Управляемые системы, ИМ, ИК СО АН СССР, 1973 г., выпуск II
УДК.62-50:66-02

ОЦЕНКА ЧИСЛА ЛОКАЛЬНЫХ ЭКСТРЕМУМОВ В ЗАДАЧАХ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ОПТИМИЗАЦИИ ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ. НЕСТАЦИОНАРНЫЙ ХИМИЧЕСКИЙ ПРОЦЕСС. П.

В.И.Быков, Г.С.Яблонский

Для сложной каталитической реакции, представляющей собой совокупность N стадий, в которой участвуют M веществ, кинетическая модель имеет вид:

$$\frac{dx_i}{dt}=\sum_{j=1}^{N}k_j(T)f_{ij}(x_1,x_2,\dots,x_M) \qquad /1/$$

с начальными условиями:

$$x_i(0)=x_i^0\ ,\ i=1,2,\dots,M, \qquad /2/$$

где x_i - концентрация i -го вещества;
k_j - константа j -й реакции;
t - астрономическое время;
T - температура.

Рассмотрим задачу определения такой кусочно-непрерывной функции $T(t)$, $t\in[0,t_K]$, чтобы достигался

$$\max_{T_*\le T\le T^*} x_1(t_K), \qquad /3/$$

где T_* и T^* - соответственно нижнее и верхнее ограничения по температуре.

Оптимальная задача может считаться решенной до конца, если найден глобальный экстремум применяемого критерия. Для поиска оптимального управления, доставляющего абсолютный максимум функционала /3/ в заданной допустимой области, будем применять аппарат принципа максимума Понтрягина [I].

В нашем случае гамильтониан системы H как функция переменного $T\in[T_*,T^*]$ имеет вид:

$$H=\sum_{i=1}^{M}\sum_{j=1}^{N}k_j(T)f_{ij}(x_1,x_2,\dots,x_M)\psi_i, \qquad /4/$$

где ψ_i, $i=1,2,\dots,M$, удовлетворяют системе

$$\frac{d\psi_i}{dt}=-\frac{\partial H}{\partial x_i} \qquad /5/$$

с конечным условием

$$\psi_1(t_K)=1,\ \ \psi_i(t_K)=0\ ,\ i=2,3,\dots,M.$$

Согласно принципу максимума, на оптимальном управлении функция H, определенная в /4/, как функция переменного $T\in[T_*,T^*]$, должна достигать своего наибольшего значения. Это означает, что проблема глобальности оптимума может быть сведена к исследованию единствен-

ности оптимального управления. Действительно, если оптимальное управление существует и оно найдено из принципа максимума единственным образом, то, в соответствии с принципом максимума, именно это управление доставит критерию абсолютный оптимум.

Таким образом, в предположении единственности вопрос о глобальности экстремума функционала сводится к определению количества максимумов функции H и выбору из них наибольшего, что означает переход от рассмотрений в функциональном пространстве к исследованию в евклидовом пространстве.

Покажем, как может быть решена задача определения числа экстремумов функции H в рассмотренном случае /4/. Для этого в выражении /4/ приведем подобные члены при k_j, тогда гамильтониан H можно представить в форме

$$H=\sum_{j=1}^{N} f_j(x,\psi)k_j(T), \qquad /6/$$

где константы скоростей, как и раньше [2], имеют аррениусовский вид:

$$k_i(T)=k_i^0\exp\left(-\frac{E_i}{RT}\right).$$

Пусть

$$E_1=\min_{i=\overline{1,N}}\{E_i\}.$$

Тогда

$$k_i(T)=\rho_i\left[k_1(T)\right]^{\alpha_i},$$

где

$$\rho_i=k_i^0(k_1^0)^{-\alpha_i}, \quad \alpha_i=\frac{E_i}{E_1}>1, \quad i=2,3,\dots,N.$$

Поскольку E_i - целые числа, то α_i - некоторые рациональные числа.

Значит

$$H=\sum_{i=1}^{N} f_i(x,\psi)\left[k_1(T)\right]^{\alpha_i}\cdot\rho_i .$$

Таким образом, стационарное значение /при фиксированном $t\in[0,t_k]$ функции H является трансцендентным многочленом относительно k_1. В этом случае вопрос о количестве максимумов H по $T\in(T_*,T^*)$ в силу монотонной зависимости $k_i(T)$ сводится к исследованию числа корней трансцендентного уравнения:

$$\frac{\partial H}{\partial k_1}=\sum_{i=1}^{N}\alpha_i f_i\, k_1^{\alpha_i-1}\cdot\rho_i=0.$$

Решение этого уравнения с помощью простой замены $y=(k_1)^{1/E_1}$ может быть сведено к решению соответствующего алгебраического уравнения

$$\sum_{i=1}^{N}\beta_i y^{\gamma_i}=0, \qquad /7/$$

где

$$g_i = \alpha_i \rho_i f_i, \quad \gamma_i = E_1(\alpha_i - 1) = E_i - E_1 .$$

Относительно числа экстремумов $H(T)$, то есть числа корней полинома /7/, можно сразу сказать, что в рассмотренном случае их конечное число. Верхнюю оценку этого числа, как и в [2], дает теорема Декарта [3].

