# ОПТИМИЗАЦИЯ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕКИХ ПРОЦЕССОВ

Модуль 1. Лекция.

Безусловная оптимизация методом классического математического анализа

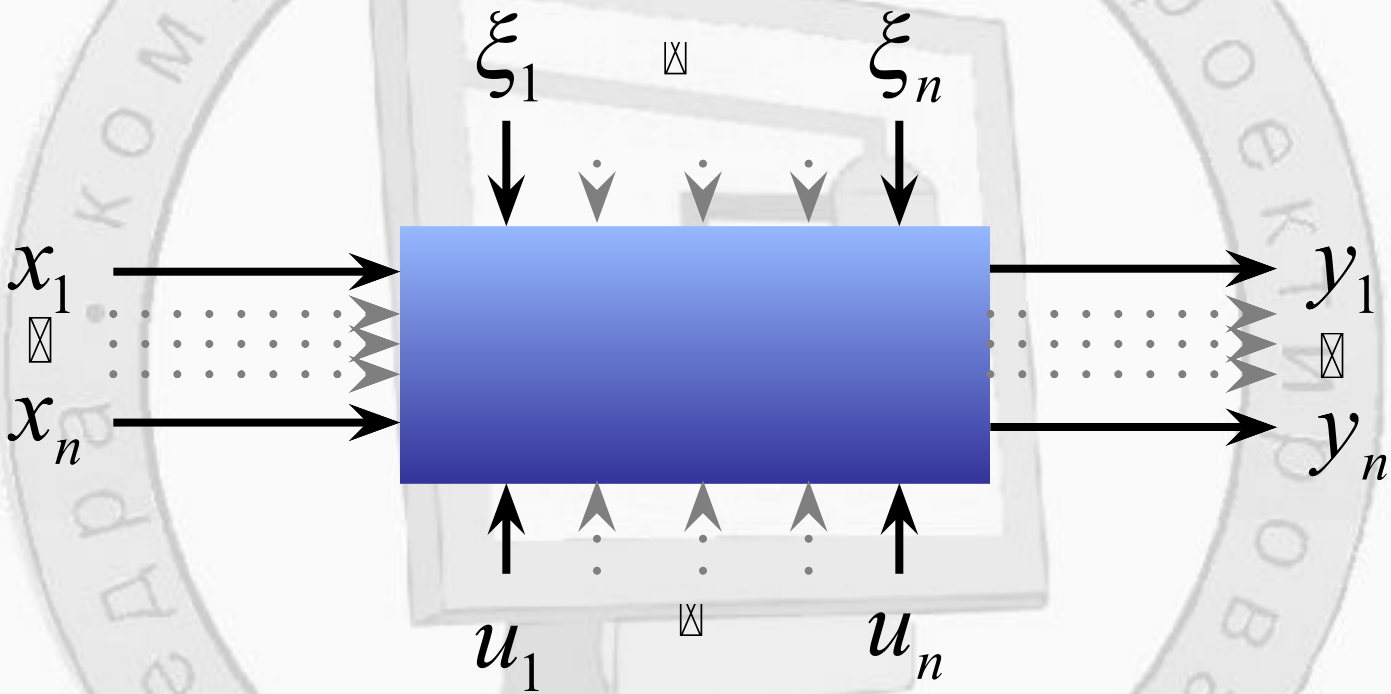
# ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ ОПТИМИЗАЦИИ ХТП

**Оптимизация ХТП** – это достижение наилучших результатов функционирования ХТП (Химико-Технологического Процесса) в смысле заданного критерия оптимальности (целевой функции) при заданных условиях.

*Корректное решение задачи оптимизации ХТП возможна при выполнении следующих условий:*

- выбран или сформулирован критерий оптимальности, представляющий собой количественную оценку качества функционирования ХТП
- используемый при решении задачи оптимизации функционирующий критерий оптимальности является единственным и количественным
- имеются в распоряжении ресурсы оптимизации – оптимизирующие или управляющие параметры процесса (ХТП)
- функционирующий критерий оптимальности является чувствительным к изменению оптимизирующих параметров ХТП
- разработана и реализована на компьютере адекватная модель процесса
- выбран и реализован на компьютере алгоритм оптимизации ХТП

Основные группы параметров математической модели, определяющих течение процесса и характеризующих его состояние:



$\bar{x}$ - Входные параметры (влияющие на состояние процесса, но на которые нельзя воздействовать)

$\bar{u}$ - Управляющие(оптимизирующие) параметры – ресурсы оптимизации (влияющие на состояние процесса, на них можно воздействовать)

$\bar{\xi}$ - Возмущающие параметры (не учитываются в случае детерминированных процессов)

$\bar{y}$ - Выходные параметры (характеризуют состояние процесса).

# ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ ОПТИМИЗАЦИИ ХТП

Математическая модель детерминированного процесса, которая может быть реализована на компьютере с применением **alg MM**:

$$\overline{y} = \overline{\varphi}(\overline{x}, \overline{u})$$

Критерий оптимальности детерминированного процесса:

$$R = R(\overline{x}, \overline{y}, \overline{u})$$

Решение задачи оптимизации – определение наименьшего (в частном случае, ***min*** )или наибольшего (в частном случае, ***max)*** величины $R$ с применением ***alg ОПТ***.

Поскольку выходные параметры $\bar{y}$ зависят от параметров $\bar{x}$ и $\bar{u}$ , критерий оптимальности $R$ при решении

задачи оптимизации считается функцией только входных и управляющих параметров процесса:

$$R = R(\bar{x}, \bar{u})$$

Таким образом, задача оптимизации может быть решена с применением компьютера только тогда, когда известен вид зависимостей:

$$y_i = \varphi_i(\overline{x}, \overline{u}) \quad i = 1, 2, \ldots, n$$

или адекватная математическая модель, позволяющая при различных входных и управляющих параметрах процесса определять его выходные параметры.

