УДК 66.011

Т. В. Лаптева, Н. Н. Зиятдинов, Г. М. Островский,
И. В. Зайцев

УЧЕТ СТАТИСТИЧЕСКОЙ ЗАВИСИМОСТИ НЕОПРЕДЕЛЕННЫХ ПАРАМЕТРОВ ПРИ ОПТИМИЗАЦИИ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Ключевые слова: оптимальное проектирование технологических процессов, оптимизация с учетом неопределенности, вероятностные ограничения, статистически зависимые параметры.

Проектирование оптимальных химико-технологических систем при учете неопределенности исходной физической, химической и экономической информации должно обеспечивать получение работоспособной конструкции. В статье рассматриваются одноэтапная и двухэтапная задачи оптимизации с жесткими и мягкими ограничениями, решение которых необходимо при проектировании гибких оптимальных систем. Предлагаются подходы, позволяющие учитывать взаимную статистическую зависимость между неопределенными параметрами в постановке задачи

Key words: optimal process design, optimization under uncertainty, chance constraints, statistically dependent uncertain parameters.

Effective chemical process design under physical, chemical, economic uncertainty must obtain a flexible process. In this paper one-stage and two-stage problems with hard and chance constraints are considered. Ones must be solved to obtain an effective flexible process. Approaches, which take into account the statistically relationship between parameters, are discussed.

Введение

Проектирование химико-технологических систем (ХТС) происходит в условиях частичной неопределенности исходной информации, вследствие чего необходимо проектировать гибкую ХТС, которая будет работать эффективно в смысле заданного критерия эффективности и будет работоспособна, то есть будет выполнять предъявляемые к ней требования [1]. Решение этих задач отличается исключительной сложностью. Однако еще в 70-х годах Sargent [2] уже отметил, что мы должны рассматривать задачи проектирования как задачи математического программирования, несмотря на их сложность и большую размерность. Поэтому разработка эффективных и быстродействующих методов решения задач проектирования ХТС остается актуальной задачей.

Выделим в жизни ХТС две стадии – функционирования и проектирования, и предположим, что неопределенные параметры относятся к вероятностному типу с известными параметрами закона распределения, о которых можно получить точную информацию на этапе функционирования. Это приводит задачи проектирования оптимальных ХТС к виду задач стохастической оптимизации. Для решения задач проектирования с учетом неопределенности обычно используют одноэтапную или двухэтапную задачи оптимизации. Далее мы будем рассматривать задачи с вероятностными и жесткими ограничениями.

Неопределенность в критерии задачи будем учитывать, используя математическое ожидание функции $f(d,z,\theta)$, характеризующей эффективность работы ХТС, за рассматриваемый период функционирования, где d – n_d-вектор конструктивных параметров, z – n_z-вектор управляющих переменных, θ – n_θ-вектор неопределенных параметров, $f(d,z,\theta)$ – некоторая функция оценки эффективности функционирования ХТС. О параметрах θ известно, что они принадлежат некоторой области T. Тогда среднее значение функции $f(d,z,\theta)$ на области T изменения значений параметров θ за период функционирования вычисляется по формуле [3]

$$E_\theta[f(d,z,\theta),T] = \int_T f(d,z,\theta)\rho(\theta)d\theta, \tag{1}$$

$\rho(\theta)$ – плотность распределения для параметров θ.

Одноэтапная и двухэтапная задачи оптимизации

Одноэтапная задача оптимизации с учетом вероятностных и жестких ограничений имеет вид [4]

$$\min_{d,z\in H} E_\theta[f(d,z,\theta)] \tag{2}$$

$$\Pr\{g_j(d,z,\theta)\le 0\}\ge \alpha_j,\ j=1,\dots,m, \tag{3}$$

$$\max_{\theta\in T} g_j(d,z,\theta)\le 0,\ j=m+1,\dots,m+p. \tag{4}$$

где H – область изменения конструктивных и управляющих параметров, $\Pr\{g_j(d,z,\theta)\le 0\}$ – вероятность удовлетворения ограничения $g_j(d,z,\theta)\le 0$

$$\Pr\{g_j(d,z,\theta)\le 0\} = \int_{\Omega_j}\rho(\theta)d\theta \ge \alpha_j, \tag{5}$$

$$\Omega_j = \{\theta : g_j(d,z,\theta)\le 0, \theta\in T\}. \tag{6}$$

Правая часть равенства (5) есть вероятность попадания случайной точки θ в область Ω_j. Ограничения (4) являются жесткими.