Число перемен знака в системе коэффициентов соответствующего алгебраического уравнения $f(y)$ равно числу перемен знака слагаемых функции H, упорядоченной по степеням k_1:

$$H = \sum_{j=1}^{N} g_j k_j, \quad E_N > E_{N-1} > \ldots > E_2 > E_1 .$$

Таким образом, если n - число перемен знака в системе коэффициентов $g_N, g_{N-1}, \ldots, g_2, g_1$, то n^* - число максимумов H как функции T - допускает оценку

$$n^* \le \frac{1}{2}(n - \operatorname{sign} g_N) \quad \text{для нечетных } n$$

и

$$n^* \le \frac{n}{2} \quad \text{для четных } n .$$

Соответственно для n_* - числа минимумов:

$$n_* \le \frac{1}{2}(n + \operatorname{sign} g_N) \quad \text{для нечетных } n$$

и

$$n_* \le \frac{n}{2} \quad \text{для четных } n .$$

Очевидно, что $n \le N-1$,
то есть

$$n^* \le \frac{1}{2}(N-1-\operatorname{sign} g_N) \quad \text{для четных } N ,$$

$$n^* \le \frac{N-1}{2} \quad \text{для нечетных } N$$

и

$$n_* \le \frac{1}{2}(N-1+\operatorname{sign} g_N) \quad \text{для четных } N ,$$

$$n^* \le \frac{N-1}{2} \quad \text{для нечетных } N ,$$

и число экстремумов гамильтониана H не превосходит числа $N-1$:

$$n^* + n_* \le N-1. \qquad /9/$$

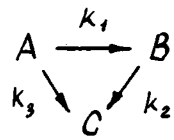
Для чисел n_* и n^* справедлива более грубая относительно /8/ верхняя оценка

$$n_*, n^* \le \left[\frac{N}{2}\right], \qquad /10/$$

которая зависит только от числа N - количества стадией принятой модели.

Рассмотрим в качестве примера

Механизм I.



Предполагается, что все реакции имеют первый порядок и целевой продукт - B. В этом случае кинетическая модель имеет вид:

$$\frac{dA}{dt} = -k_1(T)A - k_3(T)A,$$
$$\frac{dB}{dt} = k_1(T)A - k_2(T)B.$$

Тогда

$$H = (\psi_2 - \psi_1)Ak_1(T) - \psi_2 Bk_2(T) - A\psi_1 k_3(T),$$

где ψ_1, ψ_2 удовлетворяют системе:

$$\frac{d\psi_1}{dt} = -(\psi_2 - \psi_1)k_1(T) + \psi_1 k_3(T),$$
$$\frac{d\psi_2}{dt} = \psi_2 k_2(T) \qquad /11/$$

с условием на конце

$$\psi_1(t_k) = 0, \quad \psi_2(t_k) = 1. \qquad /12/$$

Очевидно, что $\psi_2 > 0 \quad \forall t \in [0, t_k]$. Покажем, что и $\psi_1 > 0$ $\forall t \in [0, t_k]$. Доказательство проведем от противного. Пусть $\exists t_1 \in [0, t_k) / \psi_1(t_1) = 0$, тогда необходимое противоречие получаем и рассмотрения /11/ и с учетом непрерывности ψ_1. Действительно, из системы /11/ и условий /12/ получаем $\left.\frac{d\psi_1}{dt}\right|_{t=t_k} < 0$, а в силу непрерывности ψ_1 в точке t_1, должно быть $\left.\frac{d\psi_1}{dt}\right|_{t=t_1} > 0$, что противоречит /11/, так как $\psi_2(t_1) > 0$.

Таким образом, ψ_1, ψ_2 на рассматриваемом отрезке знака не меняют. Отсюда можно сделать заключение, что количество максимумов H зависит от знака $(\psi_2 - \psi_1)$ и соотношения E_1, E_2, E_3. Рассмотрим несколько случаев.

I. $E_1 < E_2, E_3$.

Тогда

$$H(k_1) = -A\psi_1 \rho_3 k_1^{\alpha_3} - \psi_2 B\rho_2 k_1^{\alpha_2} + (\psi_2 - \psi_1)Ak_1,$$

$$\frac{\partial H}{\partial k_1} = -A\psi_1 \rho_3 \alpha_3 k_1^{\alpha_3 - 1} - \psi_2 B\rho_3 \alpha_2 k_1^{\alpha_2 - 1} + (\psi_2 - \psi_1)A,$$

где $\alpha_2, \alpha_3 > 1$.

