УДК 517.977+644.4

ЧИСЛЕННЫЙ АЛГОРИТМ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ ОПТИМАЛЬНОГО УПРАВЛЕНИЯ С ТЕРМИНАЛЬНЫМИ ОГРАНИЧЕНИЯМИ ДЛЯ ДИНАМИЧЕСКИХ СИСТЕМ

© Е. В. Антипина, С. И. Мустафина, А. Ф. Антипин, С. А. Мустафина

Башкирский государственный университет,
450075, Республика Башкортостан, г. Уфа, ул. Заки Валиди, 32
E-mail: stepashinaev@ya.ru

Разработан алгоритм решения задачи оптимального управления с терминальными ограничениями. Приведена постановка задачи оптимального управления с терминальными ограничениями и ограничениями на параметр управления. Описан численный алгоритм решения поставленной задачи на основе метода штрафов и генетических алгоритмов. Проведён вычислительный эксперимент для реакции получения фталевого ангидрида в целях достижения максимального выхода продукта реакции при наличии терминальных ограничений. Получены оптимальный температурный режим и оптимальные концентрации реагентов.

Ключевые слова: задача оптимального управления, терминальные ограничения, метод штрафов, генетические алгоритмы, реакция получения фталевого ангидрида.

DOI: 10.15372/AUT20200615

Введение. В настоящее время среди задач математического моделирования динамических систем наибольший практический интерес представляют задачи оптимального управления, в которых ограничения могут быть наложены не только на управляющие параметры, но и на фазовые переменные. Если ограничения на фазовые переменные заданы в конечный момент времени функционирования системы, то такая задача является задачей с терминальными ограничениями. К ним относятся задачи перевода управляемой системы из начальной точки в конечную, краевые экстремальные задачи и т. д. Помимо этого, к задачам оптимального управления с терминальными ограничениями могут быть сведены задачи с фазовыми ограничениями путём применения математических редукций [1]. Наличие ограничений на фазовые переменные усложняет решение оптимальных задач как в теоретическом исследовании свойств оптимальных процессов, так и в реализации алгоритмов численного решения. Поэтому разработка методов и алгоритмов решения данной задачи является актуальной проблемой и представляет научный и практический интересы.

Один из подходов к решению данного класса задач заключается в получении точных необходимых условий оптимальности и построении на их основе вычислительных процедур [2, 3]. Однако такие вычислительные процедуры достаточно трудоёмки и трудноприменимы [4].

Другой подход предполагает сведение задачи с ограничениями на фазовые переменные к задаче без ограничений с помощью применения метода штрафов [5]. В данном методе вводится в рассмотрение вспомогательная функция путём добавления к критерию качества управления исходной задачи штрафа за нарушение ограничений, накладываемых на фазовые переменные. Затем решается задача оптимального управления без ограничений, где критерием качества управления выступает построенная вспомогательная функция.

Большинство численных методов решения оптимизационных задач сталкивается с рядом трудностей, связанных с нелинейностью моделей, описывающих динамические процессы большой размерности решаемых задач. Так, нелинейность не позволяет использовать методы линейного программирования [6]. Наличие ограничений на управление и фазовые переменные затрудняет применение методов вариационного исчисления [7]. Большая размерность задач из-за больших вычислительных затрат осложняет использование динамического программирования [8]. Для применения принципа максимума необходима дополнительная проверка найденного решения на оптимальность [9]. Кроме того, решения задач оптимального управления, полученных с помощью большинства численных методов, отталкиваются от начальной точки поиска решения, что, в свою очередь, требует от исследователя знания некоторого приближения этой начальной точки хотя бы из физических соображений поставленной задачи.

