УДК 66.01

Н. Н. Зиятдинов, И. В. Зайцев, Т. В. Лаптева

ЭФФЕКТИВНОСТЬ АППРОКСИМАЦИИ УПРАВЛЕНИЙ В ДВУХЭТАПНОЙ ЗАДАЧЕ ПРОЕКТИРОВАНИЯ ОПТИМАЛЬНЫХ ХТС

Ключевые слова: оптимизация, оптимальное проектирование, одноэтапная задача, вероятностные ограничения.

Решение задачи проектирования химико-технологических систем должно проводиться с учетом неопределенности исходной информации, т.е. нужно определить такие конструктивные и технологические параметры, при которых будут выполняться все ограничения, несмотря на изменение внутренних и внешних факторов на стадии функционирования. В статье рассматривается двухэтапная задача с вероятностными ограничениями. Зависимость управлений от неопределенных параметров предложено аппроксимировать различными математическими зависимостями. Для снижения вычислительных затрат предложено использовать разбиение области неопределенности на подобласти и аппроксимация управлений на каждой подобласти. В статье рассматриваются кусочно-постоянная и кусочно-линейная аппроксимация управлений.

Keywords: optimization, optimal design, one-stage problem, chance constraints.

A problem of technical system design must be solving taking into account uncertainty of physical, chemical and economical data. It is an important problem to obtain construction and control parameters which will satisfy all constraints (definitely or with some probability) despite of inner and outer influence during operation. This paper reviews two-stage problem with chance constraints. Authors propose the control variable approximation depend on uncertain variables. The uncertainty region partition and the unique control variable approximation on the subregion using to save of computational efforts are proposed in the paper. The piecewise constant and PWL function forms are proposed in the paper.

Введение

Решение задач проектирования оптимальных химико-технологических процессов невозможно без учета неопределенности, присутствующей в исходной информации о процессе. Формализация задачи проектирования имеет вид задачи условной оптимизации, причем в зависимости от формы учета возможности управления ХТС задача принимает одну из форм:

1. одноэтапной задачи оптимизации (ОЭЗО), постановка которой возникает в предположении неизменности управлений на этапе функционирования.
2. двухэтапной задачи оптимизации (ДЭЗО), которая предусматривает возможность изменения управлений на этапе функционирования в зависимости от состояния ХТС;

В зависимости от требования выполнения ограничений задачи проектирования оптимальных ХТС различают мягкие или вероятностные ограничения, выполнение которых требуется с заданной вероятностью, либо ограничения, которые должны выполняться безусловно – жесткие ограничения.

В настоящее время методы решения ОЭЗО получили значительное развитие, как в постановке с жесткими так и с мягкими ограничениями [3, 4, 5]. Для двухэтапных задач с жесткими ограничениями методы решения предложены в [1, 2].

В отличие от ОЭЗО с мягкими ограничениями, методы решения ДЭЗО с мягкими ограничениями получили меньшее развитие. Трудности формулирования и решения этой задачи были показаны в [7]. В [8] рассмотрен подход к решению задачи, который не гарантировал требуемую вероятность выполнения мягких ограничений. Для решения ДЭЗО с мягкими ограничениями нами предложен подход в [6].

Запишем двухэтапную задачу оптимизации с мягкими ограничениями

$$f_1 = \min_{d,z(\theta)\in H} E[f(d,z(\theta),\theta)] \qquad (1)$$

$$\Pr\{g_j(d,z(\theta),\theta) \le 0\} \ge \alpha_j,\ j=\overline{1,m+p},\ \forall\theta\in T,$$

где d – n_d-вектор конструктивных переменных, z – n_z-вектор управляющих переменных, θ – n_θ-вектор неопределенных параметров, $\theta\in T$, где $T=\{\theta_i:\theta_i^L\le\theta_i\le\theta_i^U, i=\overline{1,n_\theta}\}$ – область неопределенности, область H – допустимая область для переменных d и z, $H=\{d,z: h_l(d,z(\theta))\le 0, l=\overline{1,p}, \theta\in T\}$,

$g_j(d,z(\theta),\theta)=h_{j-m}(d,z(\theta))$, $\quad j=\overline{m+1,m+p}$,

$\Pr\{g_j(d,z(\theta),\theta)\le 0\}$ есть вероятностная мера области $\Omega_j=\{\theta: g_j(d,z(\theta),\theta)\le 0, \theta\in T\}$,

$$\Pr\{g_j(d,z(\theta),\theta)\le 0\} = \int_{\Omega_j}\rho(\theta)d\theta,$$

$$E[f(d,z(\theta),\theta)] = \int_T f(d,z(\theta),\theta)\rho(\theta)d\theta.$$

В дальнейшем будем предполагать, что все неопределенные параметры θ являются независимыми случайными величинами и имеют нормальное распределение $N_i(E[\theta_i],\sigma_i)$.