Соответствующее алгебраическое уравнение имеет вид

$$-a_0 x^m - a_{m-1} x^n + a_m = 0.$$

Значит, стационарное значение H имеет единственный экстремум, причем это будет максимум при $a_m > 0$. Если $a_m \le 0$, то максимум H достигается на концах отрезка $[T_*, T^*]$. Итак, оптимальная температура может принимать значения внутри допустимой области и иметь граничные участки.

2. $E_1 > E_2, E_3$.

Соответствующее алгебраическое уравнение аналогично первому случаю записывается в виде:

$$b_0 y^m - b_{m-n} y^n - b_m = 0,$$

где $b_0 = (\psi_2 - \psi_1)b;\ b,\ b_{m-n},\ b_m > 0$, то есть единственный экстремум стационарного значения H является в данном случае при $b_0 > 0$ уже минимумом. Значит, оптимальная температура принимает лишь граничные значения и является релейным управлением.

3. $E_2 > E_1 > E_3$ и $E_3 > E_1 > E_2$.

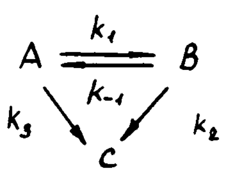
Аналогично предыдущему имеем уравнение:

$$-C_0 z^m + C_{m-n} z^n - C_m = 0,$$

где $C_{m-n} = (\psi_2 - \psi_1)C$ и $C_0, C_m, C > 0$. Значит при $C_{m-n} > 0$ функция H имеет не более двух экстремумов, один из которых является максимумом. Однако при его отыскании нельзя ограничиваться условием $\frac{\partial H}{\partial T} = 0$, а необходимо проверять $\frac{\partial^2 H}{\partial T^2}$. Если $C_{m-n} \le 0$, то максимум H достигается на границе допустимой области.

Вывод о единственности стационарного максимума H для данной системы можно было сделать и без рассмотрения соотношений между E_1, E_2, E_3, так как оценка /10/ дает $n^* \le \left[\frac{3}{2}\right] = 1$. Однако проведенное исследование показывает, что при $E_1 > E_2, E_3$ оптимальное управление релейно, а в остальных случаях может принимать значения внутри допустимой области, причем если $E_2 > E_1 > E_3$ или $E_3 > E_1 > E_2$, то для определения оптимальной $T \in (T_*, T^*)$ условие $\frac{\partial H}{\partial T} = 0$ становится недостаточным.

Механизм 2.



Примем те же предположения: все реакции имеют первый порядок, B - целевой продукт. Кинетическая модель в данном случае имеет вид:

$$\frac{dA}{dt} = -k_1(T)A - k_3(T)A + k_{-1}(T)B,$$

$$\frac{dB}{dt} = -k_1(T)A - k_2(T)B - k_{-1}(T)B.$$

Тогда

$$H = (\psi_2 - \psi_1)Ak_1(T) - \psi_2 Bk_2(T) - \psi_1 Ak_3(T) - (\psi_2 - \psi_1)Bk_{-1}(T),$$

где ψ_1, ψ_2 удовлетворяют системе:

$$\frac{d\psi_1}{dt} = -(\psi_2 - \psi_1)k_1(T) + \psi_1 k_3(T),$$

$$\frac{d\psi_2}{dt} = \psi_2 k_2(T) + (\psi_2 - \psi_1)k_{-1}(T)$$

с условием на конце $[0, t_k]$ /12/.

Аналогично предыдущему методом от противного доказывается, что $\psi_1, \psi_2 > 0$ $\forall t \in [0, t_k)$. Поэтому в системе коэффициентов H при $k_i(T)$ для любых соотношений E_{-1}, E_1, E_2, E_3 число перемен знаков не превосходит двух, то есть максимум H единственный, хотя оценка /10/ дает $n^* \leq \left[\frac{4}{2}\right] = 2$. Единственность максимума H, несмотря на присутствие четырех констант $k_i(T)$, объясняется спецификой рассмотренной системы.

