ОПТИМИЗАЦИЯ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕКИХ ПРОЦЕССОВ С ОГРАНИЧЕНИЯМИ В ВИДЕ РАВЕНСТВ

Модуль 2. Лекция.

Условная оптимизация методом классического математического анализа с применением множителей Лагранжа

Понятие условного экстремума

Экстремум функции ***n*** переменных

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

с **m** ограничениями (условиями) в виде равенств:

$$\varphi_j(x_1, x_2, ..., x_n) = 0, \quad j = 1, 2, ..., m$$

называется условным экстремумом.

При решении задач оптимизации ХТП

$$R(\bar{x})$$ - критерий оптимальности

$$\bar{\varphi}(\bar{x}) = 0$$

- уравнения математического описания

Для такой постановки задачи определения условного экстремума необходимо выполнение условия:

$$n > m$$

1. Решение задачи поиска условного экстремума путем поиска безусловного экстремума:

Для определения условного экстремума целесообразно выразить m зависимых переменных через остальные $n-m$ переменных:

$$x_k = f_k(x_{m+1}, x_{m+2}, \dots, x_n)$$

$$k = 1, 2, \dots, m$$

Полученные зависимости подставляются в выражение функции $R(\bar{x})$:

$$R^* = R[f_1(x_{m+1}, \ ..., x_n), \\ f_2(x_{m+1}, ..., x_n), ..., \\ f_m(x_{m+1}, ..., x_n), x_{m+1}, x_{m+2}, ..., x_n] = \\ = R^*(x_{m+1}, x_{m+2}, ..., x_n)$$

В полученной функции $R^*(\bar{x})$ переменные являются независимыми.

Далее обычными методами **поиска безусловного экстремума** определяются значения

$$x_{m+1}^{opt}, x_{m+2}^{opt}, \ldots, x_n^{opt}$$

т. е. находится экстремум функции $R^*(\bar{x})$

По известным значениям $x_{m+1}^{opt}, x_{m+2}^{opt}, \ldots, x_n^{opt}$

из системы m – уравнений ограничений:

$$\varphi_j(x_1, x_2, \ldots, x_n) = 0, \quad j = 1, 2, \ldots, m$$

определяются значения:

$$x_k^{opt} = f_k(x_{m+1}^{opt}, x_{m+2}^{opt}, \ldots, x_n^{opt})$$

$$k = 1, \ldots m$$

$$m.e.\_\ x_1^{opt}, x_2^{opt}, \ldots, x_m^{opt}$$

2.Поиск условного экстремума методом неопределенных множителей Лагранжа

Необходимое условие существования экстремума функции многих переменных:

$$dR = \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\partial R}{\partial x_i} \right)_{\bar{x}^{extr}} dx_i = 0$$

В случае условного экстремума не все дифференциалы dx_i будут независимыми, т.к. на переменные x_i наложены дополнительные ограничения

$$\varphi_j(x_1, x_2, ..., x_n) = 0, \quad j = 1, 2, ..., m$$

Полный дифференциал функции $\varphi_j(\bar{x})$ в точке экстремума равен нулю :

$$d\varphi_j = \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\partial \varphi_j}{\partial x_i} \right)_{\bar{x}^{extr}} \cdot dx_i = 0$$

поскольку

$$\varphi_j(\bar{x}) = 0$$

$$j = 1,...m$$

Умножив обе части последнего выражения на некоторый множитель λ_j (j=1,…m), просуммировав и сложив с выражением для $\partial R / \partial x_i$, получим:

$$\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\partial R}{\partial x_i}\right)_{\bar{x}^{extr}} \cdot dx_i + \sum_{j=1}^{m}\lambda_j \sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\partial \varphi_j}{\partial x_i}\right)_{\bar{x}^{extr}} \cdot dx_i = 0$$

или

$$\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\partial R}{\partial x_i} + \lambda_1 \cdot \frac{\partial \varphi_1}{\partial x_i} + \lambda_2 \cdot \frac{\partial \varphi_2}{\partial x_i} + \ldots + \lambda_m \cdot \frac{\partial \varphi_m}{\partial x_i}\right)_{\bar{x}^{extr}} \cdot dx_i = 0$$

