МЕТОД РАСЧЕТА ЭКСТРЕМАЛЬНЫХ ЗНАЧЕНИЙ ПОКАЗАТЕЛЕЙ КАЧЕСТВА ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

А.И.Рубан

Применение статистических методов планирования экспериментов позволяет отыскивать уравнения связи между показателями качества и входными переменными в виде степенных полиномов I и II степени. Затем необходимо найти такой набор входных переменных, который обеспечивает экстремум показателя качества. Накладываемые на входные переменные ограничения часто имеют простейший вид $a \leq x \leq в$. В этом случае мы имеем задачу линейного либо квадратичного программирования. Если первая из них решается сравнительно просто, то решение второй приводит к сложным алгоритмам, реализация которых даже на УЦВМ среднего класса вызывает значительные трудности.

На практике часто встречаются задачи, когда независимых переменных 2 или 3 и необходимо в достаточно короткий срок найти оптимальные условия ведения технологических процессов. Для таких задач небольшой размерности желательно иметь алгоритм, позволяющий делать ручные расчеты любому инженеру-технологу, незнакомому с программированием на УЦВМ. Это дало бы возможность, во-первых, вести контроль за расчетами на УЦВМ и, во-вторых, более оперативно управлять технологическими процессами, когда нет "под рукой" ЦВМ, либо имеются малые ВМ.

Алгоритм, обладающий указанными свойствами, мы приводим в данной работе.

Несмотря на простую идейную основу автор не встречал описания его в существующей литературе по нелинейному программированию. Все расчеты по этому алгоритму можно вести с помощью подручных вычислительных средств (логарифмическая линейка, счетная машинка), и при получении достаточных навыков решение отыскивается в короткий срок (для одной задачи необходимо не больше I-2 часов). Кроме того для числа переменных 3 алгоритм можно легко реализовать на УЦВМ.

<u>Постановка задачи.</u> Необходимо найти <u>максимум</u> функции второго порядка.

$$J(x_1, x_2, x_3) = p^T x + x^T C x = p_1 x_1 + p_2 x_2 + p_3 x_3 + C_{11} x_1^2 + C_{22} x_2^2 + C_{33} x_3^2 + 2C_{12} x_1 x_2 + 2C_{13} x_1 x_3 + 2C_{23} x_2 x_3 . \qquad (I)$$

при наличии ограничений

$$a_i \leq x_i \leq b_i \ , \qquad i = 1, 2, 3 \qquad (2)$$

Дальше мы для простоты будем рассматривать случай, когда

$$-1 \leq x_i \leq 1, \qquad i = 1, 2, 3, \qquad (3)$$

ибо метод при этом не теряет своей общности.

В уравнении (I) использованы обозначения

$$p = \begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \\ p_3 \end{pmatrix}, \ x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}, \ C = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} \\ c_{21} & c_{22} & c_{23} \\ c_{31} & c_{32} & c_{33} \end{pmatrix}, \qquad (4)$$

причем $C_{12} = C_{21}$, $C_{13} = C_{31}$, $C_{23} = C_{32}$.

Метод решения.

I. Определяем вид поверхности $\mathcal{J}(x)$ в координатном пространстве ($\mathcal{J}$, x_1, x_2, x_3). Это можно сделать следующими двумя способами.

а). Используем теорему Сильвестра о положительной определенности матрицы С.

Если все определители Сильвестра положительны,

$$\Delta_1 = |c_{11}| > 0, \ \Delta_2 = \begin{vmatrix} c_{11} & c_{12} \\ c_{21} & c_{22} \end{vmatrix} > 0, \ \Delta_3 = \begin{vmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} \\ c_{21} & c_{22} & c_{23} \\ c_{31} & c_{32} & c_{33} \end{vmatrix} > 0, \qquad (5)$$

то $\mathcal{J}(x)$ имеет минимум.

Если нечетные определители Сильвестра отрицательны, а четные положительны

$$\Delta_1 < 0 \ , \quad \Delta_2 > 0 \ , \quad \Delta_3 < 0 \ , \qquad (6)$$

то $\mathcal{J}(x)$ имеет максимум.

В остальных случаях $\mathcal{J}(x)$ это поверхность минимакс (седлообразная), либо типа гребня (оврага).

б) Приводим $\mathcal{J}(x)$ к каноническому виду. Так как нас интересует лишь вид поверхности, то достаточно найти любую каноническую форму из всех существующих. Поэтому используем достаточно простой и универсальный метод - метод Лагранжа.