Двухэтапная задача стохастической оптимизации предполагает учет возможности подстройки управляющих переменных под изменяющиеся условия эксплуатации, и имеет вид

$$f_1 = \min_{d,z(\theta)} \int_T f(d,z(\theta),\theta)\rho(\theta)d\theta, \tag{7}$$

$$\Pr\{g_j(d,z(\theta),\theta)\le 0\}\ge \alpha_j,\ j=1,\dots,m+p. \tag{8}$$

$$g_j(d,z(\theta),\theta)\le 0,\ j=m+1,\dots,m+p,\ \forall\theta\in T, \quad (9)$$

$0\le\alpha<1,\ j=1,\dots,m,$

где

$g_j(d,z(\theta),\theta)\equiv h_j(d,z(\theta)),\ j=m+1,\dots,m+p.$

Здесь $\Pr\{g_j(d,z(\theta),\theta)\le 0\}$ определена (5), где $\Omega_j=\{\theta: g_j(d,z(\theta),\theta)\le 0\}$.

В задаче (7) управляющие переменные $z(\theta)$ являются многомерными функциями неопределенных параметров θ.

Основная сложность решения задач (2) и (7) в виде задач нелинейного программирования состоит в необходимости на каждой итерации вычислять многомерные интегралы в критерии и ограничениях задач. В связи с этим желательно либо исключить вычисление многомерных интегралов либо значительно снизить число таких вычислений.

Известны три пути преодоления таких сложностей. Первый подход использует Гауссовы квадратуры [5]. Acevedo и Pistikopoulos [6] рекомендуют три альтернативные квадратурные формулы. Для нормально распределенных параметров Bernardo с соавторами [7] предложили специальную квадратурную формулу для вычисления многомерного интеграла, которая значительно снижает число требуемых точек (узлов) вычисления функции. Второй подход основан на использовании методик дискретизации (Монте-Карло, Латинский гиперкуб или дискретизирующие последовательности Hammersley (HSS)) [8], [9]. Авторы показали, что среди всех подходов дискретизации подход HSS наиболее эффективен. К сожалению, оба подхода требуют нескольких сотен аппроксимационных точек для получения приемлемой точности.

Третий подход состоит в преобразовании вероятностных ограничений в детерминированные. Способ преобразования линейных вероятностные ограничения в детерминированные предложен в [10]. В [11] Maranas дает преобразование для ограничений, зависящих нелинейно от поисковых переменных и линейно от неопределенных параметров. Группа ученых под руководством Wozny в работе [12] предложили метод решения стационарной одноэтапной задачи оптимизации с вероятностными ограничениями для случая монотонной зависимости между значениями ограничений и значениями неопределенных параметров.

Верхние оценки критериев задач

Нами были предложены подходы к решению ОЭЗО [13, 14] и ДЭЗО [15] с вероятностными и жесткими ограничениями, позволяющие избежать многомерного интегрирования на каждой итерации. В статье будет предложен подход к решению ОЭЗО и ДЭЗО с вероятностными и жесткими ограничениями.

В [16] мы предложили формализацию задачи верхней оценки критерия ОЭЗО с вероятностными и жесткими ограничениями. Для исключения вероятностных ограничений в [14, 16] предложено каждое ограничение (3) заменять на

$$\max_{\theta\in\overline{T}_{\alpha_j}} g_j(d,z,\theta)\le 0, \quad (10)$$

$$\Pr\{\theta\in\overline{T}_{\alpha_j}\}\ge\alpha_j. \quad (11)$$

Проводить поиск формы, размера и местонахождения области $\overline{T}_{\alpha_j}$ сложно, поэтому аппроксимируем ее многомерным прямоугольником T_{α_j} [16]. Тогда мы получим верхнюю оценку критерия задачи (2).