В настоящее время при решении задач моделирования и оптимизации динамических процессов всё большую популярность приобретают генетические алгоритмы [10, 11]. Они позволяют преодолеть трудности, возникающие при решении задач оптимального управления. В процессе работы генетических алгоритмов параллельно обрабатывается множество альтернативных решений, при этом поиск концентрируется на наиболее перспективных из них. Генетические алгоритмы позволяют решать задачи оптимизации многопараметрических многоэкстремальных функций, в том числе и для нелинейных целевых функций. Генетические алгоритмы являются прямым методом оптимизации, т. е. для их работы не требуется вычисления производной целевой функции. Важные достоинства генетических алгоритмов — независимость найденного решения от начального приближения, а также отсутствие требования на непрерывность целевой функции и её производных [12, 13]. При этом генетические алгоритмы можно легко модифицировать с изменением количества фазовых переменных, что позволяет их применять и легко настраивать при решении оптимизационных задач для различных процессов.

Постановка задачи. Сформулируем задачу оптимального управления динамическим процессом с терминальными ограничениями. Пусть управляемый процесс определён на интервале $[0, t_1]$ системой дифференциальных уравнений [1]

$$\frac{dx}{dt} = f(x(t), u(t), t) \tag{1}$$

с начальными условиями

$$x(0) = x^0, \tag{2}$$

где $x(t) = (x_1(t), x_2(t), \ldots, x_n(t))^\top$ — вектор фазовых переменных; $u(t) = (u_1(t), u_2(t), \ldots, u_r(t))^\top \in U$ — вектор управляющих функций; U — множество допустимых значений управления; t — независимая переменная; $f(x(t), u(t), t) = (f_1(x(t), u(t), t), f_2(x(t), u(t), t), \ldots, f_n(x(t), u(t), t))^\top$ — непрерывная вместе со своими частными производными вектор-функция. Пусть t — время, тогда промежуток $[0, t_1]$ — время функционирования системы. Начальный фазовый вектор $x(0) = x^0$ задан.

Пусть на фазовые переменные наложены ограничения

$$Q_i(u) = g_i(x(t_1)) = 0, \quad i = \overline{1, l}; \qquad Q_i(u) = g_i(x(t_1)) \leqslant 0, \quad i = \overline{l+1, m}, \tag{3}$$

где $g_i(t)$ — непрерывно-дифференцируемые функции по всем аргументам.

Введём критерий оптимальности

$$Q_0(u) = g_0(x(t_1)). \tag{4}$$

Требуется на интервале $[0, t_1]$ найти вектор управления $u^*(t)$ из множества допустимых управлений U такой, что для $u^*(t)$ и соответствующих решений системы (1) $x(t)$ выполнены условия (3), и критерий оптимальности (4) принимает минимальное значение.

Задача поиска максимума сводится к задаче поиска минимума путём замены знака на противоположный перед функцией:

$$Q_0(u^*) = \max_{u \in U} g_0(x(t_1)) = -\min_{u \in U}[-g_0(x(t_1))].$$

Алгоритм решения задачи оптимального управления с терминальными ограничениями. Сформулируем комбинированный алгоритм решения задачи оптимального управления с терминальными ограничениями на основе метода штрафов и генетических алгоритмов.

Основная идея метода штрафов заключается в замене задачи с ограничениями задачей без ограничений, последовательность решений которой даёт решение исходной задачи.

Рассмотрим вспомогательную функцию [14]

$$Q(u) = Q_0(u) + S(u, z^k) \to \min, \tag{5}$$

где $S(u, z^k)$ — штрафная функция, z^k — параметр штрафа, определяемый на k-й итерации (чем больше z^k, тем больше штраф за невыполнение ограничений). Штрафная функция $S(u, z^k)$ определяется равной нулю при выполнении ограничений и больше нуля, если ограничения нарушаются:

$$S(u, z^k) = \frac{z^k}{2} \sum_{i=1}^{m} H_i^2(u),$$

где

$$H_i(u) = \begin{cases} |g_i(x(t_1))|, & i = \overline{1, l}, \\ \max\{0, g_i(x(t_1))\}, & i = \overline{l+1, m}. \end{cases}$$

На каждой k-й итерации с помощью генетических алгоритмов определяется вектор $u^*(t)$, обеспечивающий минимум критерия оптимальности (5) при заданном z^k. Найденный вектор $u^*(t)$ используется в качестве начального на следующей итерации для увеличенного значения параметра штрафа z^k.