Однако так как на входные параметры $\overline{x}$ нельзя воздействовать, они не могут быть оптимизирующими или управляющими параметрами.

**Задача оптимизации решается с целью определения оптимальных значений оптимизирующих или управляющих параметров $\overline{u}^{опт}$, при которых критерий оптимальности (целевая функция) $R$ принимает наибольшее (в частном случае – максимальное) или наименьшее (в частном случае – минимальное) значение.**

Корректное решение задачи оптимизации возможно только в диапазоне входных $\overline{x}$, управляющих $\overline{u}$ и выходных $\overline{y}$ параметров, в которых обеспечивается адекватность модели процесса.

В этом случае задача формулируется как задача на поиск экстремума функции многих переменных

$$R = R(\overline{u})$$

в области допустимых значений оптимизирующих (управляющих) параметров $\overline{u}$.

Если в дальнейшем принять, что $\bar{u} \equiv \bar{x}$ , то формулировка задачи оптимизации имеет вид и, в общем случае, является задачей на экстремум функции многих переменных (экстремальной задачей):

$$\underset{\bar{x} \in \bar{x}^{доп}}{extr}\, R(\bar{x})$$

Таким образом, для решения задачи оптимизации требуется определить такие значения оптимизирующих или управляющих параметров $\bar{x}^{опт}$ из области их допустимых значений $\bar{x}^{доп}$, при которых $R$ принимает максимальное или минимальное значение.

Максимальное или минимальное значение $R$ не всегда являются наибольшим или наименьшим.

*Глобальные и локальные экстремумы функции в интервале исследования:*

Строгое решение задачи оптимизации предполагает поиск наибольших или наименьших значений целевой функции

$$R(\bar{x})$$

# ИССЛЕДОВАНИЕ ЭКСТРЕМУМА ФУНКЦИЙ МЕТОДОМ КЛАССИЧЕСКОГО МАТЕМАТИЧЕСКОГО АНАЛИЗА

Методы исследования функций классического анализа могут применяться в случае, если известен вид зависимости

$$R(\overline{x})$$

При этом возможно аналитическое определение производных оптимизируемой функции $R$, используемых для формирования необходимых и достаточных условий существования экстремума.

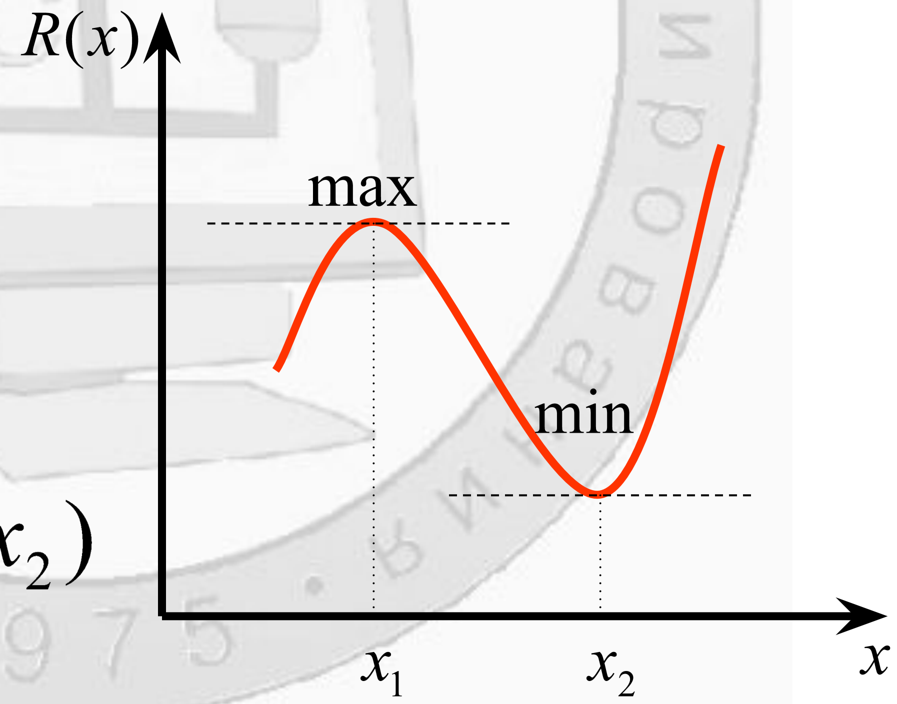
# ЭКСТРЕМУМЫ ФУНКЦИЙ ОДНОЙ ПЕРЕМЕННОЙ

*Необходимое условие* существования экстремума

Непрерывная функция *R(x)* может иметь экстремумы при таких значениях $x$, что:

