{(1)}, x^{(2)})}{|x^{(1)}| |x^{(2)}|} = \frac{\sum_{j=1}^n x_j^{(1)} x_j^{(2)}}{\sqrt{\left[\sum_{j=1}^n (x_j^{(1)})^2 \right] \left[\sum_{j=1}^n (x_j^{(2)})^2 \right]}} \quad (36)$$

Векторы $x^{(1)}$ и $x^{(2)}$ называются ортогональными, если их скалярное произведение равно нулю:

$$(x^{(1)}, x^{(2)}) = \sum_{j=1}^n x_j^{(1)} x_j^{(2)} = 0 \quad (37)$$

Скалярное произведение обладает следующими свойствами:

$$\begin{aligned} (x^{(1)}, x^{(2)}) &= (x^{(2)}, x^{(1)}) \\ (\alpha x^{(1)}, x^{(2)}) &= \alpha (x^{(1)}, x^{(2)}) = (x^{(1)}, \alpha x^{(2)}) \\ (x^{(1)} + x^{(2)}, x^{(3)}) &= (x^{(1)}, x^{(3)}) + (x^{(2)}, x^{(3)}) \end{aligned}$$

В n -мерном пространстве могут быть заданы некоторые функции $\varphi_i(x_1, x_2, \dots, x_n)$ ($i = 1, 2, \dots, m$) переменных x_j , совокупность значений которых определяет значение функций φ_i в данной точке пространства.

Аналогично тому как совокупность значений переменных x_j ($j = 1, 2, \dots, n$) характеризует некоторый вектор x в n -мерном пространстве, можно ввести в рассмотрение *вектор-функцию*:

$$\varphi = \begin{bmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \vdots \\ \varphi_m \end{bmatrix} \quad (38)$$

Для функции $\varphi_i(x_1, x_2, \dots, x_n)$, которая с использованием векторной записи для независимых переменных представляется также как $\varphi_i(x)$, в n -мерном пространстве определена производная $d\varphi_i(x)/dx$, являющаяся вектором, или градиентом, функции $\varphi_i(x)$. Компоненты *вектора-градиента* функции $\varphi_i(x)$, для которого применяются обозначения

$$\frac{d\varphi_i(x)}{dx} = \text{grad } \varphi_i(x) = \nabla \varphi_i(x) \quad (39)$$

определяются как частные производные от функции $\varphi_i(x_1, x_2, \dots, x_n)$ по всем независимым переменным, т. е.

$$\nabla \varphi_i(x) = \left(\frac{\partial \varphi_i(x)}{\partial x_1}, \frac{\partial \varphi_i(x)}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial \varphi_i(x)}{\partial x_n} \right) \quad (40)$$

Для вектора-функции $\varphi(x)$ также определена производная $d\varphi(x)/dx$, которая уже является *матрицей*:

$$\frac{d\varphi(x)}{dx} = W(x) = \begin{bmatrix} \nabla \varphi_1(x) \\ \nabla \varphi_2(x) \\ \vdots \\ \nabla \varphi_m(x) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \varphi_1(x)}{\partial x_1} & \frac{\partial \varphi_1(x)}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial \varphi_1(x)}{\partial x_n} \\ \frac{\partial \varphi_2(x)}{\partial x_1} & \frac{\partial \varphi_2(x)}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial \varphi_2(x)}{\partial x_n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial \varphi_m(x)}{\partial x_1} & \frac{\partial \varphi_m(x)}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial \varphi_m(x)}{\partial x_n} \end{bmatrix} \quad (41)$$

Более подробные сведения по матричной алгебре и теории векторных пространств можно найти в литературе [1—3].

ЛИТЕРАТУРА

1. Гантмахер Ф. Р. Теория матриц. М., Гостехиздат, 1953. 576 с.
2. Гельфанд И. М. Лекции по линейной алгебре. М., Гостехиздат, 1951.
3. Шилов Г. Е. Введение в теорию линейных пространств. М., Гостехиздат, 1952.

ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ

Алгоритмы 44
 моделирующие 45, 52 сл., 72, 74
 поиска оптимума, программирование
 динамическое 282 сл.
 линейное 446 сл.
 нелинейное 487 сл., 491 сл.,
 506 сл., 510, 517, 521, 522
Аппроксимация кусочно-линейная при
 решении вариационных задач 233, 234

Безградиентные методы, поиск 500
 с использованием
 «золотого сечения» 502 сл.
 чисел Фибоначчи 505 сл.
 локализацией экстремума функции
 одной переменной 501, 502
 при наличии «оврагов» целевой
 функции 516 сл.
 поочередным изменением переменных 507, 508
 на сетке переменных 508 сл.
 симплексный 512 сл.
 сканированием
 с переменным шагом 510, 511
 по спирали 511, 512
 шагами по «оврагу» 517
Беллмана уравнение 300 сл.
Блочный принцип разработки математического описания 47, 48

Вариационное исчисление 29, 32, 33, 36
 математический аппарат 210 сл.
 оптимизация температурных профилей в реакторах идеального вытеснения 234 сл.
 основные понятия 202 сл.
 и принцип максимума 402 сл.

Векторы
 базисные 421 сл.

Векторы
 градиенты в методе проектирования при поиске оптимума 534 сл., 541, 542, 569
 действия над ними 567 сл.
 небазисные 422, 435, 436
 ортогональные 568
 параметров объекта 56
 столбцы и строки 563
 управления и состояния, размерности 57, 268, 274 сл., 280 сл.
 функции 569
Время релаксации 51
Выборки метод получения случайных чисел 523
Выпуклое программирование 406
Выврожденные задачи 418, 454
Выход целевого продукта
 и оптимальная температура процесса 240
 в реакторах различных типов 139 сл.
Вычетов метод получения случайных чисел 524
Вычислительная процедура
 вариационного исчисления 225 сл.
 принципа максимума 334 сл.
 программирования
 геометрического 554 сл.
 динамического 268 сл.
 линейного 420 сл., 441 сл.

Гамильтониан 322 сл.
Гаусса — Зейделя метод детерминированного поиска оптимума 510, 511
Геометрическое программирование 34 сл.
 двойственная функция 549 сл.
 задачи с ограничениями 551 сл.
 оптимизация
 процесса фильтрации 560 сл.
 размеров емкости 557 сл.

Голономные связи 222
 Градиентные методы 486
 градиенты 491 сл.
 наискорейшего спуска 493
 поиска
 глобального экстремума 500
 оптимума при известном аналитическом выражении градиента 496 сл.
 релаксации 487 сл.
 «тяжелого шарика» 500
 Граничные условия
 в вариационном исчислении 214 сл.
 естественные 219
 в принципе максимума 329 сл.
 Двухпараметрическая диффузионная модель 61
 Динамические характеристики 55
 Динамическое программирование 32, 33, 35, 36
 алгоритмы поиска оптимума 282 сл.
 и Лагранжа метод множителей 280 сл.
 оптимизация
 реакционных объемов в каскаде реакторов 287 сл.
 температурных профилей в реакторах идеального вытеснения 303 сл.
 основные понятия 257 сл.
 и принцип максимума 403 сл.
 принцип оптимальности 260, 261
 для процессов дискретных 266 сл.
 — — с распределенными параметрами 295, 296
 Дифференциальные уравнения
 Беллмана 300 сл.
 обыкновенные и в частных производных 50, 51
 Диффузионные модели 60, 61
 Задачи
 о быстродействии 312 сл.
 вырожденные 418, 454
 двойственные 455 сл., 467 сл.
 изопериметрические 220 сл.
 комбинаторные 261 сл.
 с ограничениями, метод вариационного исчисления 220 сл.
 программирования геометрического 551 сл.
 — линейного 407 сл.
 Знаки производных функций одной переменной 94 сл.

«Золотого сечения» метод поиска оптимума 502 сл.
 Игольчатые вариации 314 сл.
 Интегральные оценки, см. Функционалы
 Источники массы и тепла в потоках 62 сл.
 Каскад реакторов идеального смешения
 время пребывания 166 сл.
 выход целевых продуктов 141 сл.
 графический расчет 181
 оптимизация, метод (ы)
 динамического программирования 287 сл.
 дискретный принцип максимума 395 сл.
 классического анализа 141 сл.
 множителей Лагранжа 166 сл.
 распределение объемов 170 сл.
 Квадратные матрицы 563, 564
 Классический анализ 29 сл., 36
 оптимизация
 теплообменных аппаратов 103 сл.
 химических реакций 108 сл.
 функций
 многих переменных 97 сл.
 одной переменной 92 сл.
 Ключевые компоненты сложной реакции 76 сл.
 Концентрации, изменение
 в идеальных реакторах вытеснения 60, 61, 88 сл.
 смешения 59, 80 сл.
 в ректификационных колоннах 73
 Координаты фазовые 56, 57
 Косинусы направляющие 482
 Кривые разгона 55
 Критерии оптимальности
 нормы прибыли и рентабельности 18 сл.
 оценки
 интегральные, см. Функционалы
 экономические 14 сл.
 чувствительность оптимума 37 сл.
 Лагранжа метод множителей 29 сл., 36
 и динамическое программирование 280 сл.
 и принцип максимума 402, 404
 оптимизация
 процессов многостадийных 163 сл.