Механизм 3.

$$A \underset{k_{-1}}{\overset{k_1}{\rightleftharpoons}} B \underset{k_{-2}}{\overset{k_2}{\rightleftharpoons}} C$$

Пусть

$$\frac{dA}{dt} = -k_1(T)A + k_{-1}(T)B,$$
$$\frac{dB}{dt} = k_1(T)A - k_{-1}(T)B - k_2(T)B + k_{-2}(T)(1-A-B).$$

Тогда

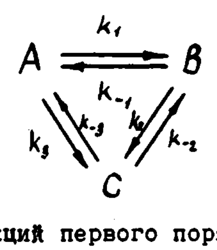
$$H = (\psi_2 - \psi_1)Ak_1(T) - (\psi_2 - \psi_1)Bk_{-1}(T) + B_2\psi_2 k_2(T) + \psi_2(1-A-B)k_{-2}(T).$$

Из условий /12/ получаем

$$H(k_1(T))\Big|_{t=t_k} = A(t_k)k_1(T) - B(t_k)k_{-1}(T) - B(t_k)k_2(T) + (1 - A(t_k) - B(t_k))k_{-2}(T).$$

Поэтому, например, при $E_{-1} > E_1 > E_2 > E_{-2}$ функция $H|_{t=t_k}$ может иметь два максимума, и при определении оптимальной температуры из условия $max H$ надо выбирать из них наибольший. В остальные моменты времени $t \in [0, t_k]$ количество максимумов H в силу оценки /10/ тоже не превосходит двух.

Механизм 4.



В случае реакций первого порядка кинетические уравнения имеют вид:

$$\frac{dA}{dt} = -k_1(T)A - k_3(T)A + k_{-1}(T)B + k_{-3}(T)(1-A-B),$$
$$\frac{dB}{dt} = -k_{-1}(T)B - k_2(T)B + k_1(T)A + k_{-2}(T)(1-A-B).$$

Отсюда

$$H = -k_1(T)(\psi_1 - \psi_2)A + k_{-1}(T)B(\psi_1 - \psi_2) - k_2(T)B\psi_2 +$$
$$+ k_{-2}(T)(1-A-B)\psi_2 - k_3(T)A\psi_1 + k_{-3}(T)\psi_1(1-A-B).$$

Из требования $\max_T B(t_k)$, то есть из конечных условий /12/ для сопряженных функций ψ_1, ψ_2, следует

$$H|_{t=t_k}=k_1(T)A(t_k)-k_{-1}(T)B(t_k)-k_2B(t_k)+k_{-2}(T)(1-A(t_k)-B(t_k)).$$

Значит, как и для механизма 3, число максимумов $H|_{t=t_k}$, как функции $T\in[T_*, T^*]$, не превосходит двух. Однако при $t\in[0,t_k)$ $\psi_1(t)\neq 0$. Поэтому если $\psi_1>0$, например при $E_{-1}>E_1>E_2>E_{-2}>$ $>E_3>E_{-3}$ и $\psi_1-\psi_2<0$, то, согласно /10/, $H(T)$ может иметь 3 максимума. Если $\psi_1<0$ и $\psi_1-\psi_2<0$, то 3 максимума $H(T)$ могут быть при $E_{-1}>E_1>E_2>E_{-2}>E_{-3}>E_3$.

Для определения оптимального управления в случае полиэкстремальности гамильтониана H необходимо выбирать наибольший из максимумов. В общем случае эта задача связана с рядом трудностей, в частности с неединственностью глобального $max H$, что может проявиться даже в самом простом случае. Пусть, например, H имеет вид, указанный в /6/

$$H=\Phi-\{[a(x,\psi)k(T)-b(x,\psi)]^2-c^2(x,\psi)\}^2.$$

Для простоты считаем, что допустимыми являются $k\in(0,+\infty)$. Тогда если $a,b>c(x,\psi)>0$, то глобальный максимум $H=\Phi$ доставляют сразу две точки

$$k^{(1)}=\frac{b+c}{a}\,,\quad k^{(2)}=\frac{b-c}{a}\,.$$

Если $a=0$, то любое k доставляет глобальный максимум H .

Для выделения истинно оптимального управления в подобной ситуации необходимо привлечение достаточных условий оптимальности , так как принцип максимума, являясь необходимым условием оптимальности, выделяет лишь "подозрительные" управления.

Авторы выражают благодарность В.В.Леонову за полезное обсуждение работы.

Поступила в ред.-изд.отдел
23 ноября 1972 г.

Литература

1. Л.С.Понтрягин, В.Г.Болтянский, Р.В.Гамкрелидзе, Е.Ф.Мищенко. Математическая теория оптимальных процессов. "Наука", М.,1969.

2. В.И.Быков, Г.С.Яблонский. Оценка числа локальных экстремумов в задачах теоретической оптимизации химических процессов. Стационарный химический процесс. I. Сб. "Управляемые системы", Новосибирск, 1973, вып.II.

3. А.Г.Курош. Курс высшей алгебры. "Наука", М., 1968.

4. R.Luus, D.E.Cormack. Multiplicity of solution resulting from the use of variational methods in optimal control problems. Can.J.Chem.Eng., 1972, v. 50, No 2.