Задача уточнения верхней оценки критерия задачи (2) [14], [16] на k-ой итерации имеет вид задачи полубесконечного программирования [17]

$$f_1^{(k)}=\min_{d,z\in H,\theta_i^{L,j,l},\theta_i^{U,j,l}} E_{ap}[f(d,z,\theta),T], \quad (12)$$

$$\max_{w^{jl}\in T_w^{(k),jl}} g_j(d,z,\theta^{L,j,l}+(\theta^{U,j,l}-\theta^{L,j,l})w^{jl})\le 0, \quad (13)$$

$j=1,\dots,m,\ l=1,\dots,N_j^{(k)},$

$$\max_{\theta\in T_{jl}} g_j(d,z,\theta)\le 0,\ j=m+1,\dots,m+p, \quad (14)$$

$$\sum_{l=1}^{N_j^{(k)}}\prod_{i=1}^{n_\theta}[\Phi(\tilde\theta_i^{U,j,l})-\Phi(\tilde\theta_i^{L,j,l})]\ge\alpha_j,\ j=1,\dots,m, \quad (15)$$

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

$$\theta_i^{LR,j,l}\le\theta_i^{L,j,l},\ \theta_i^{U,j,l}\le\theta_i^{UR,j,l},\ \theta_i^{L,j,l}\le\theta_i^{U,j,l} \quad (16)$$

$i=1,\dots,n_\theta,\ j=1,\dots,m,\ l=1,\dots,N_j^{(k)},$

$T_w^{(k),jl}=\{w_i^{jl}: 0\le w_i^{jl}\le 1, i=1,\dots,n_\theta\},$

где

$$E_{ap}[f(d,z,\theta);T]=$$

$$=\sum_{l=1}^{N^{(k)}}\left(a_l f(d,z,\theta^l)+\sum_{i=1}^{n_\theta}\frac{\partial f(d,z,\theta^l)}{\partial\theta_i}(E[\theta_i;T_l]-a_l\theta_i^l)\right) \quad (17)$$

$$a_l=\int_{T_l}\rho(\theta)d\theta, \quad (18)$$

$$E[\theta_i;T_l]=\int_{T_l}\theta_i\rho(\theta)d\theta, \quad (19)$$

Φ – функция стандартного нормального распределения.

Уточнение оценки проводится на основе процедуры, использующей на k-й итерации разбиение области T на $N^{(k)}$ подобластей T_l, $l=1,\dots,N^{(k)}$, [4, 18], где

$$T=\bigcup_{l=1}^{N_k}T_q,\ T_{l_1}\cap T_{l_2}=\varnothing, \quad (20)$$

где $l_1 = 1,..,N^{(k)}$, $l_2 = 1,..,N^{(k)}$ и $l_1 \neq l_2$, а также разбиение на подобласти областей $T_{jl}^{(k)}$, аппроксимирующих $\overline{T}_{\alpha_j}$

$$T_{jl}^{(k)} \cap T_{jq}^{(k)} = \varnothing,\ j=1,\ldots,m,\ l=1,\ldots,N_j^{(k)}, q=1,\ldots,N_j^{(k)},\ l \neq q. \qquad (21)$$

Каждому ограничению (3) будет соответствовать своё множество областей $T_{jl}^{(k)}$,

$$T_{jl}^{(k)} = \{\theta : \theta_i^{L,j,l,(k)} \le \theta_i \le \theta_i^{U,j,l,(k)}, i = 1,\ldots,n_\theta\},$$

$$l = 1,\ldots,N_j^{(k)}.$$

Алгоритм решения ОЭЗО (2) на основе вычисления верхней оценки критерия приведен в [14].