Сведение вероятностной задачи оптимизации к детерминированной

Основная проблема решения задачи (1) состоит в большой трудоемкости вычисления многомерных интегралов $\Pr\{g_j(d,z,\theta)\le 0\}$ и $E[f(d,z(\theta),\theta)]$.

В [6] показано, что задачу с вероятностными ограничениями (1) можно свести к задаче с детерминированными ограничениями, получив при этом верхнюю оценку задачи (1)

$$f_3 = \min_{d,z(\theta)\in H,\theta_i^{L,j},\theta_i^{U,j}} E[f(d,z(\theta),\theta)] \qquad (2)$$

$$\max_{\theta\in T_{\alpha_j}} g_j(d,z(\theta),\theta)\le 0,\ j=\overline{1,m+p},$$

$$\prod_{i=1}^{n_\theta}[\Phi(\tilde\theta_i^{U,j})-\Phi(\tilde\theta_i^{L,j})]\ge\alpha_j,\ j=\overline{1,m+p}.$$

где $T_{\alpha_j}=\{\theta_i:\theta_i^{L,j}\le\theta_i\le\theta_i^{U,j}, i=\overline{1,n_\theta}\}$, вероятность попадания нормально распределенных независимых случайных величин θ_i в диапазон $[\theta_i^{L,j},\theta_i^{U,j}]$

$$\int_{\theta_i^{L,j}}^{\theta_i^{U,j}}\rho(\theta_i)d\theta_i=\Phi(\tilde\theta_i^{U,j})-\Phi(\tilde\theta_i^{L,j}),$$

$\Phi(\xi)$ – функция стандартного нормального распределения, величины

$$\tilde\theta_i^{U,j}=\frac{\theta_i^{U,j}-E[\theta_i]}{\sigma_i},\ \tilde\theta_i^{L,j}=\frac{\theta_i^{L,j}-E[\theta_i]}{\sigma_i}.$$

В задаче (2) управляющие переменные $z(\theta)$ могут иметь любую форму зависимости от неопределенных параметров θ_i. Ограничив возможный вид зависимости линейным видом, получим $\tilde z(\theta)=b_0+b_1\theta_1+...+b_{n_\theta}\theta_{n_\theta}$, где параметры b_i являются векторами размерности n_z. Для того, чтобы линейная аппроксимация давала хорошее качество приближения необходимо, чтобы область неопределенности имела малый размер.

Решение задачи (2) требует выполнения трудоемкой операции вычисления $E[f(d,z(\theta),\theta)]$. Для упрощения решения задачи в [4] было предложено проводить разбиение неопределенности T на подобласти T_q, где в каждой подобласти аппроксимировать математическое ожидание функции $f(d,z(\theta),\theta)$ математическим ожиданием линейной аппроксимации

$$\bar f_{ap}(d,z(\theta),\theta^q)=\bar f(d,z(\theta),\theta^q)+$$
$$+\sum_{i=1}^{n_\theta}\frac{\partial\bar f(d,z(\theta),\theta^q)}{\partial\theta_i}(\theta_i-\theta_i^q),\ \theta^q\in T_q^{(k)}.$$

В [6] было предложено проводить одновременное улучшение аппроксимации критерия задачи (2) и аппроксимации управлений $\tilde z(\theta)=b_0+b_1\theta_1+...+b_{n_\theta}\theta_{n_\theta}$, проводя одновременное разбиение области неопределенности T и T_α.