оптимизация
 процессов с распределенными
 параметрами 186 сл.
 распределения ресурсов между
 аппаратами 154 сл.
 основные понятия 148 сл.
Лежандра условия 214
 Линейное программирование 29, 33,
 34, 36
 алгоритмы поиска оптимума
 446 сл.
 геометрическая интерпретация
 407 сл.
 задачи
 вырожденные 418, 454
 с ограничениями 412 сл.
 решение базисное 437 сл.
 — симплексным методом
 420 сл.
 оптимизация организации произ-
 водства при ограниченных
 запасах сырья 465 сл.
 принцип двойственности 455 сл.
 Линейные формы 407, 412 сл.

Максимальные и минимальные функцио-
 налы 203, 255
 Маргинальные значения 427, 455 сл.
 Масштаб подобия 42
 Математическое моделирование 28,
 43, 44
 Математическое описание 27, 47 сл.
 Матрицы
 единичные 436, 564 сл.
 действия над ними 441 сл., 565 сл.
 диагональные 564
 квадратные 563, 564
 миноры 564
 обратные 434 сл., 441 сл., 566, 567
 определители (детерминанты) 564,
 566
 перестановочные 566
 прямоугольные 563
 транспонированные 564, 565
 Модели 27, 41 сл.
 гидродинамические 47, 48, 58 сл.
 идеального вытеснения 58, 87 сл.
 — смещения 59, 60, 80 сл.
 квазиустойчивые 52
 комбинированные 61
 неполной аналогии 44
 неустойчивые 50 сл.
 объектов, адекватность 28
 с параметрами
 внутренними 51, 54, 55
 распределенными и сосредото-
 ченными 52
 процессов
 массообменных 69 сл.

Модели

тепловых 65 сл.
 химических 74 сл.
 статистические 48
 стационарные 50, 52
 характеристики 55 сл.
 ячеечные 51

Наискорейшего спуска метод 493 сл.,
 544
 Неголономные связи 222 сл.
 Нелинейное программирование 29, 30,
 34, 36, 475 сл.
 оптимизация, методы
 безградиентные, см. Безгради-
 ентные методы
 градиентные, см. Градиентные
 методы
 случайного поиска 518 сл.,
 543 сл.
 целевая функция, см. Целевая
 функция
 Неравенство геометрическое 548, 549

Обобщенного критерия метод при
 поиске оптимума 537 сл.,
 542, 543
 Оптимизаторы 34
 Оптимизация
 динамическая и статическая 23,
 24
 ресурсы 13
 Оптимум
 поиск, см. Поиск оптимума
 целевой функции 480
 чувствительность, см. Чувстви-
 тельность оптимума
 Оценка (и)
 адекватности модели реальному
 процессу 28
 интегральные, см. Функционалы
 экономической эффективности
 процессов 14 сл.

Параметры
 внутренние 25
 входные и выходные 24 сл.
 конструктивные 46
 ограничения на них 49
 управляющие и возмущающие 24
 физические 46, 47
 «элементарных» процессов 47
 Планы оптимальные задач линейного
 программирования 409 сл.
 Плоскость фазовая
 областей начальных и конечных
 состояний процесса 206

Плоскость фазовая
 переменных параметров объекта 56
 реакторов идеального вытеснения 215

Поверхность
 теплообмена, оптимизация 103 сл.
 фазовая постоянного уровня для целевой функции 482, 483

Подматрицы 437 сл., 563, 564

Подобие объектов 42, 43

Подоптимизация 14

Позиномы 547, 548

Поиск оптимума
 алгоритмы, см. Алгоритмы поиска оптимума
 метод(ы) 543 сл.
 безградиентные, см. Безградиентные методы
 градиентные, см. Градиентные методы
 обобщенного критерия («штрафов») 537 сл., 542, 543
 отыскания начальной точки спуска 527 сл.
 проектирования вектора-градиента 534 сл., 541, 542
 прямой с возвратом 534, 539 сл.
 случайные 518 сл., 543 сл.