Аппроксимация (17) [18] могла бы быть использована и для ДЭЗО (7), но мы не знаем вида зависимости управляющих переменных $z(\theta)$ от неопределенных параметров θ. В [19] мы предложили аппроксимировать $z(\theta)$ кусочно-линейной зависимостью

$$\tilde{z}(\theta) = \begin{cases} b_0^1 + b_1^1\theta_1 + \ldots b_{n_\theta}^1\theta_{n_\theta}, & \theta \in T_1^{(k)}, \\ \vdots & \\ b_0^{N^{(k)}} + b_1^{N^{(k)}}\theta_1 + \ldots b_{n_\theta}^{N^{(k)}}\theta_{n_\theta}, & \theta \in T_{N^{(k)}}^{(k)}. \end{cases} \qquad (22)$$

Здесь вектора b_i^l, $i = 1,\ldots,n_\theta$, $l = 1,\ldots,N^{(k)}$, имеют размерность n_z. При малых размерах областей T_l мы можем получить хорошую аппроксимацию зависимостей $z(\theta)$. Вид аппроксимации критерия для ДЭЗО [20] примет вид

$$E_{ap}[F(d,b,\theta),T] = \sum_{l=1}^{N^{(k)}} [a_l F(d,b^l,\theta^l) + \sum_{i=1}^{n_\theta} \frac{\partial F(d,b^l,\theta^l)}{\partial \theta_i}(E[\theta_i,T_l] - a_l\theta_i^l)] \qquad (23)$$

здесь $F(d,b,\theta) \equiv f(d,b^0 + b^1\theta_1 + \cdots b^{n_\theta}\theta_{n_\theta},\theta)$, и для a_l, $E[\theta_i,T_l]$ используются формулы (18), (19).

Итак, мы получим вид верхней оценки критерия ДЭЗО (7) [20]

$$f_2^{(k)} = \min_{d,b \in H,\theta_i^{L,j,l},\theta_i^{U,j,l}} E_{ap}[F(d,b,\theta),T] \qquad (24)$$

$$\max_{w^{jl} \in T_w^{(k),jl}} G_j(d,b,\theta^{L,j,l} + (\theta^{U,j,l} - \theta^{L,j,l})w^{jl}) \le 0,$$

$$j = 1,\ldots,m,\ l = 1,\ldots,N_j^{(k)},$$

$$\max_{\theta \in T_{jl}} G_j(d,b,\theta) \le 0,\ j = m+1,\ldots,m+p,\ l = 1,\ldots,N_j^{(k)},$$

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

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

$$\theta_i^{LR,j,l} \le \theta_i^{L,j,l},\ \theta_i^{U,j,l} \le \theta_i^{UR,j,l},\ \theta_i^{L,j,l} \le \theta_i^{U,j,l},$$

$$i = 1,\ldots,n_\theta,\ j = 1,\ldots,m,\ l = 1,\ldots,N_j^{(k)},$$

$$T_w^{(k),jl} = \{w_i^{jl} : 0 \le w_i^{jl} \le 1, i = 1,\ldots,n\}.$$

где $F(d,b,\theta) \equiv f(d,b^0 + b^1\theta_1 + \cdots b^{n_\theta}\theta_{n_\theta},\theta)$,

$G_j(d,b,\theta) \equiv g_j(d,b^0 + b^1\theta_1 + \cdots b^{n_\theta}\theta_{n_\theta},\theta)$,

$j = 1,\ldots,m+p$.

Алгоритм уточнения оценки критерия ДЭЗО (7) приведен в [21].

Рассмотренный выше подход к решению ОЭЗО и ДЭЗО использует предположение о статистической взаимной независимости неопределенных параметров [14, 15]. Однако, если параметры θ_i коррелируют между собой, использование задач (12) для ОЭЗО и (24) для ДЭЗО даст грубую оценку критериев задач. Рассмотрим способы решения задач, учитывающие статистическую зависимость между неопределенными параметрами, на примере ОЭЗО (2).

Подход 1. Мы предполагаем, что неопределенные параметры имеют совместное нормальное распределение с плотностью

$$\rho(\theta) = \frac{1}{(2\pi)^{n_\theta/2}(\det\Lambda)^{1/2}} \times \exp\left\{-\frac{1}{2}(\theta-\mu)^T\Lambda^{-1}(\theta-\mu)\right\}, \qquad (25)$$

где $\mu_i = E[\theta_i]$ – среднее значение параметра θ_i, σ_i – среднеквадратичное отклонение параметра θ_i, Λ – матрица вида $\Lambda = (\rho_{ij}\sigma_i\sigma_j)$, ρ_{ij} – коэффициент корреляции параметров θ_i и θ_j. То есть неопределенные параметры θ имеют распределение $N_n(\mu,\Lambda)$.