Исключим m зависимых дифференциалов таким выбором множителей λ_j, чтобы коэффициенты при зависимых дифференциалах обратились в 0:

$$\left(\frac{\partial R}{\partial x_i} + \lambda_1 \cdot \frac{\partial \varphi_1}{\partial x_i} + \lambda_2 \cdot \frac{\partial \varphi_2}{\partial x_i} + \cdots + \lambda_m \cdot \frac{\partial \varphi_m}{\partial x_i} \right)_{\bar{x}^{extr}} = 0$$

$$i = 1, 2, ..., m$$

Полученная система из m уравнений позволяет определить m множителей λ_j (если они существуют)

Исключив зависимые дифференциалы, получим:

$$\sum_{i=m+1}^{n}\left(\frac{\partial R}{\partial x_i}+\lambda_1\cdot\frac{\partial\varphi_1}{\partial x_i}+\lambda_2\cdot\frac{\partial\varphi_2}{\partial x_i}+\ldots+\lambda_m\cdot\frac{\partial\varphi_m}{\partial x_i}\right)_{\bar{x}^{extr}}\cdot dx_i=0$$

со значениями λ_j из предыдущей системы уравнений

Для равенства последнего выражения 0 необходимо, чтобы каждое слагаемое его было равно 0:

$$\left(\frac{\partial R}{\partial x_i} + \lambda_1 \cdot \frac{\partial \varphi_1}{\partial x_i} + \lambda_2 \cdot \frac{\partial \varphi_2}{\partial x_i} + \ldots + \lambda_m \cdot \frac{\partial \varphi_m}{\partial x_i}\right)_{\bar{x}^{extr}} = 0$$

$$i = m+1, m+2, \ldots, n$$

Объединяя условия равенства 0 зависимых и независимых дифференциалов, получим:

$$\left(\frac{\partial R}{\partial x_i} + \lambda_1 \cdot \frac{\partial \varphi_1}{\partial x_i} + \lambda_2 \cdot \frac{\partial \varphi_2}{\partial x_i} + \dots + \lambda_m \cdot \frac{\partial \varphi_m}{\partial x_i}\right)_{\bar{x}^{extr}} = 0$$

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

Одновременно должны выполняться m равенств, соответствующих ограничениям задачи:

$$\varphi_j(x_1, x_2, ..., x_n) = 0, \quad j = 1, 2, ..., m$$

Таким образом для определения экстремума Функции R с ограничениями типа равенств необходимо решить требуемую систему (n+m) последних уравнений относительно x_i (i=1,…n) и λ_j (j=1,…m)

Функция _ Лагранжа _ Ф

Введя функцию Лагранжа **Ф**, необходимые условия экстремума которой с производными по всем x_i (i=1,…n) и λ_j (j=1,…m) приводят к требуемой системе (n+m) уравнений:

$$\Phi = R + \sum_{j=1}^{m} \lambda_j \cdot \varphi_j$$

Получим требуемую систему (n+m) уравнений:

$$\begin{cases} \left(\dfrac{\partial \Phi}{\partial x_i}\right)_{\bar{x}^{extr}} = 0 \; (i = 1, 2, ..., n) \\ \left(\dfrac{\partial \Phi}{\partial \lambda_i}\right)_{\bar{x}^{extr}} = 0 \; (i = 1, 2, ..., m) \end{cases}$$

сведя задачу к нахождению безусловного экстремума функции Ф.

ПРИМЕР 1. Классическая задача.

Определим соотношение между высотой и диаметром цилиндрического сосуда при минимальной его поверхности и заданном объёме.
Для этого случая:

$$R = S = 2\pi\frac{d^2}{4} + \pi d H$$

S – поверхность цилиндра

H – высота цилиндра

d – диаметр цилиндра

$$\phi = \pi \cdot \frac{d^2}{4} \cdot H - V_0 = 0$$

V_0 – заданный объём цилиндра

Записываем функцию Лагранжа:

$$\Phi = (2\pi \frac{d^2}{4} + \pi d H) +$$

$$+ \lambda \cdot (\pi \frac{d^2}{4} \cdot H - V_0)$$

Дифференцируя, получим:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial d} = \pi d + \pi H + \pi \lambda \frac{dH}{2} = 0$$

$$d + H + \lambda \frac{dH}{2} = 0$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial H} = \pi d + \pi \lambda \frac{d^2}{4} = 0$$

$$d + \lambda \frac{d^2}{4} = 0$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \lambda} = \pi \frac{d^2}{4} \cdot H - V_0 = 0$$