Поочередного изменения переменных метод поиска оптимума 507, 508

Принцип
 двойственности 455 сл.
 оптимальности
 вычислительная процедура 300 сл.
 для процессов дискретных 266 сл.
 — — непрерывных 297 сл.
 — — с распределенными параметрами 295 сл.
 управления 260, 261

Принцип максимума 29, 30, 33, 36, 310 сл.
 аналитическое выражение 320
 вычислительная процедура 334 сл.
 дискретный 393 сл.
 о быстродействии 312 сл.
 для задач
 о быстродействии 312 сл.
 с критерием оптимальности в виде функционала 325 сл.

оптимизация
 распределения подпитки исходным веществом 361 сл.
 температуры в реакторах идеального вытеснения 367 сл.
 управления 313 сл., 324, 335 сл., 348 сл.

Проб метод 282

Проектирования вектора-градиента метод 534 сл., 541, 542

Произведений метод получения случайных чисел 524

Производительность процесса 15
 и прибыль 20, 22, 23
 и себестоимость продукции 19, 20

Пространство фазовое
 областей начальных и конечных состояний процесса 203, 206
 переменных параметров объекта 57

Процессы
 детерминированные 25
 дискретные 266 сл.
 массообменные 69 сл.
 математическое описание 27, 47 сл.
 многостадийные 163 сл., 257 сл., 268 сл., 282 сл.
 модели, см. Модели
 непрерывные 297 сл.
 с однородными и неоднородными стадиями 257, 258
 оптимизация, см. Оптимизация
 переходные 55
 с распределенными параметрами 186 сл., 295 сл.
 стохастические 25
 тепловые 65 сл.
 химические, см. Химические процессы
 экономическая эффективность, оценка 14 сл.

Прямого поиска с возвратом метод 534, 539 сл.

Размерность оптимальных задач 268, 274 сл., 280 сл.

Распределение
 объемов в каскаде реакторов идеального смешения 170 сл., 287 сл.
 подпитки исходным веществом 361 сл.
 сырья между параллельно работающими аппаратами 154 сл.

Реакторы
 адиабатические 128 сл.
 изотермические 253 сл.

Реакторы идеального вытеснения и смешения
 время пребывания 166 сл., 307, 308
 выход целевых продуктов 139 сл.
 каскад, см. Каскад реакторов идеального смешения
 модели 58 сл., 80 сл.

Реакторы

- оптимизация, метод(ы)
 - вариационного исчисления 207 сл., 220 сл., 234 сл.
 - динамического программирования 287 сл., 303 сл.
 - классического анализа 108 сл., 117 сл.
- множителей Лагранжа 195 сл.
- принцип максимума 367 сл.
- распределение
 - подпитки исходным веществом 361 сл.
 - сырья между аппаратами 157 сл., 162, 163
- секционирование 253, 254
- состав смеси на выходе 81 сл., 88 сл.
- ступенчатые 123 сл.
- температурные профили 121, 195 сл., 220 сл., 234 сл., 303 сл., 367 сл.

Реакции

- обратимые 303 сл.
- параллельные 234 сл.
- последовательные 367 сл.
- селективность 136 сл.
- скорость 74 сл.
- экзотермические 128 сл.

Регуляторы оптимальные, синтез 376 сл.

Ректификационная тарельчатая колонна, модель 70 сл.

Релаксации метод 487 сл.

Ритца метод 232, 233

Себестоимость продукции и ее составляющие 15 сл.

Седловые точки, функция(и) двух переменных 99

целевая 479

Сильвестра условия 101 сл.

Симплексный метод

детерминированного поиска оптимума 34, 512 сл., 545

решения линейных задач 420 сл.

Скалярные величины

для ступеней многостадийного процесса 260

функционалов 202

Сканирования метод 34, 510 сл.

Слепой поиск 519 сл.

Случайные методы поиска оптимума 518 сл., 543 сл.

Случайных направлений метод поиска 521, 522, 544

Спуска метод «с наказанием случайностью» 522, 523

Статические характеристики 55

Степень превращения

- в идеальных реакторах
 - вытеснения 307, 308
 - смешения 184, 185
- и селективность реакций 136 сл.
- и температура 121 сл.
- для экзотермических реакций 128 сл.

Степень трудности задач геометрического программирования 555

- Стратегия управления оптимальная для процессов
 - дискретных 266 сл.
 - многостадийных 260, 261
- при решении комбинаторных задач 261 сл.

Температурные профили 111, 113

- с ограничениями на температуру процесса и при их отсутствии 235 сл.

