

ОПТИМИЗАЦИЯ ХИМИКО- ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Модуль 1. Лекция.

Безусловная оптимизация методом классического
математического анализа

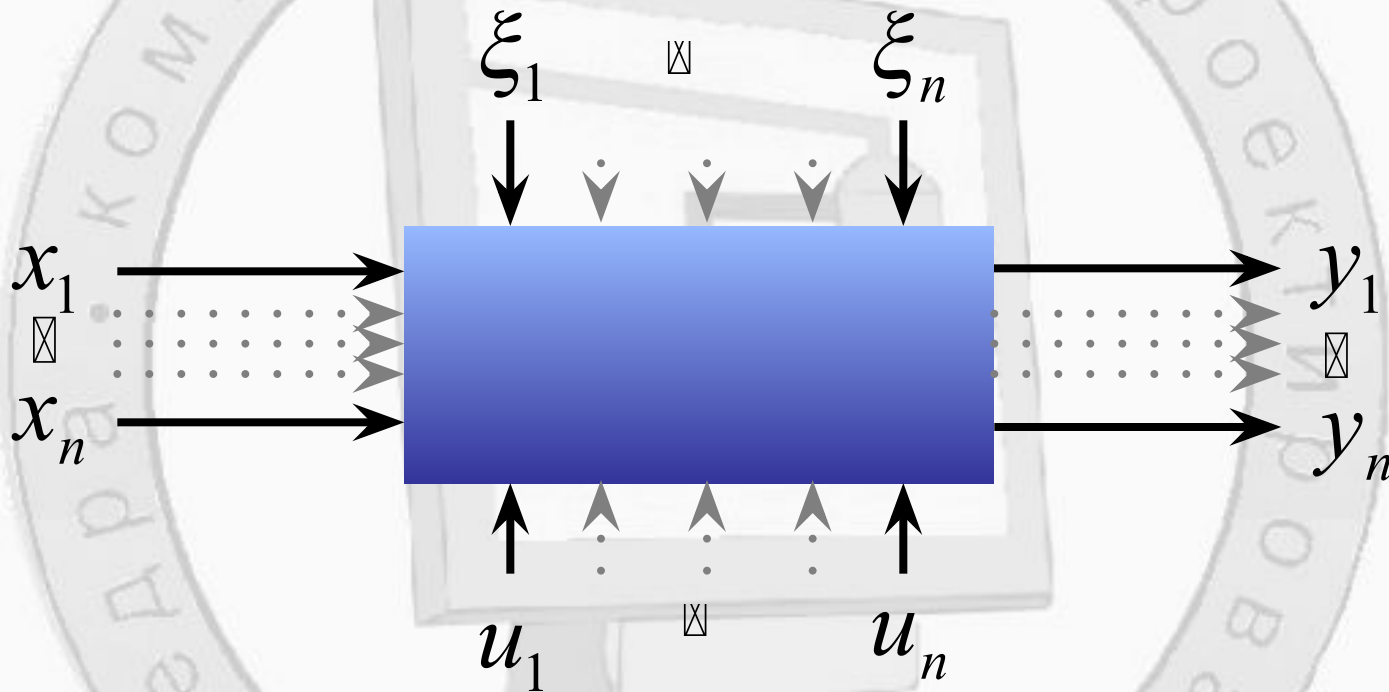
ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ ОПТИМИЗАЦИИ ХТП


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**:

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

Критерий оптимальности детерминированного процесса:

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

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:

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

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

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

Задача оптимизации решается с целью определения оптимальных значений оптимизирующих или управляющих параметров \bar{u}^{opt} , 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 \bar{x} , управляющих \bar{u} и выходных \bar{y} параметров, в которых обеспечивается адекватность модели процесса.