Основная идея генетических алгоритмов состоит в имитации эволюционных процессов живых организмов: наиболее приспособленные особи переходят в следующее поколение, сохраняя при этом лучшие свойства родителей и приобретая новые полезные свойства под действием изменяющихся условий среды.

Работа генетического алгоритма заключается в последовательной смене набора векторов, называемого популяцией. Каждый вектор представляет собой аналог особи (хромосомы) в популяции и состоит из набора числовых значений, которые называются генами, или признаками [15, 16]. Из популяции по определённому правилу выбираются две особи (оператором селекции), которые скрещиваются между собой, т. е. генерируется новый вектор-особь, который в дальнейшем подвергается действию оператора мутации, в результате чего изменяются один или несколько генов (значений координат вектора). В новое поколение переходят самые приспособленные особи из текущей популяции. Приспособленность особи определяется путём вычисления функции приспособленности, в качестве которой выступает критерий оптимальности. Данная процедура смены поколений популяции продолжается до тех пор, пока не будет достигнут критерий окончания поиска [17, 18].

В качестве особей живых организмов будем рассматривать вектор управляющих функций

$$u(t) = \begin{pmatrix} u_1(t) \\ u_2(t) \\ \vdots \\ u_r(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{11} & \dots & u_{1N} \\ u_{21} & \dots & u_{2N} \\ \vdots & \dots & \vdots \\ u_{r1} & \dots & u_{rN} \end{pmatrix},$$

в качестве популяции особей — набор векторов $u_j(t) = (u_{j1}(t), u_{j2}(t), \dots, u_{jr}(t))^\top$, где $j = \overline{1, R_p}$, R_p — размер популяции. Координаты вектора $u_j(t)$ называются генами. Приспособленность особей будем определять путём вычисления критерия оптимальности (5).

Тогда алгоритм решения задачи оптимального управления с терминальными ограничениями будет состоять из следующих шагов.

Шаг 1. Задать начальные параметры алгоритма: N — количество точек разбиения временно́го интервала $[0, t_1]$, R_p — размер популяции, Max_P — максимальное число популяций, номер текущей итерации генетического алгоритма $q = 0$, начальное значение параметра штрафа z^0 ($z^0 = 0{,}01; 0{,}1; 1$) [13], константу $G \in [4, 10]$ для увеличения параметра штрафа, номер текущей итерации алгоритма метода штрафов $k = 0$, параметр $\varepsilon > 0$ для окончания работы алгоритма.

Случайным образом задать начальную популяцию $u_j^0(t) = (u_{j1}^0(t), u_{j2}^0(t), \dots, u_{jr}^0(t))^\top$ на множестве допустимых значений управления U, для каждой особи определить приспособленность. Для этого необходимо найти численное решение системы дифференциальных уравнений (1) с начальными условиями (2).

Шаг 2. Селекция — выбор пары особей из текущей популяции для последующего скрещивания.

Оператор селекции «турнирный отбор» выполняет два турнира. Первый турнир представляет собой случайный выбор двух особей из популяции. На втором турнире выбирается случайным образом особь из двух особей, отобранных на первом турнире.

Оператор селекции «панмиксия» осуществляет случайный равновероятностный отбор.

Оператор селекции «рулетка» отбирает две особи с наилучшим значением функции приспособленности. Для задачи на минимум таким наилучшим значением является минимальное значение критерия оптимальности (5). Для каждой особи вычисляется вероятность отбора по формуле

$$p(u_i^q) = Q(u_i^q) \Big/ \sum_{j=1}^{R_p} Q(u_j^q), \qquad i = \overline{1, R_p}.$$

Выбираются две особи с наибольшими значениями вероятностей $a = u_l^q$ и $b = u_r^q$, где l и r — номера особей с наибольшими значениями вероятностей отбора.