$$a)\ \left.\frac{dR}{dx}\right|_{x=x_{opt}} = 0$$

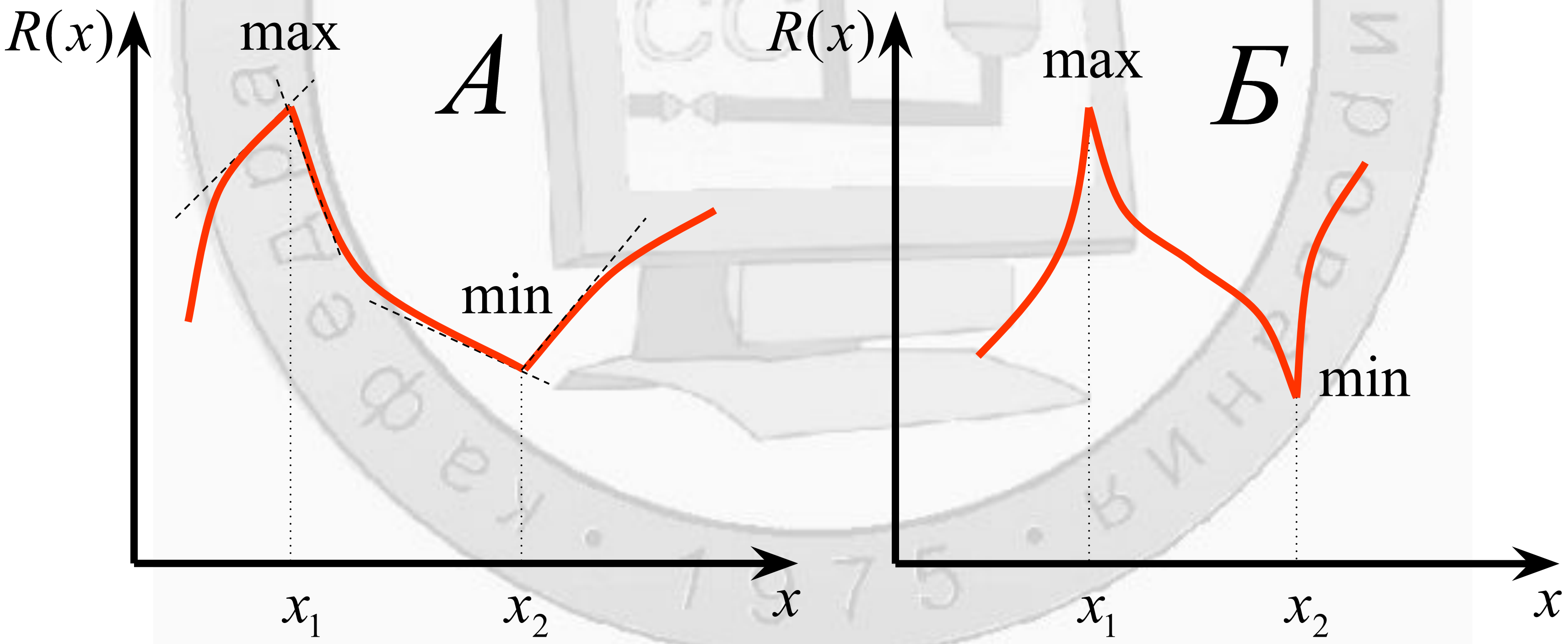
$$(x_{opt} = x_1)\ или\ (x_{opt} = x_2)$$



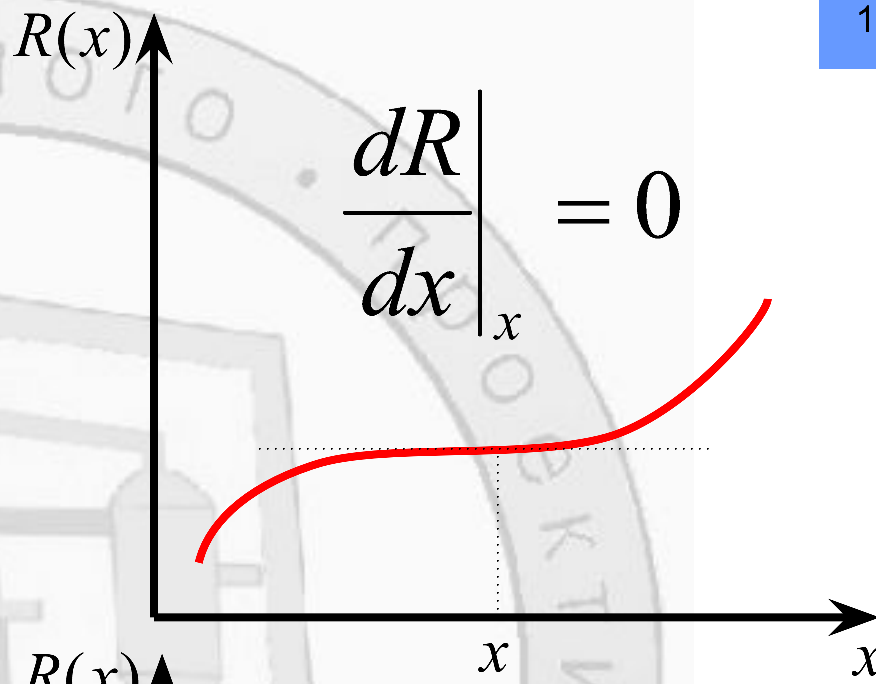
б) $\dfrac{dR}{dx}$ **не равно 0**. а экстремум существует:

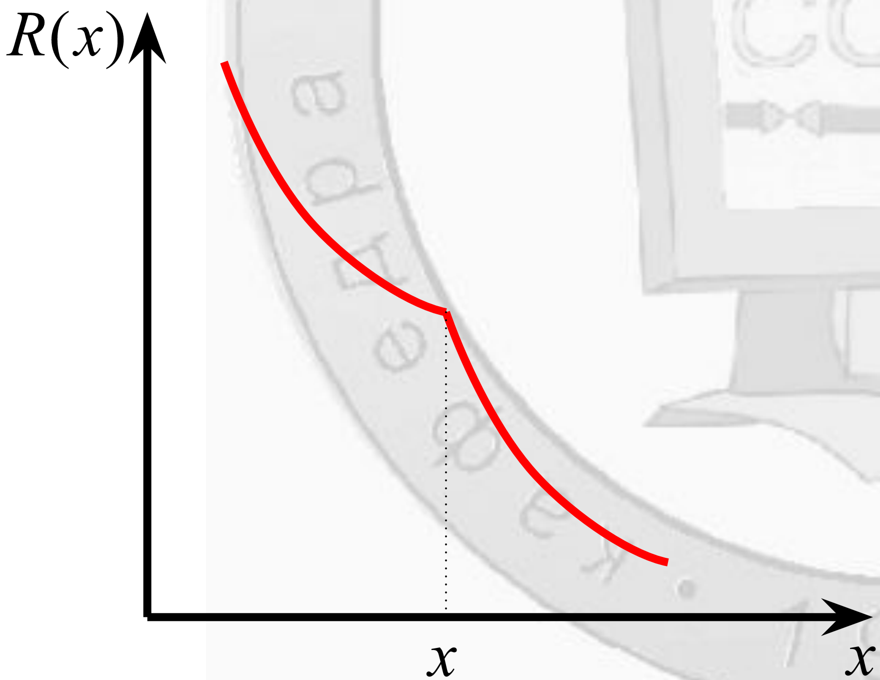
А) Различные значения производных справа и слева от экстремума