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

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

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

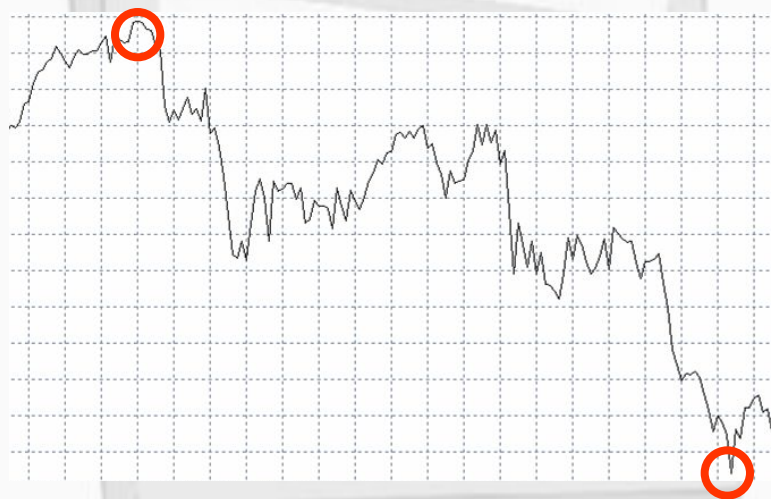
Если в дальнейшем принять, что $\bar{u} \equiv \bar{x}$, то формулировка задачи оптимизации имеет вид и, в общем случае, является задачей на экстремум функции многих переменных (экстремальной задачей):

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

Таким образом, для решения задачи оптимизации требуется определить такие значения оптимизирующих или управляющих параметров \bar{x}^{opt} из области их допустимых значений \bar{x}^{don} , 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