Шаг 3. Скрещивание — генерирование особей-потомков $c = (c_1, c_2, \dots, c_r)^\top$ и $d = (d_1, d_2, \dots, d_r)^\top$ из родительской пары.

Арифметический кроссовер генерирует потомков по правилу

$$c_i = \lambda a_i + (1 - \lambda) b_i, \qquad d_i = \lambda b_i + (1 - \lambda) a_i,$$

где λ — случайное число из диапазона $(0, 1)$, $i = \overline{1, r}$.

Простейший кроссовер создаёт потомков по правилу

$$c = (a_1, \dots, a_s, b_{s+1}, \dots, b_r)^\top, \qquad d = (b_1, \dots, b_s, a_{s+1}, \dots, a_r)^\top,$$

где s — случайное число из диапазона $[1, r - 1]$.

Шаг 4. Мутация — преобразование генов-потомков в целях предотвращения попадания популяции в локальный экстремум.

Случайная мутация преобразует случайно выбранный ген каждого из потомков c, d путём замены случайным значением из области допустимых значений.

Шаг 5. Обновление популяции и проверка условия окончания работы алгоритма.

Из потомков, подвергшихся действию оператора мутации, случайно выберем один и поместим в текущую популяцию вместо особи с наихудшим значением функции приспособленности. Если $q \leqslant \mathrm{Max\_}P$, то $q = q+1$, и перейти к шагу 2, иначе выбрать из последней популяции особь с наилучшим значением функции приспособленности $u^*(t)$.

Шаг 6. Проверка условия окончания поиска.

Если $S(u^*(t), z^k) > \varepsilon$, то $z^{k+1} = Gz^k$, $u_j^0(t) = u^*(t)$, $j = \overline{1, R_p}$, $q = 0$, $k = k+1$, перейти на шаг 2.

Если $S(u^*(t), z^k) \leqslant \varepsilon$, то остановить поиск. Решением задачи оптимального управления будет последняя наилучшая особь $u^*(t)$.

Вычислительный эксперимент. С помощью разработанного алгоритма решим задачу оптимального управления для промышленно значимой реакции получения фталевого ангидрида.

Фталевый ангидрид является одним из важнейших видов сырья для производства пластификаторов, лакокрасочных изделий, лекарственных препаратов, красителей, присадок к смазочным маслам, ускорителей вулканизации каучука, добавок к реактивным топливам, инсектицидов [19]. Схема химической реакции получения фталевого ангидрида представляет собой совокупность стадий:

$$X_1 \to X_2, \quad X_2 \to X_4, \quad X_1 \to X_3, \quad X_1 \to X_4, \quad X_2 \to X_3, \quad X_3 \to X_5, \tag{6}$$

где обозначения X_1 — нафталин, X_2 — нафтохинон, X_3 — фталевый ангидрид, X_4 — углекислый газ, X_5 — малеиновый ангидрид.

Динамику концентраций веществ данной реакции можно описать системой обыкновенных дифференциальных уравнений, составленной по закону действующих масс [13]:

$$\begin{gathered}
\frac{dx_1}{dt} = -k_1x_1 - k_3x_1 - k_4x_1; \quad \frac{dx_2}{dt} = k_1x_1 - k_2x_2 - k_5x_2; \\
\frac{dx_3}{dt} = k_3x_1 + k_5x_2 - k_6x_3; \quad \frac{dx_4}{dt} = k_2x_2 + k_4x_1; \quad \frac{dx_5}{dt} = k_6x_3,
\end{gathered} \tag{7}$$

где x_i — концентрация i-го вещества $(i = \overline{1,5}\,)$ (мольная доля), t — время, k_j — константа скорости j-й стадии реакции $(j = \overline{1,6}\,)$ (1/ч), зависящая от температуры T согласно уравнению Аррениуса:

$$k_j(T) = k_{0j}\mathbf{e}^{-E_j/(RT)},$$

где k_{0j} — предэкспоненциальный множитель (1/ч), E_j — значение энергии активации j-й стадии (Дж/моль), R — универсальная газовая постоянная (8,31 Дж/(моль · K)).