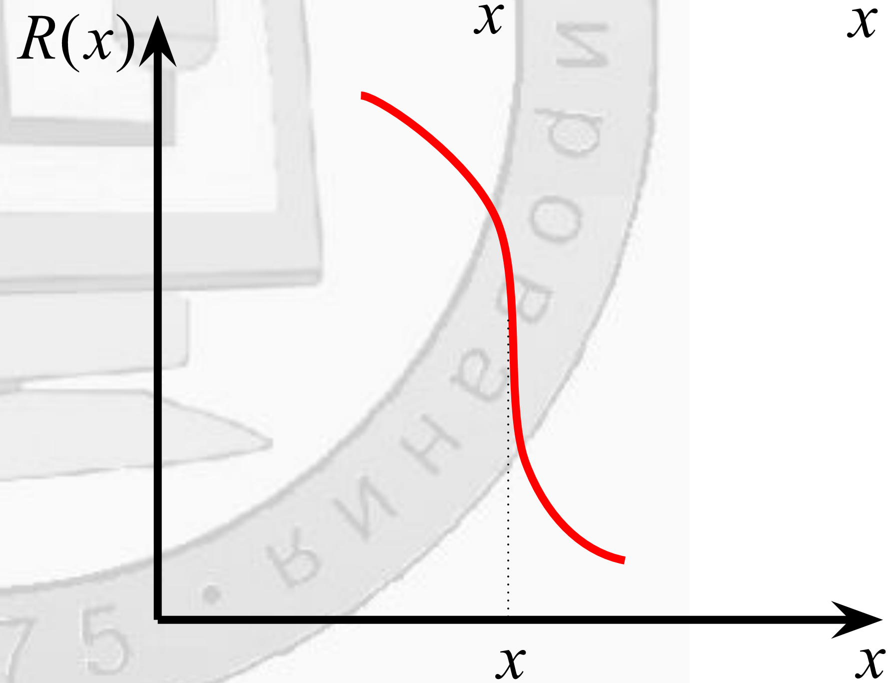
Б) Бесконечный разрыв производных, изменяющихся от плюс бесконечности до минус бесконечности и наоборот



в) Примеры отсутствия экстремума при равенстве нулю производной в точке экстремума или когда она не существует :



Для подтверждения наличия экстремумов в определенных точках необходимо проводить дополнительные исследования:

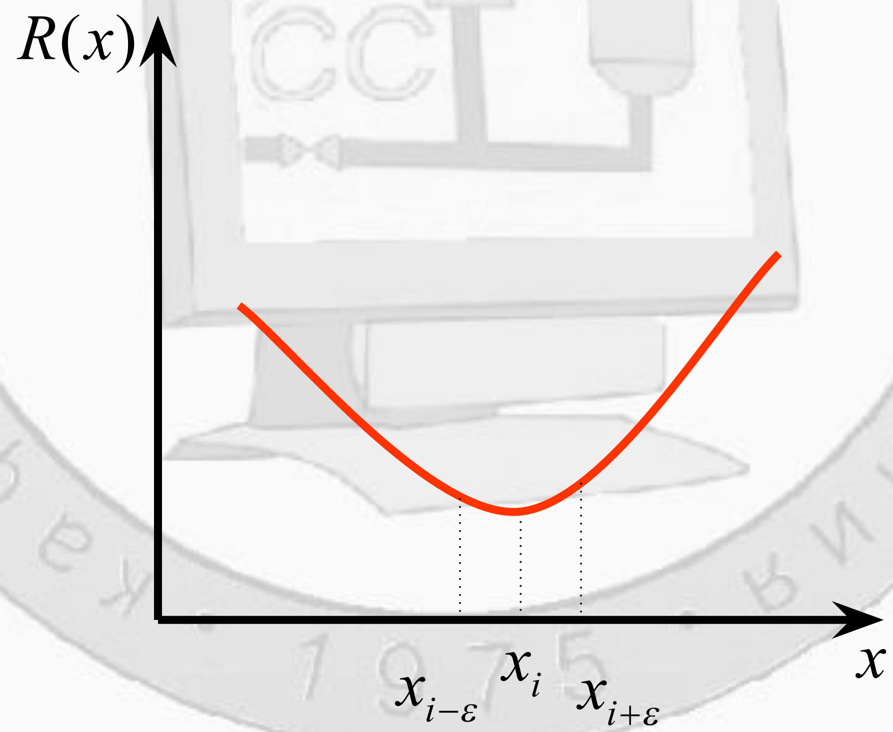
1. Сравнение значений функции справа и слева от предполагаемого экстремума

2. Сравнение знаков производных функции справа и слева от предполагаемого экстремума