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

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

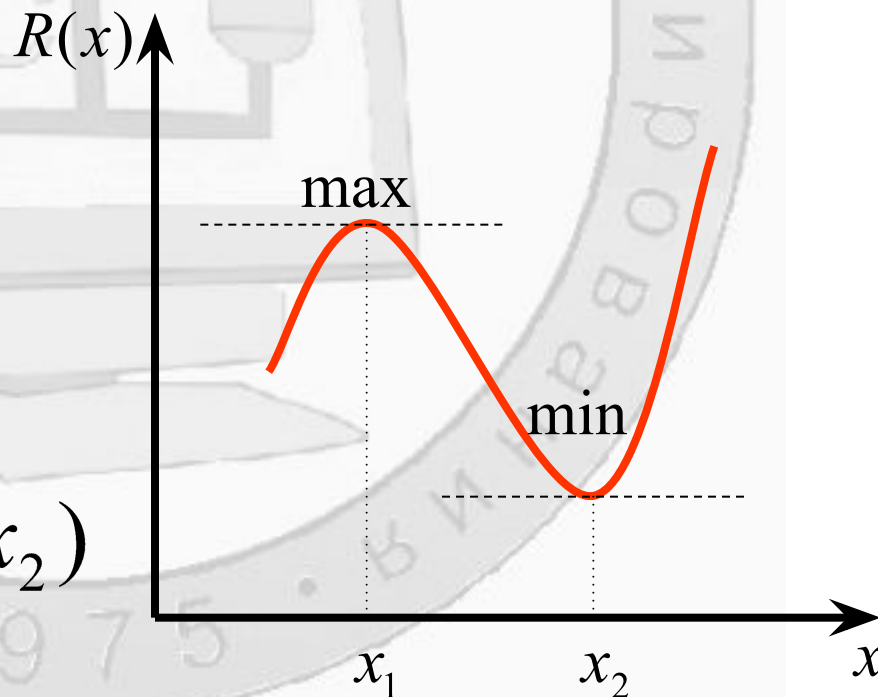
ЭКСТРЕМУМЫ ФУНКЦИЙ ОДНОЙ ПЕРЕМЕННОЙ

Необходимое условие существования экстремума

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