В системе дифференциальных уравнений (7) переменные x_i $(i = \overline{1,5}\,)$ (концентрации веществ) являются переменными состояния, T — абсолютная температура управляющей переменной. На основании технологических соображений на выбор оптимального значения температуры наложены ограничения:

$$620 \text{ K} \leqslant T \leqslant 644 \text{ K}. \tag{8}$$

В реакции (6) исходное вещество — нафталин (X_1). Целевым продуктом реакции является фталевый ангидрид (X_3), побочными продуктами реакции — углекислый газ (X_4) и малеиновый ангидрид (X_5). Поэтому сформулируем задачу поиска оптимального температурного режима химической реакции (6) в целях получения максимального значения целевого продукта реакции с ограничениями на значения концентраций побочных продуктов и конверсию исходного вещества.

Пусть значения концентраций побочных продуктов в конце реакции не превышают 20 %:

$$x_4(t_1) + x_5(t_1) < 0{,}2. \tag{9}$$

Потребуем, чтобы конверсия исходного вещества в конце реакции составила 99 %:

$$1 - x_1(t_1) = 0{,}99. \tag{10}$$

Определим оптимальный температурный режим $T(t)$ реакции (6) с учётом ограничений на управление (8) и терминальных ограничений (9), (10) для получения максимального значения продукта реакции — фталевого ангидрида:

$$x_3(t_1) \to \max .$$

Начальные концентрации веществ заданы значениями

$$x_1(0) = 1, \qquad x_i(0) = 0, \quad i = \overline{1,5}. \tag{11}$$

Для автоматизации поиска решения поставленной задачи в среде визуального программирования Delphi разработана программа на основе алгоритма решения задачи оптимального управления с терминальными ограничениями. Программа позволяет осуществлять ввод пользователем параметров процесса получения фталевого ангидрида и параметров генетического алгоритма.

Численные значения кинетических параметров реакции получения фталевого ангидрида представлены в [19]. Время протекания реакции $t_1 = 0{,}8$ ч. Для численного решения системы дифференциальных уравнений (7) с начальными условиями (11) применялся метод Рунге — Кутты 4-го порядка.

Параметры генетического алгоритма для поиска безусловного экстремума: количество особей в популяции — 60, количество популяций — 3000, оператор селекции — турнирный отбор, оператор скрещивания — арифметический кроссовер, оператор мутации — случайная мутация.

Решение получено при следующих параметрах алгоритма метода штрафов: начальное значение параметра штрафа $z^k = 0{,}01$, константа увеличения параметра штрафа $G = 10$, параметр для окончания поиска решения $\varepsilon = 0{,}01$.

В результате вычислительного эксперимента установлено, что для получения максимального значения фталевого ангидрида необходимо поддерживать постоянную температуру 620 К. На рис. 1, 2 представлена динамика концентраций реагентов, соответствующая оптимальному температурному режиму. Максимальная концентрация продукта реакции X_3 в конце реакции составит 0,716 мольных долей, конверсия исходного вещества — 98,9 %, выход побочных продуктов — 19,4 %.

В табл. 1 приведено решение системы дифференциальных уравнений (7) с начальными условиями (11) при некоторых значениях допустимой температуры. Как видно из таблицы, решение задачи оптимального управления, полученное с помощью разработанного алгоритма, удовлетворяет ограничениям задачи и обеспечивает наибольший выход продукта реакции.