3. Исследование знаков производных высших порядков

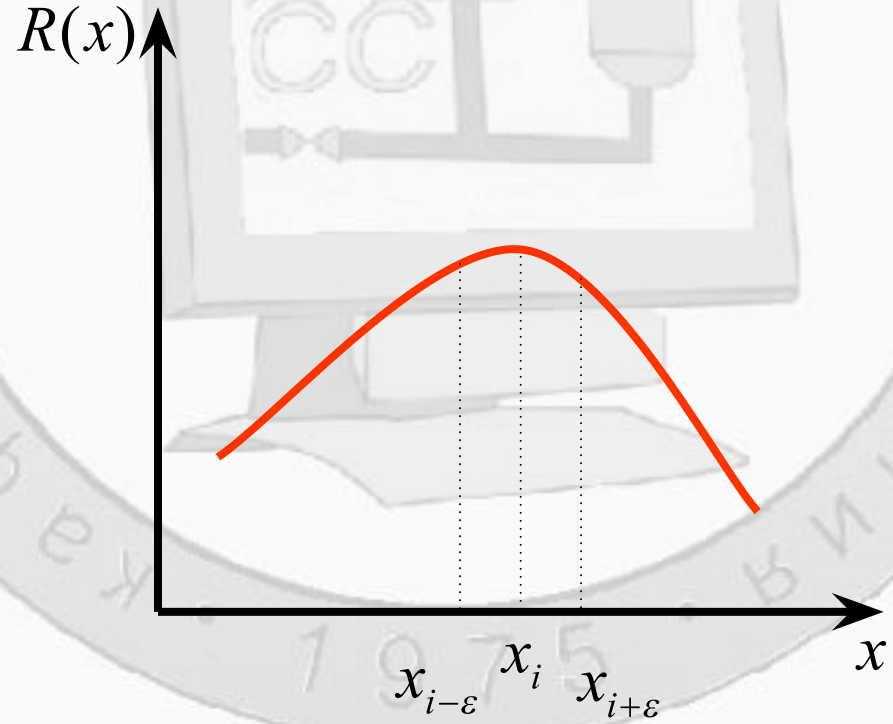
# I. *Сравнение значений функции справа и слева от предполагаемого экстремума* $x_i$

$$R(x_{i-\varepsilon}) > R(x_i) < R(x_{i+\varepsilon})$$



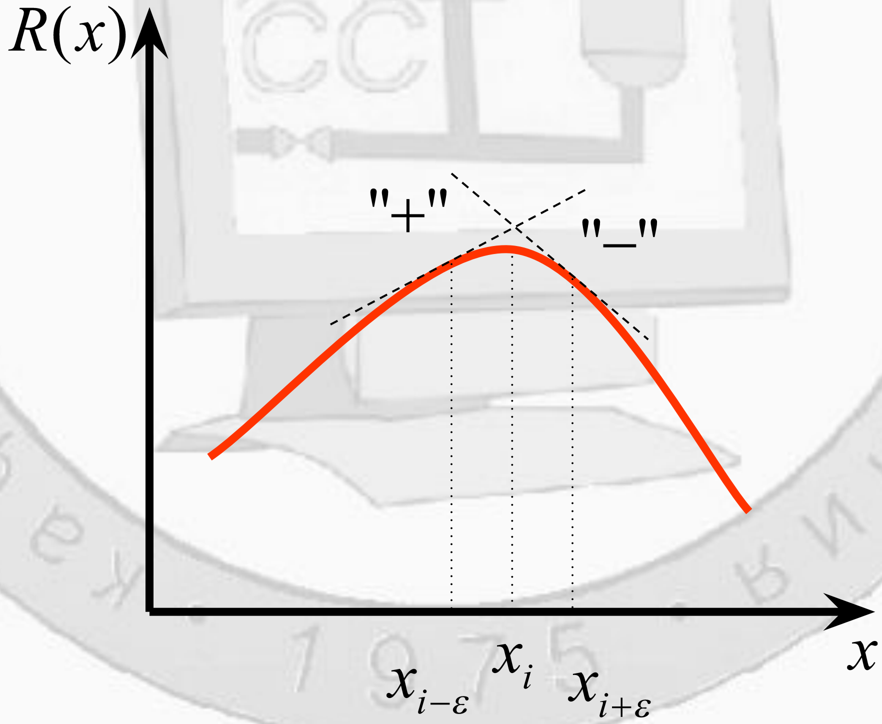
## *Сравнение значений функции справа и слева от предполагаемого экстремума* $x_i$

$$R(x_{i-\varepsilon}) < R(x_i) > R(x_{i+\varepsilon})$$



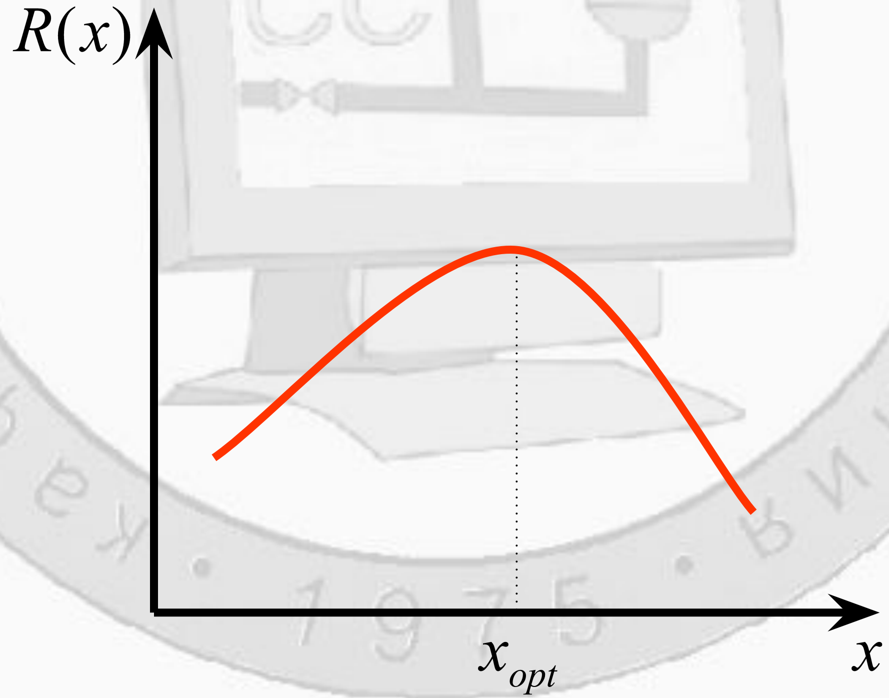
II. *Сравнение знаков производной функции справа и слева от предполагаемого экстремума* $x_i$