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

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

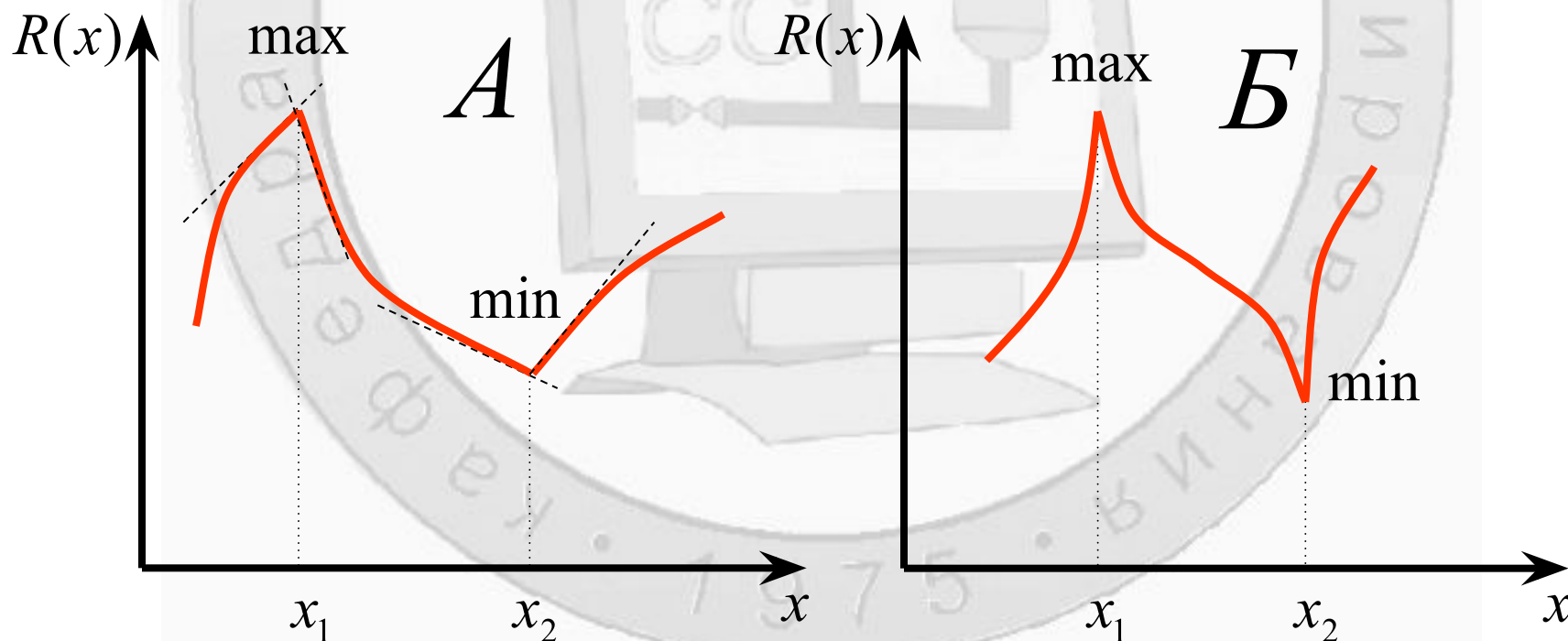


$$б) \frac{dR}{dx}$$

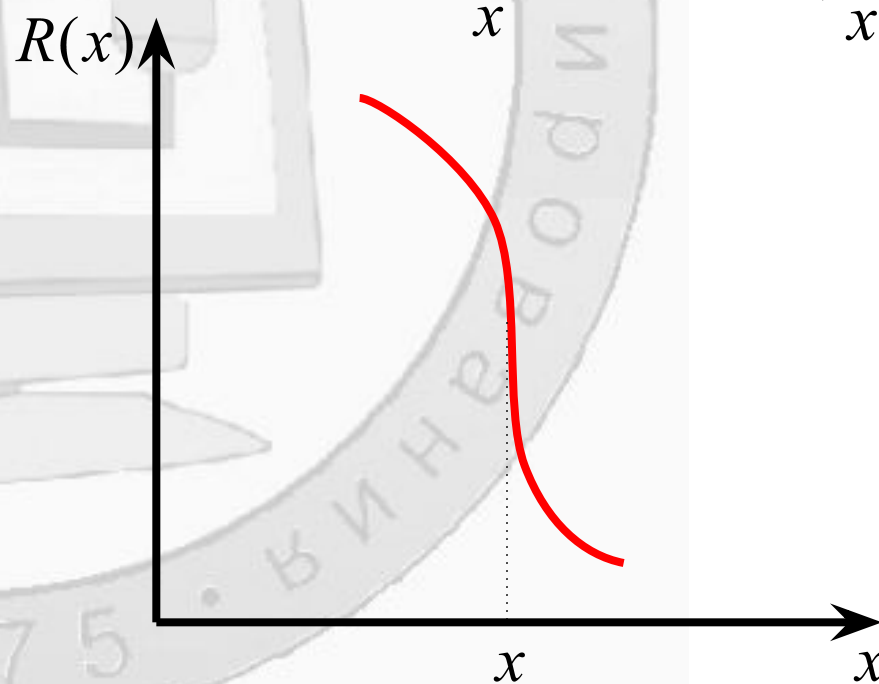
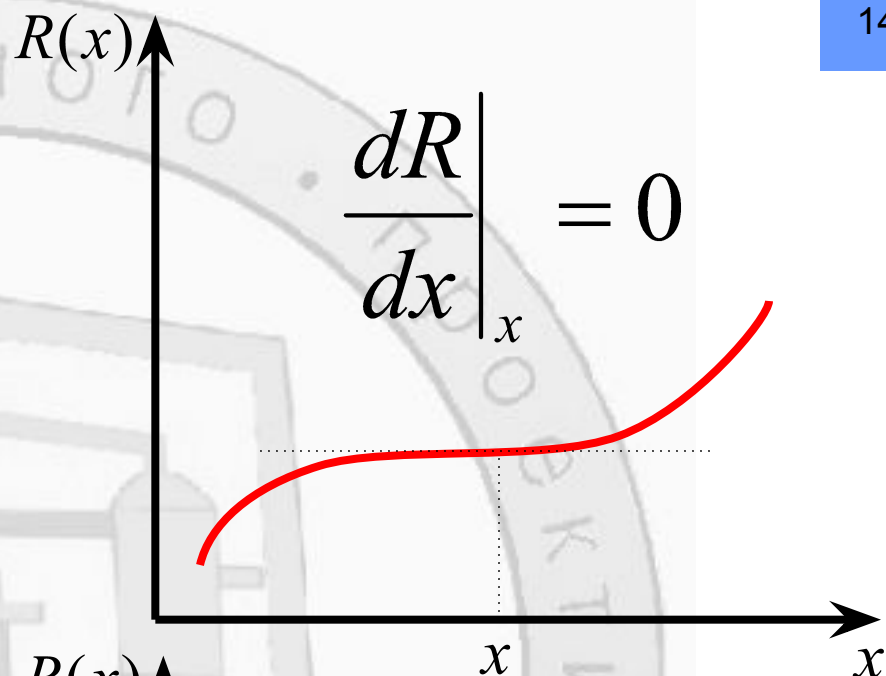
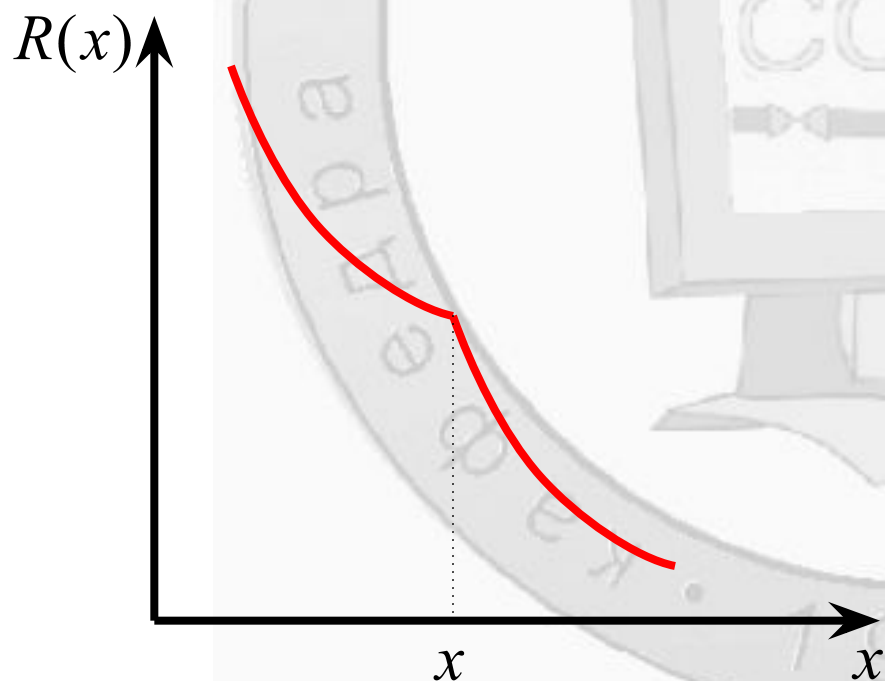
не равно 0, а экстремум существует:

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 :

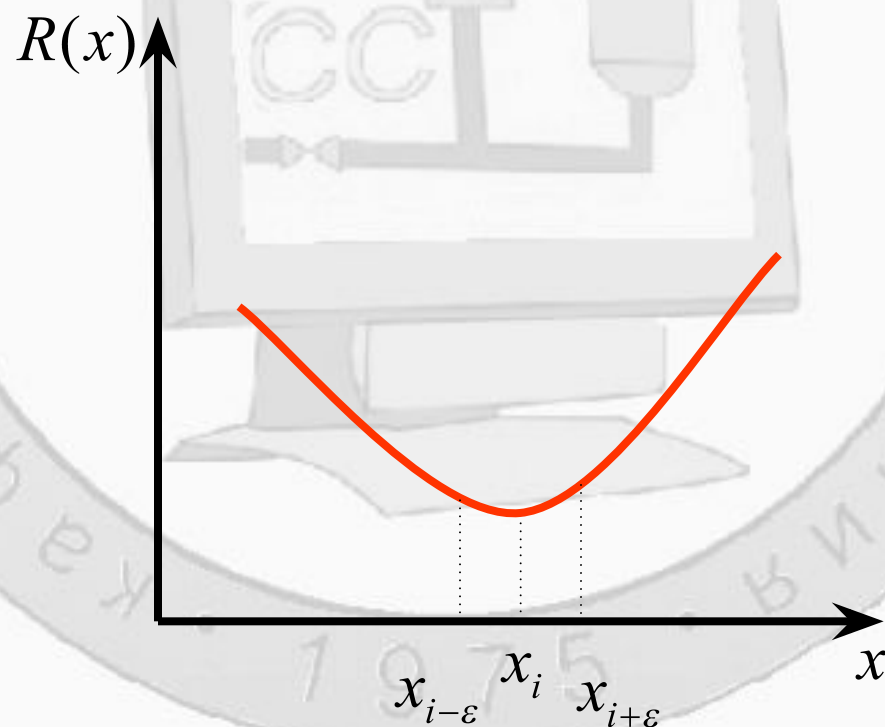


Для подтверждения наличия экстремумов в определенных точках необходимо проводить дополнительные исследования:

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

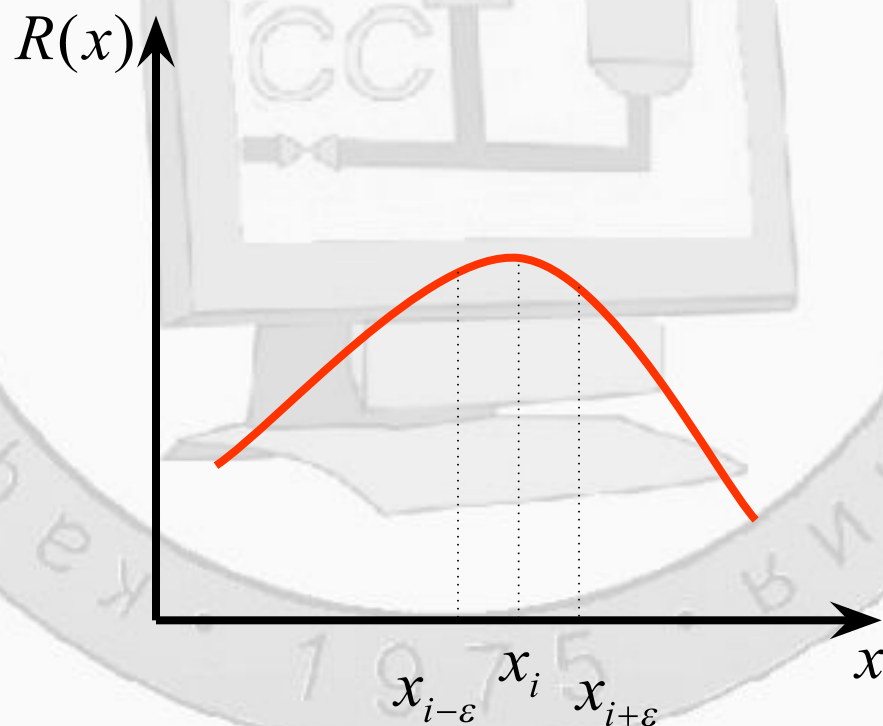
I. Сравнение значений функции справа и слева от предполагаемого экстремума x_i