На k-ой итерации задача (2) примет вид.

$$f_4^{(k)}=\min_{d\in H,b_i^q,\theta_i^{L,j,l},\theta_i^{U,j,l}} E_{ap}[\bar f(d,b,\theta)] \qquad (3)$$

$$\max_{\theta\in T_{\alpha_j}^l}\bar g_j(d,b^s,\theta)\le 0,\ j=\overline{1,m+p},\ l=\overline{1,N_j^{(k)}},$$

$s=p$,

где $T_{\alpha_j}^l\in T_q^{(k)}$,

$$\sum_{l=1}^{N_j^{(k)}}\prod_{i=1}^{n_\theta}[\Phi(\tilde\theta_i^{U,j,l})-\Phi(\tilde\theta_i^{L,j,l})]\ge\alpha_j,\ j=\overline{1,m+p},$$

$$\tilde\theta_i^{U,j}=\frac{\theta_i^{U,j}-E[\theta_i]}{\sigma_i},\ \tilde\theta_i^{L,j}=\frac{\theta_i^{L,j}-E[\theta_i]}{\sigma_i},$$

$\theta_i^L\le\theta_i^{L,j,l}$, $\theta_i^{U,j,l}\le\theta_i^U$, $i=\overline{1,n_\theta}$, $j=\overline{1,m+p}$, $l=\overline{1,N_j^{(k)}}$,

где $N_j^{(k)}$ – количество подобластей $T_{\alpha_j}^l$ области T_{α_j} для j-го ограничения на k-ой итерации. Задача (3) является задачей полубесконечного программирования. Для возможности применения к решению задачи метода внешней аппроксимации в [6] предложено провести замену переменных, в результате чего была получена задача

$$f_4^{(k)}=\min_{d\in H,b_i^q,\theta_i^{L,j,l},\theta_i^{U,j,l}} E_{ap}[\bar f(d,b,\theta)] \qquad (4)$$

$$\max_{w\in T_{j,l}^{w,(k)}}\bar g_j(d,b^s,\theta^{L,j,l}+(\theta^{U,j,l}-\theta^{L,j,l})w)\le 0,$$

$j=\overline{1,m+p}$, $l=\overline{1,N_j^{(k)}}$, $s=p$, где $T_{\alpha_j}^l\in T_q^{(k)}$

$$\sum_{l=1}^{N_j^{(k)}}\prod_{i=1}^{n_\theta}[\Phi(\tilde\theta_i^{U,j,l})-\Phi(\tilde\theta_i^{L,j,l})]\ge\alpha_j,\ j=\overline{1,m+p},$$

$$\tilde\theta_i^{U,j}=\frac{\theta_i^{U,j}-E[\theta_i]}{\sigma_i},\ \tilde\theta_i^{L,j}=\frac{\theta_i^{L,j}-E[\theta_i]}{\sigma_i},\ i=\overline{1,n_\theta},$$

$j=\overline{1,m+p}$,

$\theta_i^L\le\theta_i^{L,j,l}$, $\theta_i^{U,j,l}\le\theta_i^U$, $i=\overline{1,n_\theta}$, $j=\overline{1,m+p}$, $l=\overline{1,N_j^{(k)}}$,

$w_i\in T^W=\{w_i:0\le w_i\le 1\}$, $i=\overline{1,n_\theta}$.

Вычислительный эксперимент

В задаче (4) управления представлены зависимостью от неопределенных параметров на подобласти. Предложенный подход к решению двухэтапной задачи оптимизации химико-технологической системы был рассмотрен для двух видов зависимости управлений от неопределенных параметров:

кусочно-постоянной:

$$\tilde{z}_1(\theta) = b_0, \quad (5)$$

кусочно-линейной

$$\tilde{z}_2(\theta) = b_0 + \sum_{i=1}^{5} b_i \theta_i . \quad (6)$$

Для аппроксимации функции цели в критерии задачи использовалась кусочно-постоянная зависимость.