Известно, если случайные параметры θ имеют распределение $N_n(\mu,\Lambda)$, то случайные переменные y вида

$$y = (\theta-\mu)^T\Lambda^{-1}(\theta-\mu). \qquad (26)$$

имеют распределение χ^2 с n_θ степенями свободы [22]. Согласно определению функции распределения имеем

$$\Pr\{y \le C\} = \int_{-\infty}^{C} \rho(\theta)d\theta = \chi^2(C).$$

Для каждого α мы можем поставить в соответствие свое C, удовлетворяющее следующему условию

$\Pr\{y \le C\} = \alpha$.

Здесь C является некоторой функцией от α. Аналитический вид такой функции можно найти с помощью таблиц значений распределения χ^2 [22]. Итак, верно

$$\Pr\{(\theta-\mu)^T \Lambda^{-1}(\theta-\mu) \le C(\alpha)\} = \alpha, \quad (27)$$

и область T^α, вероятность попадания θ в которую равна α ($\alpha < 1$), удовлетворяет условию

$$T^\alpha = \{\theta : (\theta-\mu)^T \Lambda^{-1}(\theta-\mu) \le C(\alpha)\}. \quad (28)$$

Если задать $\alpha = \overline{\alpha} \equiv 1$, то область неопределенности T примет вид

$$T = \{\theta : (\theta-\mu)^T \Lambda^{-1}(\theta-\mu) \le C(\overline{\alpha})\}. \quad (29)$$

Если $\alpha = \alpha_j$, $0 < \alpha_j < 1$, тогда в качестве области $\overline{T}_{\alpha_j}$ (см. (10), (11)) на которой выполняется ограничение (3) можно использовать область

$$T_{\alpha_j} = \{\theta : (\theta-\mu)^T \Lambda^{-1}(\theta-\mu) \le C(\alpha_j)\}, \quad (30)$$

поскольку в этом случае, согласно (27), вероятностная мера области $\overline{T}_{\alpha_j}$ равна α_j и, соответственно, ограничение (11) выполняется. Границей области является $(\theta-\mu)^T \Lambda^{-1}(\theta-\mu) = C(\alpha_j)$ – гиперэллипсоид.

Тогда верхняя оценка ОЭЗО (2) примет вид

$$f_{1,1} = \min_{d,z \in H} E_{ap}[f(d,z,\theta)] \quad (31)$$

$$\max_{\theta \in T_{\alpha_j}} g_j(d,z,\theta) \le 0,\ j = 1,\dots,m, \quad (32)$$

$$\max_{\theta \in T} g_j(d,z,\theta) \le 0,\ j = m+1,\dots,m+p.$$

Мы получили задачу полубесконечного программирования с детерминированными ограничениями [17]. Для ее решения мы можем использовать первую итерацию алгоритма вычисления верхней оценки ОЭЗО (2) с независимыми параметрами θ [14].

Заметим, что в задаче (31) область T_{α_j} зафиксирована. К сожалению, мы не можем определить местоположение и форму областей T_{α_j} более точно, используя процедуру дробления, предложенную для случая независимых неопределенных параметров. Это невозможно из-за того, что после дробления мы не можем без вычисления многомерных интегралов определить левые части вероятностных ограничений (32). Однако, первая итерация решения задачи (31) дает некоторую оценку критерия задачи (2) за очень малое время.

Разработаем теперь подход, позволяющий уточнять получаемую оценку критерия задачи (2).

Подход 2. Известно, что случайные параметры θ_i, $i = 1,\dots,n_\theta$, могут быть представлены в виде следующего разложения [3]

$$\theta_i = a_i + c_{i1}\eta_1 + c_{i2}\eta_2 + \dots + c_{in_\theta}\eta_{n_\theta}, \quad (33)$$