Решая систему уравнений:

$$d + H + \lambda \frac{dH}{2} = 0$$

$$d + \lambda \frac{d^2}{4} = 0$$

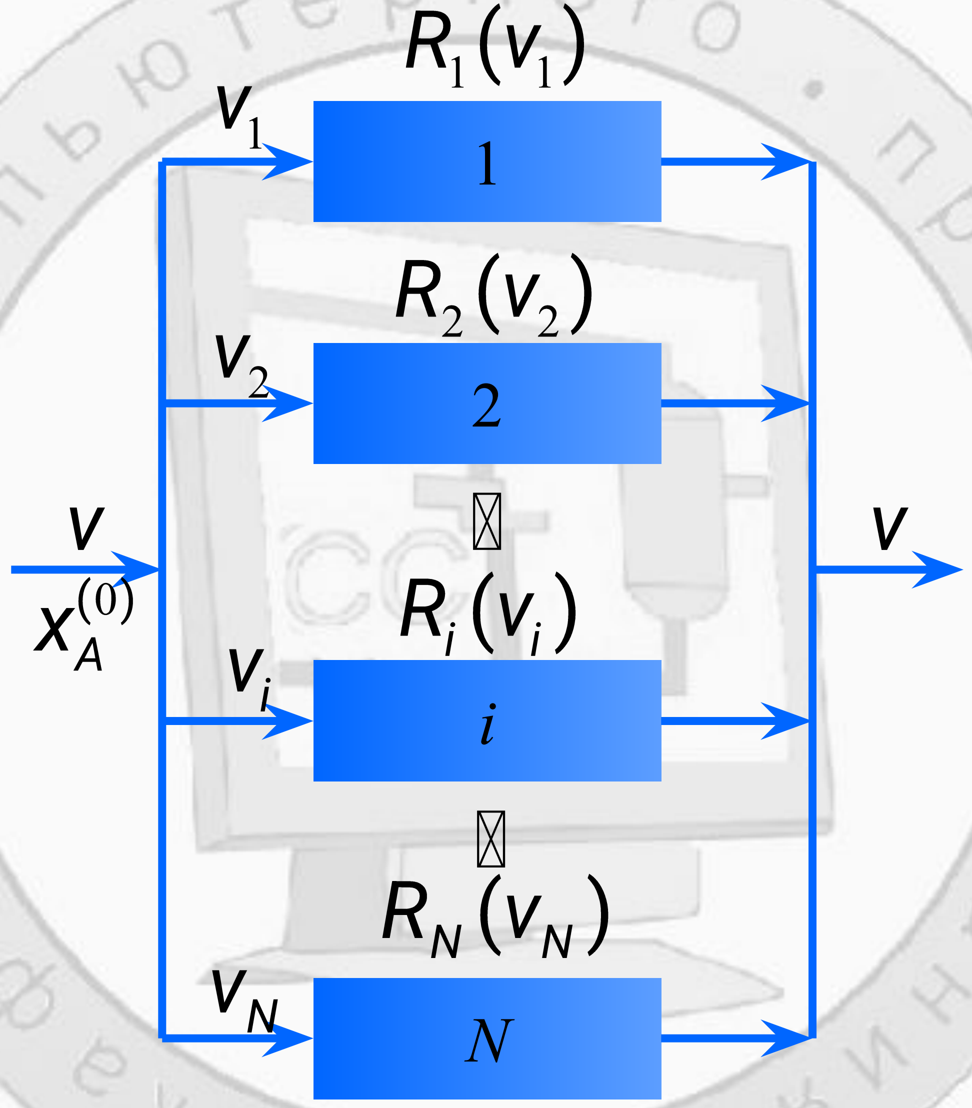
$$\pi \frac{d^2}{4} \cdot H - V_0 = 0$$

получим, что для минимальной поверхности цилиндра должно выполняться соотношение:

$$d = H = \sqrt[3]{\frac{4V_0}{\pi}}$$

ПРИМЕР 2. Оптимальное распределение потока сырья между параллельно работающими аппаратами

Пусть общий поток (расход) сырья v, содержащий компонент A, распределяется между N аппаратами.
Пусть $R_i = R_i(v_i)$ есть критерий оптимальности i-го аппарата и является функцией потока v_i, проходящего через этот аппарат.



