

SECTION 2. Applied mathematics. Mathematical modeling.

Akimov Andrey Anatolievich

BASHKIR STATE UNIVERSITY Sterlitamak branch
candidat of physical and mathematical sciences, lecturer

**SENSIVITY ANALYSIS OF THE PROBLEM OF OPTIMAL CONTROL FOR
VARIATIONS IN THE INITIAL DATA**

In this paper discuss problem of the accuracy of determination of kinetic constants in the studied chemical system. An algorithm study on warranty theoretical prediction stage optimization under uncertainty of kinetic constants and construct the corresponding change estimates of optimal solutions.

Keywords: optimal control, kinetic constant, interval solution, control of chemical processes.

**АНАЛИЗ ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ ОПТИМАЛЬНОГО
УПРАВЛЕНИЯ К ВАРИАЦИИ НАЧАЛЬНЫХ ДАННЫХ**

В статье рассматривается проблема точности определения кинетических констант в изучаемой химической системе. Описывается алгоритм исследования по гарантированности прогноза этапа теоретической оптимизации в условиях неопределенности кинетических констант и построения соответствующих оценок изменения оптимальных решений

Ключевые слова: оптимальное управление, кинетические константы, интервальное решение, управление химическим процессом.

Практически все эмпирические константы определяются на основе полученной совокупности экспериментальных данных. Способы получения такой информации достаточно разнообразны. Это и непосредственное измерение [1], анализ литературных данных [2, с.38] и обработка результатов косвенных измерений. Всем им присуща определённая ошибка измерения. Причины могут быть как благоприобретённого порядка: погрешность аппаратуры, использование знаний округлённых параметров, так и наследственного типа: ошибки, определяемые методикой расчёта (например, при численном или дифференциальном интегрировании); погрешность, определённая выходом за пределы применимости эмпирических зависимостей (например, уравнения Менделеева-Клайперона в предположении идеальности газа). Поэтому, вообще говоря, на практике имеем дело не с цифрами, а с некоторыми интервалами. Отсюда возникает необходимость и актуальность проведения исследований по гарантированности прогноза этапа теоретической оптимизации в условиях неопределенности кинетических констант, построения соответствующих оценок изменения оптимальных решений [3, с.749].

Анализ надежности используемых кинетических констант с точки зрения технологических расчетов необходимо проводить в два этапа:

1. Исследование области неопределенности с позиций качественной неизменности оптимального режима, выработка требований к предварительным исследованиям кинетики и термодинамики изучаемой химической системы,
2. Количественная оценка границ изменения оптимальных условий, в частности, температурных, при заданном изменении параметров математической модели.

Так, например, практический смысл решения задачи оптимального управления химическим процессом состоит в том, что оптимальный температурный режим (ОТР) является одним из определяющих факторов для выбора типа химического аппарата. Если ОТР – константа, то изотермический тип реактора предпочтительнее остальных в смысле заданного в задаче критерия. Другой случай – ОТР отличен от константы – обеспечивает политропический тип реактора. Поэтому грубость определения констант может быть настолько великой, что нельзя будет ничего сказать даже о качестве ОТР. С другой стороны, достаточно грубые оценки позволяют остановиться на конкретном типе реактора. В каких ситуациях необходимо измерять точнее, а каких приближенно, поможет разобраться разработанная методика исследований.

Рассмотрим нестационарный процесс. Для дальнейшей конкретизации необходимо определить множество A , на котором вводится отношение эквивалентности; множество B , являющееся объектом исследования качественного типа; отражение φ , порождающее задачу интервального анализа.

Множеством A в данном случае является пространство $L[t_0, t_k]$. Множество B – множество возможных значений кинетических констант R_+^n , где n – число анализируемых констант. Отображением в данном случае является отображение, порождаемое этапом теоретической оптимизации:

$$OT : R_+^n \rightarrow L[t_0, t_k].$$

В большинстве рассматриваемых случаев ответом теоретической оптимизации является функция двух типов: кусочно-постоянная и неудовлетворяющая признаку кусочного постоянства – равенства нулю производной в точках ее существования, т.е.

$$\forall OTP = T(t) \quad \exists \{t_1, \dots, t_N\} : T'(t) \in C([t_0, t_k] \setminus \{t_1, \dots, t_N\}).$$

Введем следующее отношение эквивалентности:

$$T_1(t) \sim T_2(t) \Leftrightarrow \text{sign} \left(\max_{U_1} \left(\frac{dT_1}{dt} \right) \right) = \text{sign} \left(\max_{U_2} \left(\frac{dT_2}{dt} \right) \right), \quad (1)$$

где $U_1 \in R$ – множество, на котором определена производная T_1' , $U_2 \in R$ – множество, на котором определена производная T_2' . Будем полагать, что отношение эквивалентности определено на всем множестве оптимальных режимов, соответствующих положительным наборам кинетических констант. Отношение (1), определенное на множестве $OT(R_+^n)$, есть отношение эквивалентности [7, с.45]. Остановимся подробнее, что означает введенное отношение эквивалентности, и какие качественные различия в температурной стратегии выделяются подобным введением.