в прямоточных теплообменниках 68

в реакторах

- адиабатических 130, 135
- идеального вытеснения 121, 195 сл., 220 сл., 234 сл., 303 сл., 367 сл.

Тепловые процессы, модели 65 сл

Точки

- начальные спуска при поиске оптимума 527 сл.
- седловые, см. Седловые точки
- случайные 519

Траектория фазовая движения объекта 56

вариации 315 сл.

в вариационном исчислении 203, 206

в нелинейном программировании 487 сл., 493 сл.

в принципе максимума 311, 313 сл., 338, 339, 380 сл.

Трансверсальности условия, метод вариационное исчисление 218, 219

принцип максимума 331 сл.

«Тяжелого шарика» метод 500

Управления (Управляющие воздействия) 13, 24 сл.

векторы 268, 274 сл., 280 сл.

для многостадийных процессов 257 сл.

оптимизация с применением принципа максимума 313 сл., 324, 335 сл., 348 сл.

стратегия, см. Оптимальная стратегия управления

Уравнение(я)

баланса масс и энергии 48, 49
Беллмана 300 сл.
в вариациях 316 сл.
дифференциальные, см. Дифференциальные уравнения
конечные 50
для массо- и теплообмена потока с окружающей средой 64
матричное 567
для химической реакции в потоке 63, 64

Эйлера 32, 210 сл., 225 сл.
«элементарных» процессов 49

Условия

граничные, см. Граничные условия
Лежандра 214
ортогональности 549
Сильвестра 101 сл.
трансверсальности, см. Трансверсальности условия

Фибоначчи числа 505 сл.

Физическое моделирование 43

Формализация объектов моделирования 43 сл.

Функции(я)

векторы 569
граничные условия 214 сл.
двойственная 549 сл.
квадратичные формы 101
многих переменных 97 сл.
одной переменной 92 сл.
целевая, см. Целевая функция
экономические 407

экстремумы, см. Экстремумы

Функционалы

24
вариации 212, 213, 215
в принципе максимума 325 сл.
скалярные величины 202
условные экстремумы 222 сл.
экстремали 202, 203, 210 сл.

Химические процессы, см. также Реакторы и Реакции
ключевые компоненты 76 сл.
скорость 74 сл.
уравнения 63, 64

Целевая функция

геометрическая интерпретация 477 сл.
глобальный и локальный оптимумы 480, 481
градиент 481 сл.
линии постоянного уровня 479
нормализация независимых переменных 476, 477
овраги 479, 480, 516 сл.

Число(а)

случайные и псевдослучайные 523 сл.
ступеней в каскаде реакторов, оптимизация 131
Фибоначчи 505 сл.

Чувствительность оптимума

в вариационном исчислении 253 сл.
как оценка изменения критерия оптимальности 37 сл.

«Штрафов» метод поиска оптимума 537 сл., 541, 542

Эйлера уравнения 32, 210 сл., 225 сл.

Экстракция с перекрестным током
модель 73, 74
оптимизация с применением дискретного принципа максимума 399 сл.

Экстремумы

безусловные 92
глобальные и локальные 96, 97
отыскание, метод(ы)
классического анализа 92 сл.
множителей Лагранжа 148 сл.
условные (относительные) 149 сл.
функций
многих переменных 97 сл.
одной переменной 92 сл., 501, 502

Элементы линейные релейные 384

Ячейки памяти стандартные 447 сл.

Анатолий Иванович Бояринов
Виктор Вячеславович Кафаров
Методы оптимизации в химической технологии

Редактор *М. Н. Ратманский*
Технический редактор *В. М. Скитина*
Художник *В. М. Казинцев*
Корректоры *М. С. Хрипунова, В. А. Лисицына*

Т-04387. Сдано в наб. 8/X 1974. Подп. в печ. 14/III 1975 г.
Формат бумаги 60×90^{1/16}. Бумага тип № 2. Усл. печ. л. 36.
Уч.-изд. л. 35,03. Тираж 10 000 экз. Зак. 372. Изд. № 913.
Ц. 1 р. 39 к.

Издательство «Химия». 107076, Москва, ул. Стромынка, 13.

Ордена Трудового Красного Знамени
Ленинградская типография № 2 имени Евгении Соколовой
Союзполиграфпрома при Государственном комитете
Совета Министров СССР по делам издательств,
полиграфии и книжной торговли.
198052, Ленинград. Л-52, Измайловский проспект, 29.