$R_1(v_1)$
v_1
1
$R_2(v_2)$
v_2
2
v
$x_A^{(0)}$
$R_i(v_i)$
v_i
i
$R_N(v_N)$
v_N
N
v

Свойство аддитивности критерия оптимальности записывается как:

$$R = \sum_{i=1}^{N} R_i(v_i)$$

Ограничение в виде равенства имеет вид:

$$v = \sum_{i=1}^{N} v_i$$

Функция Лагранжа:

$$\Phi = \sum_{i=1}^{N} R_i(v_i) + \lambda \cdot \left(v - \sum_{i=1}^{N} v_i\right)$$

Дифференцируя и приравнивая нулю производные, получим систему **(N+1)** уравнений для определения v_i (i=1,…n) и λ :

$$\frac{\partial \Phi}{\partial v_i} = \frac{\partial R_i(v_i)}{\partial v_i} - \lambda = 0$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \lambda} = v - \sum_{i=1}^{N} v_i = 0$$

$$i = 1, 2, ..., N$$

Отсюда следует, что при оптимальных условиях распределения потока в параллельно работающих аппаратах должны выполняться равенства:

$$\frac{\partial R_i}{\partial v_i} = \frac{\partial R_{i+1}}{\partial v_{i+1}} \quad i = 1, \ldots (N-1)$$

Задача 2

Рассчитать оптимальное распределение потока сырья v, поступающего на параллельно работающие реакторы идеального смешения, в которых проводится реакция типа

$$A \xrightarrow{k_1} P \xrightarrow{k_2} S$$

В качестве критерия оптимальности использовать суммарное количество компонента P в выходном потоке. Исходные данные для расчёта:

число аппаратов $N = 3$

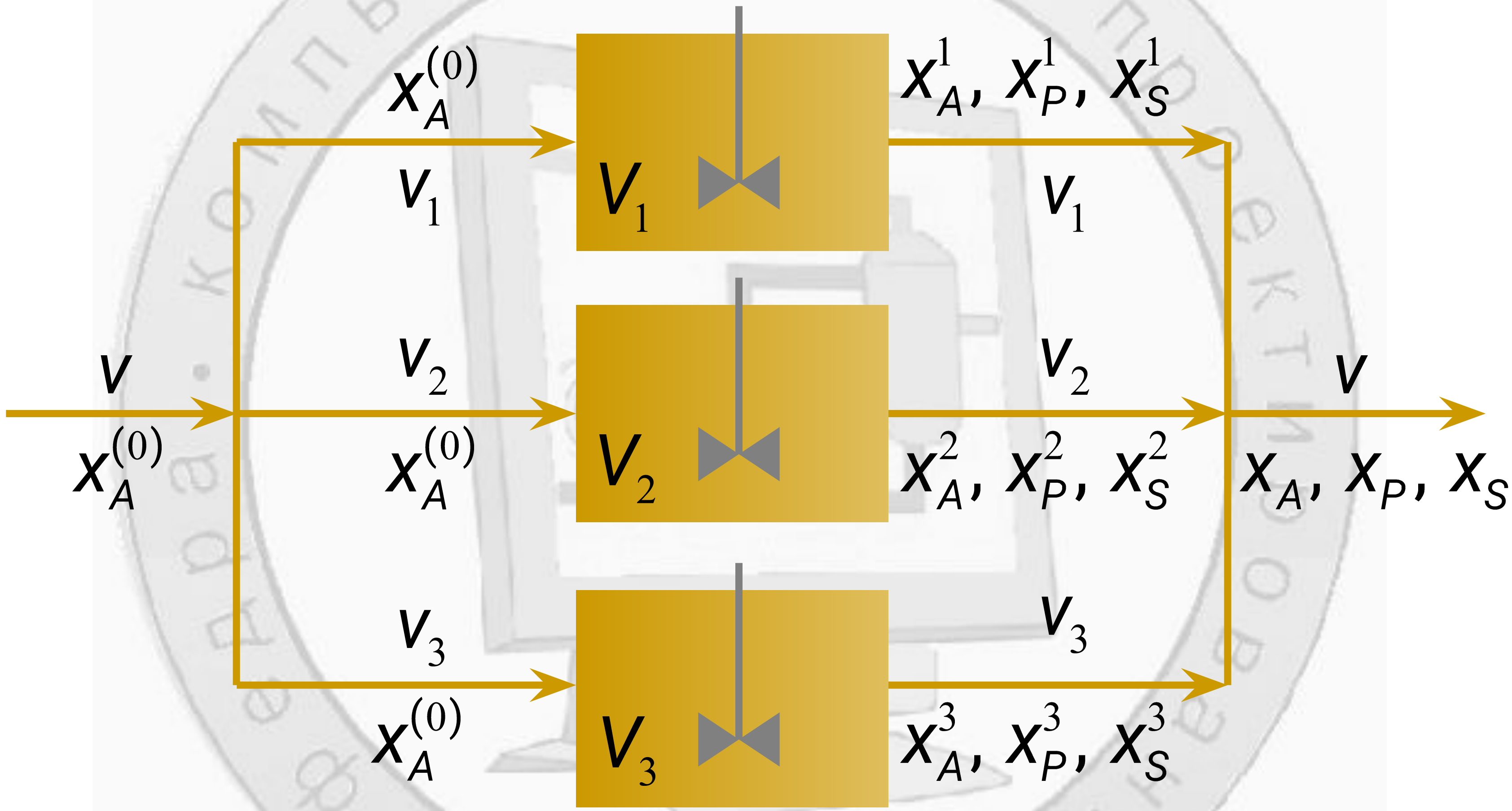
объёмы аппаратов, соответственно: $0{,}5,\ 0{,}6,\ 0{,}7\ м^3$