При выборе варианта аппаратного решения необходимо остановиться на определенном типе реактора, реализующего либо изотермический вид работы, либо предусматривающего возможность управления температурой. Значение отношения эквивалентности для первого типа оптимального режима в силу кусочного постоянства:

$\text{sign} \left(\max_U \left(\frac{dT}{dt} \right) \right) = 0$. В тех случаях, когда ОТР отличен от изотермического:

$$\exists t^* : \max_U \left| \frac{dT}{dt} \right| > \left| \frac{dT}{dt} \right|_{t=t^*} > 0 \Rightarrow \text{sign} \left(\frac{dT}{dt} \right) = 1.$$

Следовательно, введенное отношение эквивалентности (1) позволяет отличить один тип оптимального режима от другого. Формализация этих качественных признаков необходима в решении задач анализа на качественную неизменность. Конкретизируем эти понятия на случай кинетики.

Множество B будем называть множеством гарантированного качества, а образ $\varphi(B)$ качественно неизменным, если $\exists i : \varphi(B) \subset A_i$, где A_i – некоторый класс

эквивалентности, порожденный отношением эквивалентности (1). Отношение (1) порождает два класса эквивалентности:

$$A_1 = \left\{ T(t, E, k^0) \left| \text{sign} \left(\max_U \left(\frac{dT}{dt} \right) \right) = 0 \right. \right\},$$

$$A_2 = \left\{ T(t, E, k^0) \left| \text{sign} \left(\max_U \left(\frac{dT}{dt} \right) \right) \neq 0 \right. \right\}.$$

Смысл технологической интерпретации в рассматриваемом случае: множество гарантированного качества есть интервалы констант, позволяющие однозначно выбрать тип реактора по температуре. Утверждение, что ОТР качественно неизменный означает, что при всех значениях констант, взятых из интервала их изменения, ОТР будет иметь одну и ту же структуру.

Следующим этапом решения задачи по исследованию неопределенности является этап количественного анализа. Пусть исследуемая задача теоретической оптимизации – поиск оптимального температурного режима находится в условиях неопределенности. Это условие порождает неопределенность в ОТР:

$$T_*(t) \leq T(t) \leq T^*(t),$$

$$\text{где } T_* = \inf_{E^l, (k^0)^l} OT(E, k^0, t), \quad T^* = \sup_{E^l, (k^0)^l} OT(E, k^0, t),$$

Отметим, что в силу ограниченности оптимального режима сверху и снизу, *inf* и *sup* существуют. Однако их поиск достаточно трудоемок. Нецелесообразность поиска этих значений объясняется еще и тем, что получаемые температурные профили сами по себе конкретную аппаратную реализацию не определяют. Поэтому, нужен ли ответ исследователю – экспериментатору или технологу – вопрос неясный. Более того, устраивает ответ достаточно грубый по отношению к точному, но приемлемый для понимания конструктивной реализации. Исходя из этих соображений, следует искать некоторую интервальную функцию F , обладающую следующим свойством:

$$[T_*, T^*] \subset F(t, E, k^0) \subset [T_{min}, T_{max}]$$

Подобная функция называется интервальным решением задачи теоретической оптимизации и является решением количественного этапа анализа неопределенности.

Разработанная методика была применена на таких химических процессах как окисление двуокиси серы на платиновом катализаторе в нестационарных условиях [4 с.647], [5, с.21] и пассивации никелевых катализаторов [6, с.64]. Анализ средних значений кинетических констант скоростей стадий реакций позволил уточнить оптимальные условия ведения процессов и сформулировать требования к точности их определения [7 с. 45].

Литература

1. Трухаев Р.И. Модели принятия решений в условиях неопределенности. М.:Наука.1981. 352с.
2. Байтимерова А.И., Мустафина С.А., Спивак С.И. Поиск оптимального управления в каскаде реакторов для процессов с переменным реакционным объемом // Системы управления и информационные технологии. 2008. № 2 (32). С. 38-42.
3. Мустафина С.А., Валиева Ю.А., Давлетшин Р.С., Балаев А.В., Спивак С.И. Оптимальные технологические решения для каталитических процессов и реакторов // Кинетика и катализ. 2005. Т. 46. № 5. С. 749-756.
4. Мустафина С.А. , Давлетшин Р.С., Балаев А.В., Спивак С.И., Джемилев У.М. Моделирование процесса газожидкостного гидрирования α -пинена в трубчатых реакторах // Доклады Академии наук, 2006, Т.406, №5, С.647-650

5. Иремадзе Э.О., Мустафина С.А., Спивак С.И. Неопределенность в кинетических константах и расчет оптимальной температуры // Математическое моделирование. 2000. Т. 12. № 3. С. 21.
6. Мустафина С.А., Спивак С.И. Расчет оптимальной температуры в условиях неопределенности по кинетическим константам // Башкирский химический журнал. 1999. Т. 6. № 1. С. 64.
7. Вайтиев В.А., Мустафина С.А. Численное исследование процессов с постоянным и переменным реакционным объемом в условиях неопределенности кинетических данных. // Башкирский химический журнал. 2013. Т. 20. № 2. С. 45-48.