$$sign\frac{dR}{dx}_{i-\varepsilon} \neq sign\frac{dR}{dx}_{i+\varepsilon}$$



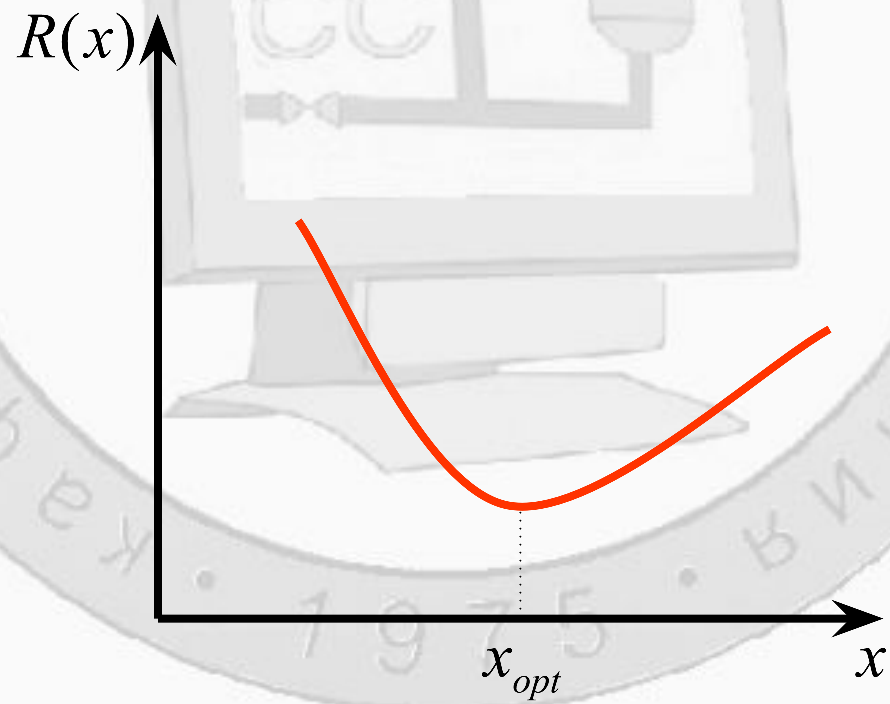
## III. *Исследование знаков производных функции высших порядков в точке предполагаемого экстремума* $x_{opt}$

$$\left.\frac{dR}{dx}\right|_{x_{opt}} = 0 \qquad \left.\frac{d^2R}{dx^2}\right|_{x_{opt}} < 0 \Rightarrow \max$$



## *Исследование знаков производных функции высших порядков в точке предполагаемого экстремума*

$$\left.\frac{dR}{dx}\right|_{x_{opt}} = 0 \qquad \left.\frac{d^2R}{dx^2}\right|_{x_{opt}} > 0 \Rightarrow \min$$



# ЭКСТРЕМУМЫ ФУНКЦИЙ МНОГИХ ПЕРЕМЕННЫХ



Функция многих переменных $R(\overline{x})$ имеет в точке $\overline{x}^{(0)} \equiv \overline{x}_{opt}$ максимум (минимум), если существует такая окрестность этой точки, взятая на области определения функции, что для всех точек этой окрестности справедливо следующее неравенство:

$$R(\overline{x}) < R(\overline{x}^{(0)})$$

или

$$R(\overline{x}) > R(\overline{x}^{(0)})$$

***Необходимым условием*** существования экстремума функции многих переменных в точке $\bar{x}^{(0)}$ является равенство нулю частных производных первого порядка по всем переменным:

$$\left(\frac{\partial R}{\partial x_i}\right)_{\bar{x}=\bar{x}^{(0)}} = 0$$

$$i = 1, 2, ..., n$$

Равнозначным условием является условие равенства нулю полного дифференциала дифференцируемой функции $R(\overline{x})$ в точке экстремума $\overline{x}^{(0)}$

$$dR(\overline{x})\Big|_{\overline{x}=\overline{x}^{(0)}} = 0$$

Поскольку

$$dR(\overline{x})\Big|_{\overline{x}=\overline{x}^{(0)}} = \frac{\partial R}{\partial x_1}\Big|_{\overline{x}=\overline{x}^{(0)}} \cdot dx_1 + \frac{\partial R}{\partial x_2}\Big|_{\overline{x}=\overline{x}^{(0)}} \cdot dx_2 + \ldots +$$

$$+ \frac{\partial R}{\partial x_n}\Big|_{\overline{x}=\overline{x}^{(0)}} \cdot dx_n = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial R}{\partial x_i}\Big|_{\overline{x}=\overline{x}^{(0)}} \cdot dx_i = \sum_{i=1}^{n} 0 \cdot dx_i = 0$$