расход сырья $v = 3\ м^3/час$

условия работы аппаратов - изотермические

константы скоростей $k_1 = 0{,}65\ 1/час$; $k_2 = 0{,}3\ 1/час$

Решение


$x_A^{(0)}$
v_1
V_1
x_A^1, x_P^1, x_S^1
v_1
v
$x_A^{(0)}$
v_2
$x_A^{(0)}$
V_2
v_2
x_A^2, x_P^2, x_S^2
v
x_A, x_P, x_S
v_3
$x_A^{(0)}$
V_3
v_3
x_A^3, x_P^3, x_S^3

Критерий оптимальности для всей системы есть:

$$R = v \cdot x_P = \sum_{i=1}^{N} v_i \cdot x_P^i$$

Количество вещества P на выходе из i-го реактора:

$$v_i \cdot x_P^i = R_i$$

Уравнение ограничений на процесс:

$$\varphi = v - \sum_{i=1}^{N} v_i = 0$$

При оптимальных условиях должно выполняться равенства:

$$\frac{\partial R_i}{\partial v_i} = \frac{\partial R_{i+1}}{\partial v_{i+1}} \qquad i = 1, 2$$

Вычислим значение производной:

$$\frac{\partial R_i}{\partial v_i} = X_P^i + v_i \cdot \frac{\partial X_P^i}{\partial v_i}$$

Уравнения материального баланса по компонентам A и P для i-го реактора с расходом потока в нем v_i и его объемом V_i для реакции $A \xrightarrow{k_1} P \xrightarrow{k_2} S$, где k_1 , k_2 - константы скоростей реакции :

$$v_i \cdot (x_A^{(0)} - x_A^i) - V_i \cdot k_1 \cdot x_A^i = 0$$

$$-v_i \cdot x_P^i + V_i \cdot (k_1 \cdot x_A^i - k_2 \cdot x_P^i) = 0$$

Уравнения материального баланса по компонентам A и *P* для i-го реактора с использованием времени пребывания в реакторе τ_i имеют вид :

$$x_A^{(0)} - x_A^i - \tau_i \cdot k_1 \cdot x_A^i = 0$$

$$-x_P^i + \tau_i \cdot (k_1 \cdot x_A^i - k_2 \cdot x_P^i) = 0$$

$$\tau_i = V_i / v_i$$

Из полученной системы уравнений выразим концентрацию компонента Р в i – том аппарате через начальную концентрацию компонента A:

$$x_p^i = \frac{\tau_i \cdot x_A^{(0)} \cdot k_1}{(1+\tau_i \cdot k_1)\cdot(1+\tau_i \cdot k_2)}$$

$$\frac{\partial x_p^i}{\partial v_i} = \frac{\partial x_p^i}{\partial \tau_i}\frac{\partial \tau_i}{\partial v_i}$$