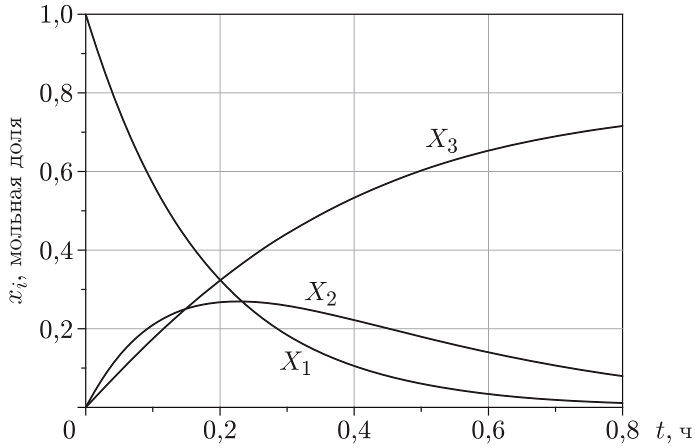

Рис. 1. Динамика оптимальных концентраций веществ реакции получения фталевого ангидрида (X_1 — нафталин, X_2 — нафтохинон, X_3 — фталевый ангидрид)

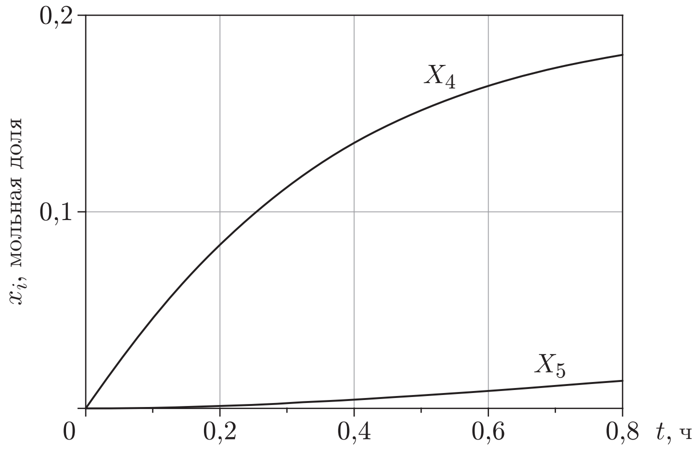

Рис. 2. Динамика оптимальных веществ реакции получения фталевого ангидрида (X_4 — углекислый газ, X_5 — малеиновый ангидрид)

Таблица 1

№	T, K	$1 - x_1(t_1)$, мол. доля	$x_4(t_1) + x_5(t_1)$, мол. доля	$x_3(t_1)$, мол. доля
1	620	0,989	0,194	0,716
2	630	0,996	0,230	0,715
3	635	0,998	0,237	0,713
4	640	0,999	0,247	0,712
5	644	0,999	0,262	0,707

Заключение. Разработанный алгоритм решения задачи оптимального управления с терминальными ограничениями позволяет находить численное решение за приемлемое время независимо от выбора начального приближения. Поскольку в основе пошаговых действий заложен принцип работы генетического алгоритма, то такой алгоритм позволяет преодолеть ряд трудностей, возникающих при решении оптимизационных задач, таких как нелинейность математического описания процессов, большая размерность задачи, требования непрерывности целевой функции и её производных.