***Достаточные условия*** существования экстремума функции многих переменных

Разложив функцию $R(\bar{x})$ в окрестности точки $\bar{x}^{(0)}$ в ряд Тейлора по степеням $\Delta x_i$ :

$$R(x_1^{(0)}+\Delta x_1, x_2^{(0)}+\Delta x_2, \ldots, x_n^{(0)}+\Delta x_n) = R(\bar{x}^{(0)}) +$$

$$+\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\partial R}{\partial x_i}\right)\Bigg|_{\bar{x}=\bar{x}^{(0)}} \cdot \Delta x_i + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\frac{\partial^2 R}{\partial x_i \partial x_j}\Bigg|_{\bar{x}=\bar{x}^{(0)}} \Delta x_i \cdot \Delta x_j + \ldots$$

с учётом необходимого условия существования экстремума:

$$\Delta R(\bar{x})\Big|_{\bar{x}=\bar{x}^{(0)}} = R(\bar{x}^{(0)} + \Delta\bar{x}) - R(\bar{x}^{(0)})$$

$$dR(\bar{x})\Big|_{\bar{x}=\bar{x}^{(0)}} \approx \Delta R(\bar{x})\Big|_{\bar{x}=\bar{x}^{(0)}}$$

$$dR(\bar{x})\Big|_{\bar{x}=\bar{x}^{(0)}} = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial R}{\partial x_i}\Bigg|_{\bar{x}=\bar{x}^{(0)}} \cdot \Delta x_i = 0$$

Если выражение

$$\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\left.\frac{\partial^2 R}{\partial x_i \partial x_j}\right|_{\bar{x}=\bar{x}^{(0)}} \Delta x_i \cdot \Delta x_j$$

сохраняет один и тот же знак для любых приращений

$$\Delta x_i \qquad \Delta x_j$$

то экстремум функции $R(\bar{x})$ в точке $\bar{x}^{(0)}$ существует.

# Приращение целевой функции в окрестности экстремума определяется

$$\Delta R(\bar{x}^{(0)}) = R(x_1^{(0)} + \Delta x_1, x_2^{(0)} + \Delta x_2, \ldots, x_n^{(0)} + \Delta x_n) - R(\bar{x}^{(0)})$$

Обозначив:

$$\left.\frac{\partial^2 R}{\partial x_i \partial x_j}\right|_{\bar{x}=\bar{x}^{(0)}} = a_{ij}$$

$$\Delta x_i = z_i$$

$$\Delta x_j = z_j$$

получаем выражение вида:

$$\Delta R = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} \left.\frac{\partial^2 R}{\partial x_i \partial x_j}\right|_{\bar{x}=\bar{x}^{(0)}} \cdot \Delta x_i \cdot \Delta x_j =$$

$$= \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} a_{ij} \cdot z_i \cdot z_j = z^{(2)}$$

где $z^{(2)}$ - квадратичная форма.

*Условие положительной определённости* квадратичной формы (достаточных условий существования минимума):

при любых значениях $z_i$ и $z_j \neq 0$

$$z^{(2)} > 0$$

а в точке $z_i = 0$ и $z_j = 0$

$$z^{(2)} = 0$$

Квадратичная форма будет положительно определённой, если все определители, составленные из элементов $a_{ij}$ положительны (*условия Сильвестра*):

$$a_{11} > 0; \quad \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} > 0; \ \ldots \ \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{vmatrix} > 0$$

# ДОСТАТОЧНЫЕ УСЛОВИЯ ЭКСТРЕМУМА ФУНКЦИИ МНОГИХ ПЕРЕМЕННЫХ

Все определители Сильвестра *положительны* (**положительно определенная квадратичная форма**):

R( $\bar{x}^{опт}$ )= min

Определители Сильвестра *нечетного порядка отрицательны, а четного порядка - положительны* (**отрицательно определенная квадратичная форма**):

R( $\bar{x}^{опт}$ )= max

*Иная последовательность чередования знаков* определителей Сильвестра:**седловая точка**=**экстремума** нет

# Доказательство вышеприведенных утверждений для 2-х переменных:

С учетом того, что:

$$a_{11} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 R}{\partial x_1^2}\right)_{\bar{x}^{(0)}}$$

$$a_{22} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 R}{\partial x_2^2}\right)_{\bar{x}^{(0)}}$$

и:

$$a_{12} = a_{21} = \frac{1}{2}\left( \frac{\partial^2 R}{\partial x_1 \cdot \partial x_2} \right)_{\bar{x}^{(0)}}$$

Квадратичная форма второго порядка записывается:

$$z^{(2)} = a_{11} \cdot z_1^2 + 2 \cdot a_{12} \cdot z_1 \cdot z_2 + a_{22} \cdot z_2^2$$

Преобразование последнего выражения приводит к соотношению:

$$z^{(2)} = a_{11} \cdot \left( z_1 + \frac{a_{12} \cdot z_2}{a_{11}} \right)^2 + \left( a_{22} - \frac{a_{12}^2}{a_{11}} \right) \cdot z_2^2$$

Отсюда следует:

Квадратичная форма будет **положительно определенной**, если:

$$a_{11} > 0$$

и:

$$a_{22} - \frac{a_{12}^2}{a_{11}} > 0$$

Или в соответствии с условиями Сильвестра:

$$a_{11} > 0$$

и:

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} > 0$$

Квадратичная форма будет **отрицательно определенной**, если:

$$a_{11} < 0$$

и:

$$a_{22} - \frac{a_{12}^2}{a_{11}} < 0; (*)$$

Знак неравенства в последнем случае будет отрицателен, когда числитель выражения после его приведения к общему знаменателю будет положителен, так как $a_{11}$ является отрицательным числом .