Тогда:

$$\frac{\partial x_P^i}{\partial v_i} = x_A^{(0)} \cdot \frac{k_1 \cdot \tau_i \cdot (k_1 \cdot k_2 \cdot \tau_i^2 - 1)}{v_i \cdot [(1 + \tau_i \cdot k_1) \cdot (1 + \tau_i \cdot k_2)]^2}$$

$$\tau_i = \frac{V_i}{v_i}$$

Из полученного выражения следует, что произведение

$$v_i \frac{\partial x_p^i}{\partial v_i} = v_i \frac{\partial x_p^i}{\partial v_i}(\tau_i)$$

зависит от времени пребывания τ_i ,а также из уравнений материальных балансов следует тоже зависимость только от времени пребывания τ_i :

$$x_p^i = x_p^i(\tau_i)$$

Так как в выражении для рассматриваемой реакции :

$$\frac{\partial R_i}{\partial v_i} = x_P^i + v_i \cdot \frac{\partial x_P^i}{\partial v_i}$$

оба слагаемых зависят от τ_i

а также поскольку:

$$\frac{\partial R_i}{\partial v_i} = \frac{\partial R_{i+1}}{\partial v_{i+1}}$$

то будет справедливо:

$$\frac{\partial R_i}{\partial v_i} = f(\tau_i) \qquad \frac{\partial R_{i+1}}{\partial v_{i+1}} = f(\tau_{i+1})$$

и имеем:

$$\tau_i = \tau_{i+1}$$

Откуда следует:

$$\frac{V_i}{v_i} = \frac{V_{i+1}}{v_{i+1}} \Rightarrow \frac{V_i}{V_{i+1}} = \frac{v_i}{v_{i+1}}$$

Получаем систему уравнений для расчёта распределения потоков:

$$\frac{V_1}{V_2} = \frac{v_1}{v_2}$$

$$\frac{V_2}{V_3} = \frac{v_2}{v_3}$$

$$V_1 + V_2 + V_3 = V$$

Подставляя исходные данные, получим:

$$\frac{0{,}5}{0{,}6} = \frac{v_1}{v_2}$$

$$0{,}5 \cdot v_2 = 0{,}6 \cdot v_1$$

Подставляя исходные данные, получим:

$$\frac{0{,}6}{0{,}7} = \frac{v_2}{v_3}$$

$$0{,}6 \cdot v_3 = 0{,}7 \cdot v_2$$

Подставляя исходные данные, получим:

$$v_1 + \frac{0{,}6}{0{,}5} \cdot v_1 + \frac{0{,}7}{0{,}6} \cdot \frac{0{,}6}{0{,}5} \cdot v_1 = 3$$

Откуда находим:

$$v_1 = 0{,}833\ м^3/час$$

$$v_2 = 1{,}0\ м^3/час$$

$$v_3 = 1{,}167\ м^3/час$$

ПРИМЕР 3. Оптимизация многостадийных процессов

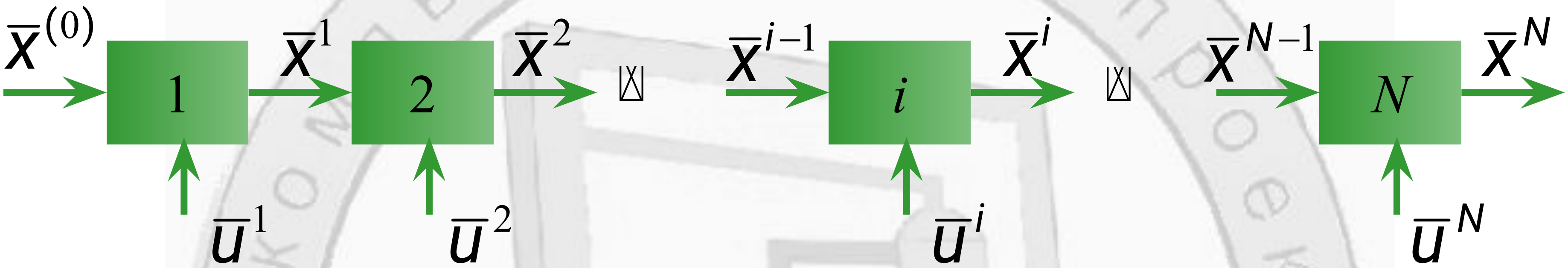
Рассмотрим многостадийный процесс, состоящий из стадий, каждая из которых описывается системой конечных уравнений вида:

$$x_k^i = \varphi_k^i\left(x_1^{i-1}, x_2^{i-1}, \ldots, x_n^{i-1}, u_1^i, u_2^i, \ldots, u_r^i\right)$$

$$k = 1, 2, \ldots, n$$

i – номер стадии

k – номер переменной



Каждая стадия представляет собой стационарный одностадийный процесс. Будем полагать, что размерности векторов $\bar{x}$ (n) и $\bar{u}$ (r) одинаковы для всех стадий.

Условные обозначения на схеме каскада аппаратов:

N - число стадий процесса (аппаратов)

$\overline{x}^i$ - вектор переменных состояния процесса на выходе из i-того аппарата и на входе в $i+1$ аппарат

$\overline{u}^i$ - вектор переменных управления i-том аппарате

r_i - частный критерий оптимальности в i-том аппарате

$R = \sum_{i=1}^{N} r_i$ - критерий оптимальности всего процесса – аддитивная функция в общем случае

Пусть критерий оптимальности многостадийного процесса задан в виде некоторой функции только от выходных параметров последней стадии:

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

Уравнения математической модели могут быть записаны в неявной форме:

$$\phi_k^i(\overline{x}^{i-1}, \overline{x}^i, \overline{u}^i) = 0$$

$$i = 1, 2, ..., N$$

$$k = 1, 2, ..., n$$

и могут рассматриваться как уравнения ограничений.

При использовании метода неопределённых множителей Лагранжа для решения задачи оптимизации соотношения математической модели на всех стадиях используются как ограничения, наложенные на переменные, часть из которых входит в выражение для критерия оптимальности:

$$x_1^i, x_2^i, \ldots, x_n^i, u_1^i, u_2^i, \ldots, u_r^i$$

Составим функцию Лагранжа:

$$\Phi = R(\bar{x}^N) + \sum_{i=1}^{N}\sum_{k=1}^{n}\lambda_k^i \varphi_k^i(\bar{x}^{i-1}, \bar{x}^i, \bar{u}^i)$$

При дифференцировании функции Лагранжа по всем переменным получим три типа уравнений:

дифференцирование по x_j^N*:*

$$\frac{\partial \Phi}{\partial x_j^N} = \frac{\partial R(\overline{x}^N)}{\partial x_j^N} + \sum_{k=1}^{n} \lambda_k^N \frac{\partial \phi_k^N(\overline{x}^{N-1}, \overline{x}^N, \overline{u}^N)}{\partial x_j^N} = 0$$

$$j = 1, \ldots n$$

дифференцирование по $x_j^i \; (i = 1, 2, ..., N-1)$:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial x_j^i} = \sum_{k=1}^{n} \lambda_k^{i+1} \frac{\partial \phi_k^{i+1}(\overline{x}^i, \overline{x}^{i+1}, \overline{u}^{i+1})}{\partial x_j^i} +$$

$$+ \sum_{k=1}^{n} \lambda_k^{i} \frac{\partial \phi_k^{i}(\overline{x}^{i-1}, \overline{x}^{i}, \overline{u}^{i})}{\partial x_j^i} = 0$$

$$\mathrm{j} = 1, \ldots \mathrm{n}$$

дифференцирование по $u_{\square}^{i}\ (\square = 1, 2, \ldots, r;\ \mathrm{i} = 1, \ldots \mathrm{N})$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial u_{\square}^{i}} = \sum_{k=1}^{r} \lambda_k^i \frac{\partial \phi_k^i(\overline{x}^{\,i-1}, \overline{x}^{\,i}, \overline{u}^{\,i})}{\partial u_{\square}^{i}} = 0$$

Для нахождения оптимума полученная система из трёх последних систем уравнений должна решаться совместно с уравнениями математической модели, которые получаются при дифференцировании по всем λ в соответствии с рассматриваемым методом Лагранжа.