$i = 1,\dots,n_\theta$,

где $a_i = E[\theta_i]$, случайные параметры η_i, $i = 1,\dots,n_\theta$, являются независимыми случайными параметрами, имеющими одномерное стандартное нормальное распределение $N_1(0,1)$, матрица $C = (c_{ij})$ удовлетворяет условиям

$$CC^T = \Lambda, \quad (34)$$

здесь матрица Λ – ковариационная матрица. Перепишем уравнение (33) в виде матричной записи

$$\theta = a + C\eta, \quad (35)$$

Мы можем рассматривать уравнение (35) как систему из n_θ^2 нелинейных уравнений с n_θ^2 неизвестными элементами c_{ij} матрицы C. Однако, число независимых уравнений в системе равно $0.5n_\theta^2$, поскольку матрицы Λ и CC^T симметричные. В общем, условию (34) удовлетворяет бесконечное число матриц C. Будем определять значения элементов матрицы из решения следующей задачи оптимизации

$$\min_{c_{ij}} \sum_{i,j=1}^{n_\theta} \left(\sum_{k=1}^{n_\theta} c_{ik}c_{kj} - \lambda_{ij} \right)^2,$$

где λ_{ij} – элементы матрицы ковариации Λ. Поскольку матрицы Λ и CC^T симметричные, задача может быть сведена к следующему виду

$$\min_{c_{ij}} \sum_{i=1}^{n_\theta} \sum_{j=i}^{n_\theta} \left(\sum_{k=1}^{n_\theta} c_{ik}c_{kj} - \lambda_{ij} \right)^2.$$

Сделаем замену параметров θ_i в задаче (2), используя соотношения (35). Тогда мы получим задачу

$$\min_{d,z \in H} E_\eta[F(d,z,\eta)] \quad (36)$$

$$\Pr\{G_j(d,z,\eta) \le 0\} \ge \alpha_j,\ j = 1,\dots,m,$$

$$\max_{\theta \in T} G_j(d,z,\eta) \le 0,\ j = m+1,\dots,m+p,$$

где $F(d,z,\eta) \equiv f(d,z,a + C\eta)$,

$G_j(d,z,\eta) \equiv g_j(d,z,a + C\eta)$, $j = 1,\dots,m+p$,

$T_\eta = \{\eta_i : -k_i \le \eta_i \le k_i, i = 1,\dots,n_\theta\}$.

Задача (36) имеет вид ОЭЗО (2) с независимыми неопределенными параметрами η_i, имеющими стандартное нормальное распределение $N_1(0,1)$. Для решения задачи (36) мы можем использовать алгоритм, разработанный для ОЭЗО (2) [14].

Подход 1 и Подход 2 без нарушения общности могут быть распространены на решение ДЭЗО (7) при использовании алгоритма [15].

Вычислительный эксперимент

Рассматривается задача проектирования системы реакторов, представленной на рисунке 1 [12]. В реакторах 1 и 2 протекают реакции превращения вещества A в вещество B и, далее, в вещество C. Математические модели реакторов имеет вид:

Реактор 1

$C_{A1}+k_1C_{A1}V_1=1$;

$C_{B1}+C_{A1}+k_3C_{B1}V_1=1$;

$k_1=k_{10}e^{-E_1/RT_1}$;

$k_3=k_{20}e^{-E_2/RT_1}$;

Реактор 2

$C_{A2}-C_{A1}+k_2C_{A2}V_2=0$;

$C_{B2}-C_{B1}+C_{A2}-C_{A1}+k_4C_{B2}V_2=0$;

$k_2=k_{10}e^{-E_1/RT_2}$;

$k_4=k_{20}e^{-E_2/RT_2}$.

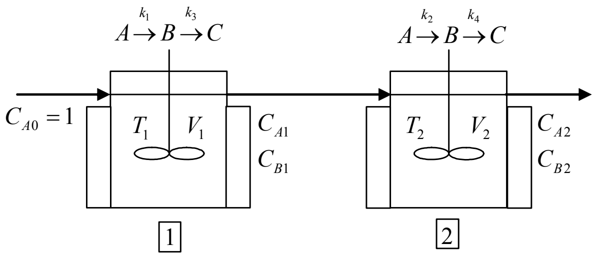

Рис. 1 - Система из двух реакторов

В качестве неопределенных параметров выбраны $\theta=\{E_1;E_2;k_{10};k_{20}\}$. Характеристики неопределенных параметров:

E_1: θ^N=6665,948; δ=200;

E_2: θ^N=7985,248; δ=240;

k_{10}: θ^N=0,715; δ=0,0215;

k_{20}: θ^N=0,182; δ=0,0055.