Технологическая система состоит из реактора и теплообменника с рециклом (Рис. 1) [9]. В реакторе объема V протекает экзотермическая реакция первого порядка вида $A \xrightarrow{k_0} B$. Рецикл (с расходом F_1) используется для управления температурой T_1, в реакторе. Противоточный теплообменник служит для охлаждения рециклического потока F_1, используя холодную воду с расходом F_W, кг*моль/ч. Процесс служит для получения целевого продукта B. Неопределенными параметрами задачи являются F_0, T_0 (К), T_{W1} (К), k_R (м³/кг*моль*ч), U (кДж/м²). Область неопределенности T характеризуется отклонениями δ от номинальных значений неопределенных параметров (см. табл. 1). В качестве критерия оптимальности использованы приведенные затраты

$$f = 691{,}2 \cdot V^{0,7} + 873 \cdot A_t^{0,6} + 1{,}76 \cdot F_W + 7{,}056 \cdot F_1,$$

где A_t - площадь теплообменника.

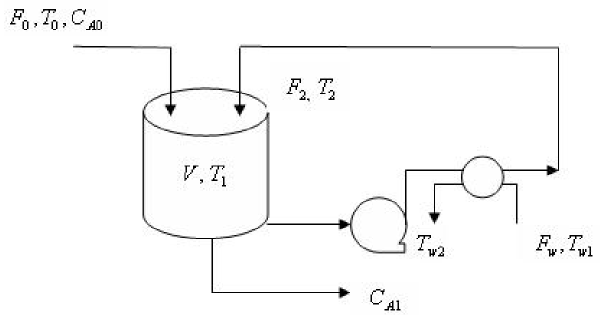

Рис. 1 – Технологическая схема примера 2

Математические модели реактора и теплообменника имеют вид:

$$\frac{F_0(C_{A0} - C_{A1})}{C_{A0}} = Vk_R \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) C_{A1}$$

$$\frac{(-\Delta H) F_0 (C_{A0} - C_{A1})}{C_{A0}} = F_0 c_p (T_1 - T_0) + Q_{HE}$$

$$Q_{HE} = F_1 c_p (T_1 - T_0) = F_W c_{pw} (T_{W2} - T_{W1})$$

$$Q_{HE} = A_t U (\Delta T)_m = A_t U \frac{(T_1 - T_{W2}) - (T_2 - T_{W1})}{\ln\left\{\frac{T_1 - T_{W2}}{T_2 - T_{W1}}\right\}}$$

Конструктивные переменные: V, A_t. Управляющие переменные: T_1, T_{W2}.

Таблица 1 - Отклонение неопределенных параметров от номинального значения

Параметр	F_0	T_0	T_{W1}	k_R	U
Номинал	45.36	393	300	9.81	1635.34
δ	0.1	0.02	0.03	0.1	0.1

Величины в таблице 1 имеют следующие размерности: F_0 - кг*моль/ч, T_0 - К, T_{W1} - К, k_R - м³/кг*моль*ч, U - кДж/м². Область неопределенности имеет вид 5-мерного параллелепипеда, в котором каждый параметр θ находится в пределах отрезка $[\theta^L; \theta^U]$, где $\theta^L = \theta^N(1-\delta)$, $\theta^U = \theta^N(1+\delta)$, θ^N - номинальное значение.

Ограничения в задаче имеют вид:

1. $V \geq 0$
2. $A \geq 0$
3. $0.9 \leq (C_{A0} - C_{A1}) / C_{A0} \leq 1$
4. $T_2 - T_1 \leq 0$
5. $T_{W1} - T_{W2} \leq 0$
6. $T_{W1} - T_2 + 11.1 \leq 0$
7. $T_{W2} - T_1 + 11.1 \leq 0$
8. $311 \leq T_1 \leq 389$
9. $311 \leq T_2 \leq 389$
10. $301 \leq T_{W2} \leq 355$

Результаты применения предложенного подхода с использованием двух видов зависимости управляющих переменных от неопределенных параметров(5), (6) представлены в таблице 2.

Для каждой итерации приводятся f – оптимальное значение целевой функции задачи (4), оптимальные значения конструктивных параметров: объема реактора V и поверхности теплообмена в теплообменнике A_t, t – кумулятивное по итерациям время решения задачи, сек.

Из таблицы видно, что использование кусочно-постоянной аппроксимации управлений позволяет сократить время вычислений на порядок в сравнении с использованием кусочно-линейной аппроксимации. Однако время вычисления сильно увеличивается на последних итерациях, а на первых мало. В то же время видно, что использование кусочно-линейной аппроксимации управлений дает лучшие значения критерия и конструктивных переменных в сравнении с кусочно-постоянной аппроксимацией управлений.