Задача 3

Для заданного числа реакторов в каскаде $N = 3$ и заданной степени превращения реагента A $\chi_{AN} = 0{,}936$ реакции первого порядка типа $A \rightarrow P$ найти такое распределение объёмов реакторов V_i, при котором их суммарный объём V был бы минимальным. Условия работы каскада реакторов изотермические; значение константы скорости $k = 0{,}35$ $час^{-1}$, объёмный расход $v = 2м^3/час$.

Решение

Уравнение, соответствующее условиям ограничения:

$$x_{AN} = \frac{x_A^{(0)} - x_{AN}}{x_A^{(0)}} = 1 - \frac{x_{AN}}{x_A^{(0)}} = 0{,}936$$

Обозначим долю непревращенного реагента A на выходе из каскада реакторов:

$$\frac{x_{AN}}{x_A^{(0)}} = \eta_0$$

Тогда для каждого реактора каскада и для всех аппаратов:

$$\eta_i = \frac{x_A^i}{x_A^{i-1}} \quad \text{и} \quad \eta_0 = \prod_{i=1}^{N} \eta_i$$

N – число аппаратов в каскаде

Уравнение ограничений принимает вид:

$$\varphi = \eta_0 - \prod_{i=1}^{N} \eta_i = 0$$

Выразим критерий оптимальности через η_i, используя уравнения материального баланса для i-го реактора:

$$v \cdot x_A^{i-1} - v \cdot x_A^{i} - k \cdot V_i \cdot x_A^{i} = 0$$

Выразим объём i-го реактора как:

$$V_i = \frac{v}{k} \cdot \frac{X_A^{i-1} - X_A^i}{X_A^i} = \frac{v}{k}\left(\frac{X_A^{i-1}}{X_A^i} - 1 \right)$$

Учитывая, что

$$\eta_i = \frac{x_A^i}{x_A^{i-1}}$$

получим:

$$V_i = \frac{v}{k}\left(\frac{1}{\eta_i} - 1\right)$$

Критерий оптимальности будет иметь вид:

$$V = \sum_{i=1}^{N} V_i = \sum_{i=1}^{N} \frac{v}{k}\left(\frac{1}{\eta_i} - 1\right)$$

Будем искать такое распределение η_i, чтобы $V = \min$

Запишем функцию Лагранжа:

$$\Phi = \sum_{i=1}^{N} V_i + \lambda \cdot \left(\prod_{i=1}^{N} \eta_i - \eta_0 \right)$$

или

$$\Phi = \frac{v}{k} \cdot \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{1}{\eta_i} - 1 \right) + \lambda \cdot \left(\prod_{i=1}^{N} \eta_i - \eta_0 \right)$$

Необходимые условия оптимальности:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \eta_i} = \frac{v}{k} \cdot \left(-\frac{1}{\eta_i^2} \right) + \lambda \cdot \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^{N} \eta_k = 0$$

или

$$\frac{v}{k} \cdot \frac{1}{\eta_i} = \lambda \cdot \prod_{k=1}^{N} \eta_k$$

Поскольку последнее соотношение справедливо для любого номера i, имеем:

$$\eta_1 = \eta_2 = \cdots = \eta_N = \eta$$

Это означает, что:

$$\eta_0 = \eta^N$$

т.е. распределение η_i по всем аппаратам каскада должно быть одинаковым. Из последнего соотношения также следует, что распределение объёмов реакторов должно быть одинаковым и равным

$$V_i = \frac{v}{k} \cdot \left(\frac{1}{\sqrt[N]{\eta_0}} - 1 \right)$$

По условию $\eta_0 = 0{,}064$, тогда

$$V_i = \frac{2}{0{,}35} \cdot \left(\frac{1}{\sqrt[3]{0{,}064}} - 1 \right) = 8{,}6\ м^3$$