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



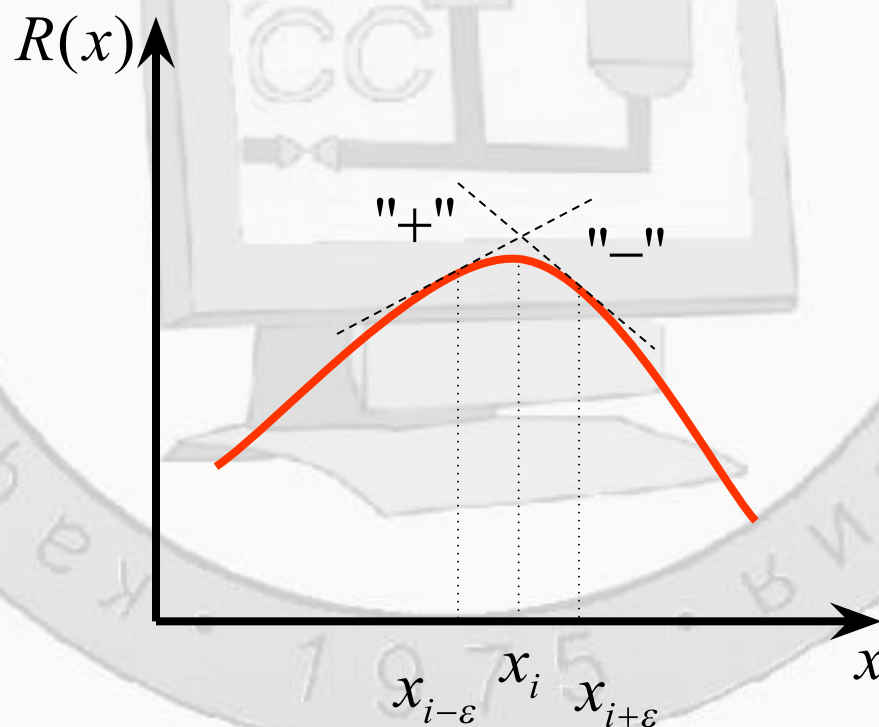
Сравнение значений функции справа и слева от предполагаемого экстремума x_i