Очевидно, что при использовании кусочно-линейной аппроксимации управлений (6) задача (4) имеет большую размерность, поскольку количество поисковых переменных для каждой подобласти области неопределенности увеличивается на $(n_\theta - 1)$ по сравнению с аппроксимацией (5). Большая степень свободы позволяет получать лучшее решение, однако увеличение размерности задачи по поисковым переменным требует больших вычислительных затрат.

Таблица 2 – Результаты решения двухэтапной задачи при разных видах аппроксимации управлений

α	it	f	V	A_t	t
0,5	кусочно-постоянная аппроксимация управлений $z(\theta)$				
	0	9860	5,64	7,24	0,11
	1	9839	5,58	7,28	0,4
	2	9854	5,58	7,35	1,3
	3	9893	5,58	7,42	7,5
	4	9910	5,58	7,51	62
	кусочно-линейная аппроксимация управлений $z(\theta)$				
	0	9860	5,64	7,24	4
	1	9837	5,57	7,27	20
	2	9847	5,57	7,33	41
	3	9861	5,57	7,37	117
	4	9865	5,57	7,39	314
0,75	кусочно-постоянная аппроксимация управлений $z(\theta)$				
	0	9940	5,8	7,28	0,13
	1	9913	5,73	7,31	0,4
	2	9928	5,73	7,39	1,5
	3	10006	5,81	7,47	8
	кусочно-линейная аппроксимация управлений $z(\theta)$				
		9940	5,8	7,28	3
		9913	5,73	7,31	8
		9928	5,73	7,39	43
		9967	5,73	7,45	412

В таблице: α – заданная вероятность выполнения ограничений, it – номер итерации.

Выводы

Анализ полученных результатов показывает, что на первых итерациях реализации подхода, когда подобласти области неопределенности, полученные дроблением, еще имеют большой размер, использование кусочно-линейной зависимости для аппроксимации управлений может дать лучший результат, поскольку количество подобластей области неопределенности на начальных итерациях еще мало. Это видно из таблицы 2 по значениям t на первых итерациях. На последних итерациях количество подобластей сильно увеличивается, и при использовании кусочно-линейной аппроксимации экспоненциально растет число поисковых переменных.

В то же время, на последних итерациях работы подхода с увеличением числа подобластей области неопределенности подобласти становятся малыми по размеру и зависимость управлений от неопределенных параметров на подобласти может быть хорошо аппроксимирована кусочно-постоянной зависимостью. Это позволит сократить время вычислений на последних итерациях и уменьшить общие вычислительные затраты.

Литература

1. K.P. Halemane, I.E. Grossmann, AIChE J, V. 29, 425-433 (1983);
2. Г.М. Островский, Н.Н. Зиятдинов, Т.В. Лаптева, И.Д. Первухин, Вестник Казан. технол. ун-та, 6, 199-206 (2011);
3. U.M. Diwaker, J.R. Kalagnanam, AIChE J, 43, 440-449 (1997);
4. Т.В. Лаптева, Н.Н. Зиятдинов, Д.Д. Первухин, Вестник Казан. технол. ун-та, 7, 218-224 (2011);
5. Т.В. Лаптева, Н.Н. Зиятдинов, Г.М. Островский, Д.Д. Первухин, ТОХТ, 44, 5, 507-515 (2010);
6. Н.Н. Зиятдинов, Г.М. Островский, И.В. Зайцев, Т.В. Лаптева, Вестник Казан. технол. ун-та, 14, 10, 223-231 (2011);
7. M.G. Ierapetritou, E.N. Pistikopoulos, Ind. Eng. Chem. Res, 33, 1930–1942 (1994);
8. H.S. Wellons, G.V. Reklaitis, Comp. Chem. Eng., 13, 2, 213-227 (1989);
9. K.P. Halemane, I.E. Grossmann, AIChE J, 29, 425–433 (1983).

© Н. Н. Зиятдинов - д-р техн. наук, проф., зав. каф. системотехники КНИТУ, nnziat@yandex.ru; **И. В. Зайцев –** асс. той же кафедры, izaytsev.systech@gmail.com; **Т. В. Лаптева –** канд. техн. наук, доц. той же кафедры, tanlapteva@yandex.ru.