С помощью программы, реализующей представленный в данной работе алгоритм, проведён вычислительный эксперимент для реакции получения фталевого ангидрида. Определён оптимальный температурный режим, который обеспечивает максимальное значение продукта реакции (фталевого ангидрида) в конечный момент времени при заданных ограничениях. Рассчитаны оптимальные концентрации реагентов. Показано, что концентрация фталевого ангидрида, вычисленная при оптимальном температурном режиме, превосходит значения концентраций, вычисленных при других значениях температуры, при этом выполняются ограничения фазовых переменных в конечный момент времени. Разработанный алгоритм можно применить к задачам поиска оптимального управления с терминальными ограничениями и для других процессов, которые описываются нелинейными системами дифференциальных уравнений.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Горнов А. Ю.** Алгоритмы решения задач оптимального управления с терминальными ограничениями // Вычислительные технологии. 2008. **13**, № 4. С. 44–50.
2. **Понтрягин Л. С., Болтянский В. Г., Гамкрелидзе Р. В., Мищенко Е. Ф.** Математическая теория оптимальных процессов. М.: Химия, 1976. 392 с.
3. **Дикусар В. В., Милютин А. А.** Качественные и численные методы в принципе максимума. М.: Наука, 1989. 144 с.
4. **Рапопорт Э. Я., Плешивцева Ю. Э.** Оптимальное управление нелинейными объектами технологической теплофизики // Автометрия. 2012. **48**, № 5. С. 3–12.
5. **Васильев Ф. И.** Численные методы решения экстремальных задач: Учеб. пособие для вузов. М.: Наука, 1988. 552 с.
6. **Островский Г. М., Зиятдинов Н. Н., Емельянов И. И.** Синтез оптимальных систем простых ректификационных колонн с рекуперацией тепла // ДАН. 2015. **461**, № 2. С. 189–192.
7. **Ванько В. И., Ермошина О. В., Кувыркин Г. Н.** Вариационное исчисление и оптимальное управление: Учеб. для вузов. М.: Изд-во МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2006. 488 с.
8. **Biegler L. T.** Integrated optimization strategies for dynamic process operations // Theoretical Found. Chem. Eng. 2017. **51**, N 6. P. 910–927.
9. **Антипин А. Ф.** Об ускорении отклика систем управления реального времени на базе многомерных интервально-логических регуляторов // Автоматика и телемеханика. 2015. Вып. 3. С. 135–143.
10. **Седова Н. А.** Нечёткая продукционная модель первичной оценки опасности столкновения судов // Мир транспорта. 2015. **13**, № 2. С. 200–206.
11. **Wright A.** Genetic algorithms for real parameter optimization // Found. Genetic Algorithms. 1991. **1**. P. 205–218.
12. **Пантелеев А. В., Скавинская Д. В.** Метаэвристические алгоритмы глобальной оптимизации. М.: Вузовская книга, 2019. 332 с.
13. **Антипина Е. В., Антипин А. Ф.** Алгоритм расчёта оптимальных начальных концентраций веществ химических реакций // Вестн. Технологического университета. 2017. **20**, № 13. С. 84–87.

14. **Пантелеев А. В., Летова Т. А.** Методы оптимизации в примерах и задачах: Учеб. пособие. М.: Высшая школа, 2005. 544 с.
15. **Климко Е. Г.** Генетический алгоритм как разновидность эволюционного алгоритма // Радиоэлектроника и информатика. 2002. № 2. С. 125–128.
16. **Андреев А. А.** Применение генетических алгоритмов при оптимизации нелинейных функций // Вестн. российских университетов. Математика. 2009. **14**, № 5. С. 1036–1040.
17. **Авдеев А. А.** Применение генетических алгоритмов к задачам оптимизации // Доклады Томского государственного университета систем управления и радиоэлектроники. 2008. № 2 (18). Ч. 1. С. 110–111.
18. **Катаев М. Ю., Лавыгина А. В., Ходашинский И. А., Эпштейн Д. А.** Нечёткий аппроксиматор атмосферных температурных полей // Автометрия. 2010. **46**, № 2. С. 39–48.
19. **Антипина Е. В., Мустафина С. А., Антипин А. Ф.** Численный алгоритм идентификации кинетической модели химической реакции // Вестн. Технологического университета. 2019. **22**, № 9. С. 13–17.

Поступила в редакцию 14.01.2020
После доработки 06.02.2020
Принята к публикации 17.02.2020