Из этого следует, что в соответствии с условиями Сильвестра (учитывая, что $a_{12} = a_{21}$), квадратичная форма будет отрицательно определенной в случае следующей системы чередования знаков определителей:

$$a_{11} < 0; \qquad \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} > 0$$

Таким образом, достаточные условия экстремума функции двух переменных в точке экстремума $\overline{x}^{(0)}$ могут быть сформулированы:

А)

$$\left.\begin{aligned} &\left.\frac{\partial^2 R}{\partial x_1^2}\right|_{\overline{x}^{(0)}} > 0 \\ &\left.\frac{\partial^2 R}{\partial x_1^2}\right|_{\overline{x}^{(0)}} \cdot \left.\frac{\partial^2 R}{\partial x_2^2}\right|_{\overline{x}^{(0)}} - \left(\left.\frac{\partial^2 R}{\partial x_1 \cdot \partial x_2}\right|_{\overline{x}^{(0)}}\right)^2 > 0 \end{aligned}\right\} \Rightarrow \min$$

Б)

$$\left.
\begin{aligned}
&\left.\frac{\partial^2 R}{\partial x_1^2}\right|_{\bar{x}^{(0)}} < 0 \\
&\left.\frac{\partial^2 R}{\partial x_1^2}\right|_{\bar{x}^{(0)}} \cdot \left.\frac{\partial^2 R}{\partial x_2^2}\right|_{\bar{x}^{(0)}} - \left( \left.\frac{\partial^2 R}{\partial x_1 \cdot \partial x_2}\right|_{\bar{x}^{(0)}} \right)^2 > 0
\end{aligned}
\right\} \Rightarrow \max$$

В случае отсутствия экстремума выполняются условия:

B)

$$\left.\begin{aligned} &\left.\frac{\partial^2 R}{\partial x_1^2}\right|_{\bar{x}^{(0)}} < 0 \\ &\left.\frac{\partial^2 R}{\partial x_1^2}\right|_{\bar{x}^{(0)}} \cdot \left.\frac{\partial^2 R}{\partial x_2^2}\right|_{\bar{x}^{(0)}} - \left( \left.\frac{\partial^2 R}{\partial x_1 \cdot \partial x_2}\right|_{\bar{x}^{(0)}} \right)^2 < 0 \end{aligned}\right\}$$

Следует отметить, что **аналитическая проверка** достаточных условий экстремума функции многих переменных не всегда возможна.

В таких случаях прибегают к **вычислительным экспериментам** на компьютере, либо вывод о существовании экстремума может вытекать из **физического смысла** решаемой задачи.

# ОПТИМИЗАЦИЯ РАВНОВЕСНЫХ ЭКЗОТЕРМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ

Рассмотрим химическую реакцию с целевым продуктом $P$, проходящую по схеме:

$$aA + bB \underset{k_2}{\overset{k_1}{\rightleftarrows}} pP + qQ$$

Скорость реакции по целевому продукту выражается по закону действующих масс:

$$W = k_1 x_A^a x_B^b - k_2 x_P^p x_Q^q$$

Необходимо определить температуру $T$ проведения реакции, при которой:

$$W = W_{\max}$$

Необходимое условие экстремума:

$$\frac{dW}{dT} = 0$$

$$x_A^a x_B^b \frac{dk_1}{dT} - x_P^p x_Q^q \frac{dk_2}{dT} = 0$$

$$k_j = A_j \cdot \exp(-E_j / RT)$$

$$\frac{dk_j}{dT} = [A_j \exp(-\frac{E_j}{RT})] \frac{E_j}{RT^2}$$

$$\frac{dk_j}{dT} = k_j \frac{E_j}{RT^2}$$

$$x_A^a x_B^b k_1(T^{onm}) \frac{E_1}{RT^2} - x_P^p x_Q^q k_2(T^{onm}) \frac{E_2}{RT^2} = 0$$

$$\frac{E_1 k_1(T^{onm})}{E_2 k_2(T^{onm})} = \frac{x_P^p x_Q^q}{x_A^a x_B^b}$$

В состоянии равновесия скорость реакции $W$ равна 0:

$$W = 0$$

$$x_A^a x_B^b k_1(T_{равновесн.}) - x_P^p x_Q^q k_2(T_{равновесн.}) = 0$$

$$\frac{k_1(T_{равновесн.})}{k_2(T_{равновесн.})} = \frac{x_P^p x_Q^q}{x_A^a x_B^b}$$

Получаем связь равновесной и оптимальной температур проведения реакции:

$$\frac{E_1 k_1(T^{опт})}{E_2 k_2(T^{опт})} = \frac{k_1(T_{равновесн.})}{k_2(T_{равновесн.})}$$

$$\frac{E_1}{E_2}\frac{A_1\exp(-E_1/RT^{опт})}{A_2\exp(-E_2/RT^{опт})}=\frac{A_1\exp(-E_1/RT_{равновесн.})}{A_2\exp(-E_2/RT_{равновесн.})}$$

откуда:

$$\exp\left(\frac{E_2-E_1}{RT_{равновесн.}}\right)=\frac{E_1}{E_2}\exp\left(\frac{E_2-E_1}{RT^{опт}}\right)$$

После логарифмирования получаем:

$$\frac{E_2 - E_1}{RT_{равновесн.}} = \frac{E_2 - E_1}{RT^{опт}} + \ln\frac{E_1}{E_2}$$

Откуда следует:

$$T^{опт} = \frac{T_{равновесн.}}{1 + \frac{RT_{равновесн.}}{E_2 - E_1} \cdot \ln \frac{E_2}{E_1}}$$