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



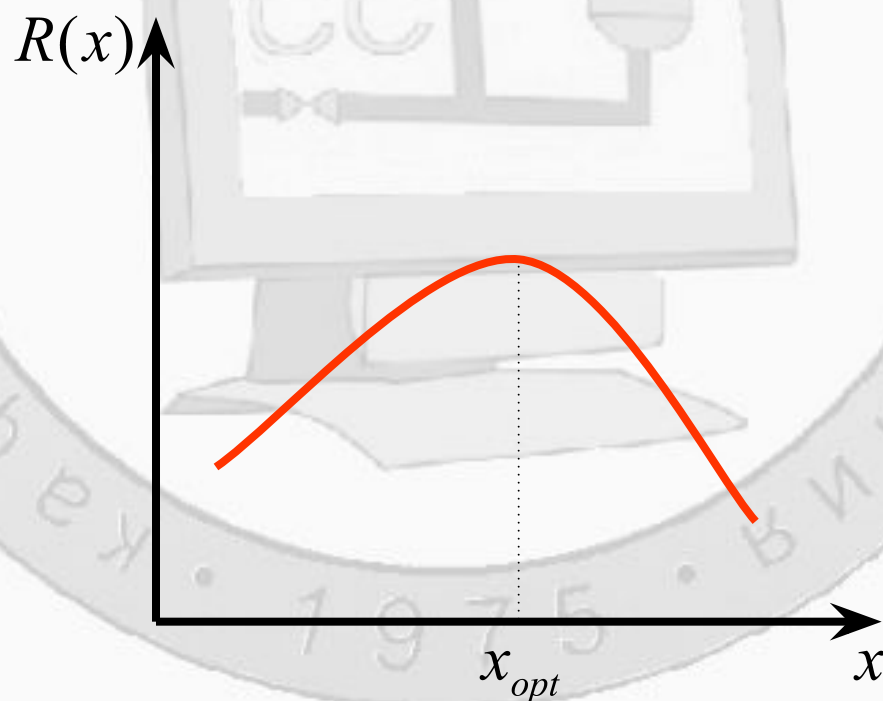
II. Сравнение знаков производной функции справа и слева от предполагаемого экстремума x_i

$$\text{sign} \frac{dR}{dx} \Big|_{x_{i-\varepsilon}} \neq \text{sign} \frac{dR}{dx} \Big|_{x_{i+\varepsilon}}$$



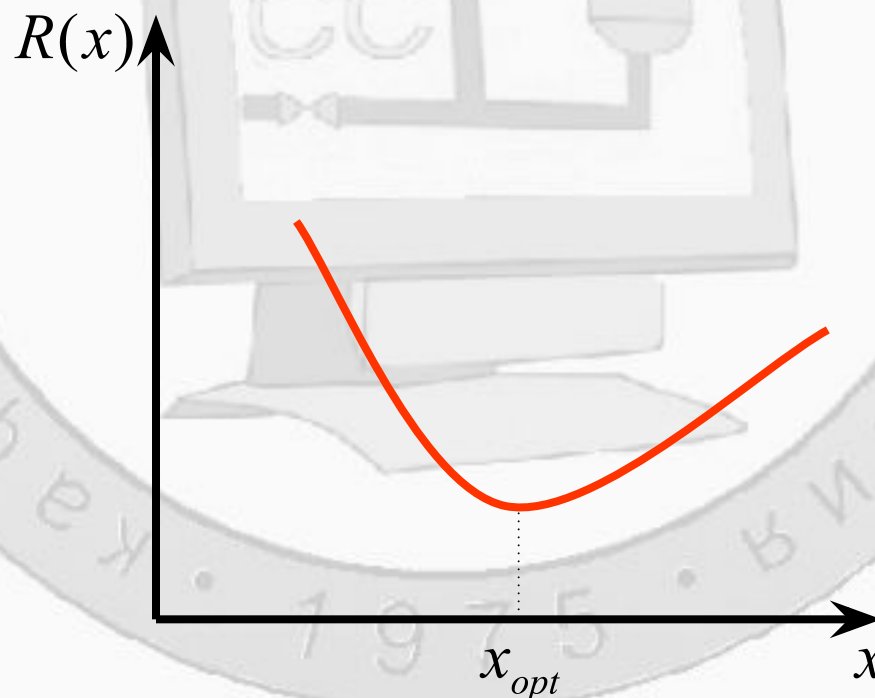
III. Исследование знаков производных функции высших порядков в точке предполагаемого экстремума x_{opt}

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



Исследование знаков производных функции высших порядков в точке предполагаемого экстремума

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



ЭКСТРЕМУМЫ ФУНКЦИЙ МНОГИХ ПЕРЕМЕННЫХ

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

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

или

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

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

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

$$i = 1, 2, \dots, n$$

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

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

Поскольку

$$\begin{aligned} dR(\bar{x}) \Big|_{\bar{x}=\bar{x}^{(0)}} &= \frac{\partial R}{\partial x_1} \Big|_{\bar{x}=\bar{x}^{(0)}} \cdot dx_1 + \frac{\partial R}{\partial x_2} \Big|_{\bar{x}=\bar{x}^{(0)}} \cdot dx_2 + \dots + \\ &+ \frac{\partial R}{\partial x_n} \Big|_{\bar{x}=\bar{x}^{(0)}} \cdot dx_n = \sum_{i=1}^n \frac{\partial R}{\partial x_i} \Big|_{\bar{x}=\bar{x}^{(0)}} \cdot dx_i = \sum_{i=1}^n 0 \cdot dx_i = 0 \end{aligned}$$