Неопределенные параметры предполагаются независимыми и подчиняющимися нормальному закону распределения. Область неопределенности имеет вид многомерного параллелепипеда $\{\theta^N-k\cdot\delta\le\theta\le\theta^N+k\cdot\delta\}$.

Целевая функция представляет собой капитальные затраты

$$f=\sqrt{V_1}+\sqrt{V_2}\,. \tag{37}$$

Ограничения задачи имеют вид:

$0\le C_{A1}\le 1$

$0\le C_{B1}\le 1$

$0\le C_{A2}\le 1$

$0\le C_{B2}\le 1$

$$C_{B2}\ge C_B^*\,. \tag{38}$$

Все ограничения, кроме (38) должны выполняться безусловно, ограничение (38) – с заданной вероятностью. В качестве поисковых переменных выбраны: конструктивные переменные d – объемы реакторов 1 и 2 – V_1, V_2; режимные переменные z – температуры в реакторах 1 и 2 – T_1, T_2. Диапазоны изменения поисковых переменных имеют следующий вид:

$0\le V_1\le 16$

$601{,}4\le T_1\le 661{,}53$

$0\le V_2\le 16$

$541{,}26\le T_2\le 601{,}4$.

Мы решили четыре задачи для этой ХТС. Без учета статистической зависимости неопределенных параметров были решены ДЭЗО (алгоритм см. в [15]) и ОЭЗО (алгоритм см. в [14]). При учете статистической зависимости задача решалась в постановке ОЭЗО на основе Подходов 1 и 2.

В таблице 1 приведены требуемое значение C_B^* концентрации целевого вещества B на выходе ХТС и значений вероятности выполнения ограничения (38), для которых решалась задача, а также полученные значения критерия f и затраченное на получение решения время t (индекс А соответствует решению авторов [12]; индексы О – ОЭЗО, Д – ДЭЗО при независимых параметрах).

В таблице 2 для тех же требований приведены результаты решения ОЭЗО при учете статистической зависимости между неопределенными параметрами (индексы: П1– подход 1, П2 – подход 2 для решения ОЭЗО с зависимыми параметрами).

Таблица 1 - Результаты решения задачи оптимизации, верхняя оценка

C_B^*	α	f_A	$f_О$	$t_О$	$f_Д$	$t_Д$
0,50	0,90	3,62	2,96	96,4	2,83	534
0,50	0,95	3,67	3,07	58,3	2,92	426
0,52	0,90	3,9	3,58	11248	3,56	2112
0,52	0,95	3,96	3,83	12224	3,80	1357

Анализируя полученные результаты, заметим, что без учета статистической зависимости неопределенных параметров полученное нами решение ОЭЗО, дает значение критерия, меньшее на 3-18%, чем в [12]. При этом решение ДЭЗО дает значение критерия в сравнении с ОЭЗО меньшее на 0,6-5%.

Таблица 2 - Результаты решения ОЭЗО, учет зависимости

C_B^*	α	$f_{П1}$	$t_{П1}$	$f_{П2}$	$t_{П2}$
0,50	0,90	2,83	0,2	2,74	849
0,50	0,95	2,86	0,3	2,80	266
0,52	0,90	3,51	0,3	3,16	126
0,52	0,95	3,74	0,3	3,2	460

Учет статистической зависимости неопределенных параметров при решении ОЭЗО на основе Подхода 2 дал значение критерия меньшее на 23-32%, чем в [12]. Отметим, что первая итерация алгоритма решения ОЭЗО [16] для Подхода 1 дала значение критерия меньшее на 5-28%, чем в [12] за очень малое время.

Заключение

В статье рассмотрены подходы к решению задач проектирования гибких ХТС, представленных в форме одно- и двухэтапных задач оптимизации с жесткими и вероятностными ограничениями. Сложность решения таких задач состоит в необходимости вычисления многомерных интегралов на каждой итерации метода при прямом решении задач.