Достаточные условия существования экстремума функции многих переменных

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

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

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

с учётом необходимого условия существования экстремума:

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

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

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

Если выражение

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

сохраняет один и тот же знак для любых приращений

$$\Delta x_i \quad \Delta x_j$$

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

Приращение целевой функции в окрестности экстремума определяется

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

Обозначив:

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

$$\Delta x_i = z_i$$

$$\Delta x_j = z_j$$

получаем выражение вида:

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

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

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*):

$$a_{11} > 0; \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} > 0; \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & \boxtimes & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \boxtimes & a_{2n} \\ \boxtimes & \boxtimes & \boxtimes & \boxtimes \\ a_{n1} & a_{n2} & \boxtimes & a_{nn} \end{vmatrix} > 0$$

ДОСТАТОЧНЫЕ УСЛОВИЯ ЭКСТРЕМУМА ФУНКЦИИ МНОГИХ ПЕРЕМЕННЫХ

Все определители Сильвестра положительны
(положительно определенная квадратичная форма):

$$R(\bar{x}^{opt}) = \min$$

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

$$R(\bar{x}^{opt}) = \max$$

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:

$$a_{11} > 0$$

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

и:

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:

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

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

A)

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

Б)

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

В случае отсутствия экстремума выполняются условия:

В)

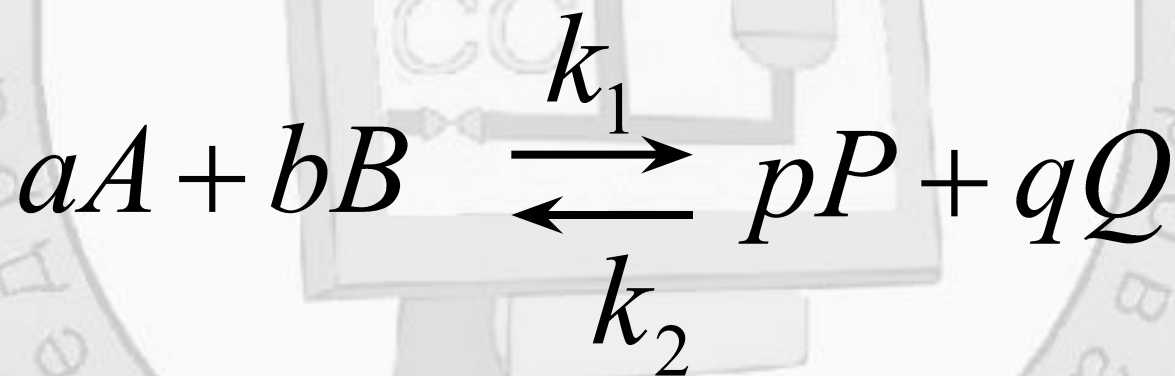
$$\left. \begin{aligned} & \frac{\partial^2 R}{\partial x_1^2} \Big|_{\bar{x}^{(0)}} < 0 \\ & \frac{\partial^2 R}{\partial x_1^2} \Big|_{\bar{x}^{(0)}} \cdot \frac{\partial^2 R}{\partial x_2^2} \Big|_{\bar{x}^{(0)}} - \left(\frac{\partial^2 R}{\partial x_1 \cdot \partial x_2} \Big|_{\bar{x}^{(0)}} \right)^2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

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:



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:

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

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

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

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

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

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

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

В состоянии равновесия скорость реакции W равна 0:

$$W = 0$$

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

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

Получаем связь равновесной и оптимальной температур проведения реакции:

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

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

откуда:

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

После логарифмирования получаем:

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

Откуда следует:

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