Использование предложенных алгоритмов для решения одно- и двухэтапных задач оптимизации возможно как при взаимно независимых неопределенных параметрах, так и при статистической взаимной зависимости между неопределенными параметрами. Для решения задач в последнем случае предложены два подхода, сводящие исходные задачи к задачам детерминированного полубесконечного программирования, которые могут быть решены разработанными алгоритмами.

Представленные в статье результаты решения задачи проектирования оптимальной ХТС показывают эффективность разработанных подходов и алгоритмов в сравнении с опубликованными ранее решениями других авторов.

Литература

1 Т.В. Лаптева, Н.Н. Зиятдинов, Д.Д. Первухин. Вестник Казан. технол. ун-та, **11**, 268-271, (2012).
2 R.W.H. Sargent. Chem. Eng. Process. **63**, 9, (1967).
3 Г. Крамер. *Математические методы статистики*. М.: РХД, 2003.
4 Т.В. Лаптева, Н.Н. Зиятдинов, Д.Д. Первухин, Г.М. Островский. Вестник Казан. технол. ун-та, **7**, 218-224, (2011).
5 B.H. Carnahan, A. Luther, J.O. Wilkes. *Applied Numerical Methods*. Wiley, New York, 1969.
6 J. Acevedo, E.N. Pistikopoulos. Comput. Chem. Eng., **22**, 647–671, (1998).
7 F.P. Bernardo, E.N. Pistikopoulos, P.M. Saraiva. Ind. Eng. Chem. Res., **38**, 3056–3068, (1999).
8 F.P. Bernardo, P.M. Saraiva. AIChE J., **44**, 2007-2117, (1998).
9 U.M. Diwekar, J.R. Kalagnanam. AIChE J., **43**, 440-447, (1997).
10 P. Kall, S.W. Wallace. *Stochastic Programming*. Wiley, Chichester, 1994.
11 C.D. Maranas. AIChE J., **43**, 1250–1264, (1997).
12 M. Wendt, P. Li, G.Wozny. Ind. Eng. Chem. Res., **41**, 3621-3629, (2002).
13 Г.М. Островский, Н.Н. Зиятдинов, Т.В. Лаптева, Д.Д. Первухин. Докл. АН, **425**, 1, 63–66, (2009).
14 G.M.Ostrovsky, N.N. Ziyatdinov, T.V. Lapteva. Chem. Eng. Sci., **65**, 2373–2381, (2010).
15 G.M.Ostrovsky, N.N. Ziyatdinov, T.V. Lapteva, I.V. Zaitsev. Chem. Eng. Sci., **66**, 3815-3828, (2011).
16 Т.В. Лаптева, Н.Н. Зиятдинов, Д.Д. Первухин, Г.М. Островский. Вестник Казан. технол. ун-та, **14**, 9, 281-287, (2011).
17 Т.В. Лаптева, Н.Н. Зиятдинов, И.В. Зайцев. Вестник Казан. технол. ун-та, **15**, 24, 139-146, (2012).
18 Т.В. Лаптева, Н.Н. Зиятдинов, Д.Д. Первухин. Вестник Казан. технол. ун-та, **15**, 12, 216-219, (2012).
19 Н.Н. Зиятдинов, И.В. Зайцев, Т.В. Лаптева. Вестник Казан. технол. ун-та, **15**, 16, 247-250, (2012).
20 Т.В. Лаптева, Н.Н. Зиятдинов, Г.М. Островский, И.В. Зайцев. Докл. АН, **435**, 4, 497-500, (2010).
21 И.В. Зайцев, Т.В. Лаптева, Н.Н. Зиятдинов. Вестник Казан. технол. ун-та, **16**, 1, 251-256, (2013).
22 Й. Бард. *Нелинейное оценивание параметров*. М.: Статистика, 1979.

© **Т. В. Лаптева -** к.т.н., доц. каф. системотехники КНИТУ, tanlapteva@yandex.ru; **Н. Н. Зиятдинов -** д.т.н., проф., зав. каф. системотехники КНИТУ, nnziat@yandex.ru; **Г. М. Островский -** д.т.н., проф. той же кафедры, ostralex@yandex.ru; **И. В. Зайцев –** асс. той же кафедры, izaytsev.systech@gmail.com.