Приводим к каноническому виду квадратичную форму $x^T Cx$. Если в матрице С элемент $C_{11} \neq 0$, то переходим к новым координатам в соответствии с линейным преобразованием

$$\begin{aligned} y_1 &= c_{11}x_1 + c_{12}x_2 + c_{13}x_3, \\ y_2 &= x_2, \\ y_3 &= x_3 \end{aligned} \qquad (7)$$

Отсюда получаем связь между старыми координатами и новыми

$$
\begin{aligned}
x_1 &= \frac{1}{c_{11}} y_1 - \frac{c_{12}}{c_{11}} y_2 - \frac{c_{13}}{c_{11}} y_3 ,\\
x_2 &= \quad y_2 ,\\
x_3 &= \quad y_3 ,
\end{aligned}
$$

или в матричной форме

$$
x = Ay , \quad A = \begin{pmatrix} \frac{1}{c_{11}} & -\frac{c_{12}}{c_{11}} & -\frac{c_{13}}{c_{11}} \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{8}
$$

В новых переменных квадратичная форма приобретает вид

$$
x^T C x = y^T A^T C A y = y^T D y , \quad D = A^T C A = \begin{pmatrix} d_{11} & 0 & 0 \\ 0 & d_{22} & d_{23} \\ 0 & d_{32} & d_{33} \end{pmatrix} \tag{9}
$$

Так как обычно $d_{22} \neq 0$, то применим еще линейное преобразование координат, аналогичное вышеописанному:

$$
\begin{aligned}
h_1 &= y_1 ,\\
h_2 &= d_{22} y_2 + d_{23} y_3 ,\\
h_3 &= y_3 ,
\end{aligned}
$$

или

$$
y = Eh , \quad E = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1/d_{22} & -d_{23}/d_{22} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{10}
$$

Запишем квадратичную форму в новых координатах h

$$
x^T C x = y^T D y = h^T E^T D h = h^T F h , \quad F = E^T A^T C A E = \begin{pmatrix} f_{11} & 0 & 0 \\ 0 & f_{22} & 0 \\ 0 & 0 & f_{33} \end{pmatrix} , \tag{11}
$$

т.е. получим канонический вид

$$
x^T C x = f_{11} h_1^2 + f_{22} h_2^2 + f_{33} h_3^2 . \tag{12}
$$

Теперь можно записать и канонический вид для всего квадратичного уравнения (если $f_{ii} = 0$, $i = 1, 2, 3$)

$$
J(x) = f_{11} z_1^2 + f_{22} z_2^2 + f_{33} z_3^2 + f_0 , \quad z_i = \left(h_i + \frac{q_i}{2f_{ii}}\right) , \ i = 1,2,3; \tag{13}
$$

$$
f_0 = -\sum_{i=1}^{3} \left(\frac{q_i}{2}\right)^2 \frac{1}{f_{ii}} , \quad q^T = p^T (AE)^{-1} = (q_1 , q_2 , q_3) .
$$

Отсюда следует, что:

1) если $f_{ii} > 0$, $\quad = 1, 2, 3$, то $J(x)$ имеет минимум

2) если $f_{ii} < 0$, $\quad = 1, 2, 3$, то - максимум;

3) f_{ii} имеют различные знаки, то $J(x)$ – поверхность типа минимакс. Возможны другие виды поверхностей второго порядка. Мы их здесь не рассматриваем.

I) Поверхность $J(x)$ имеет центр в точке, координаты которой находятся из системы линейных алгебраических уравнений

$$h_i = -\frac{q_i}{2f_{ii}}, \qquad i = 1, 2, 3 \tag{14}$$

где

$$h = E^{-1}A^{-1}x, \qquad (x = AEh). \tag{15}$$

2) Если $J(x)$ имеет минимум, то решение (максимум $J(x)$) будет в вершинах куба ограничений. В этих точках $J(x)$ сравнивается и точка, дающая наибольшее значение $J(x)$, будет решением задачи.

Если $J(x)$ имеет максимум и он находится внутри заданной области, то точка, соответствующая максимуму $J(x)$, будет решением задачи. Для расчета координат x_1, x_2, x_3 необходимо решить систему линейных неоднородных алгебраических уравнений

$$p + 2Cx = 0, \tag{16}$$

или систему (14).

В остальных случаях решение следует искать на поверхности куба ограничений. Для этого необходимо последовательно исследовать на максимум функцию отклика на всех гранях куба.

3) Поиск максимума $J(x)$ на поверхности куба ограничений.

а) Фиксируем $X_1 = +1$. Тогда $J(x)$ станет полиномом второй степени от двух переменных x_2 и x_3, и исследовать $J(x_2, x_3)$ следует так же, как и для случая двух переменных.

Если $J(x_2, x_3)$ имеет минимум, то максимум $J(x_2, x_3)$ следует искать в вершинах квадрата ограничений, т.е. в точках: (1,1), (1,-1), (-1,+1), (-1,-1). Из значений $J(x_2, x_3)$ в этих точках выбирается наибольшее. Это и будет максимальное значение $J(x_1, x_2, x_3)$ на грани $x = +1$.

Если $J(x_2, x_3)$ внутри области $-1 \leq x_i \leq +1$, $i = 2, 3$ имеет максимум; то это максимальное значение и будет решением на грани $X_1 = +1$.

В остальных случаях необходимо максимум $J(x_2, x_3)$ искать на поверхности квадрата ограничений $-1 \leq x_i \leq 1$, $i = 2, 3$. Фиксируем $x_2 = +1$ и ищем экстремум $J(x_3)$ при наличии ограничения $-I \le x_3 \le +I$. Решение этой одномерной задачи уже не представляет труда. Запоминаем полученное максимальное значение $\mathcal{J}$ и соответствующие ему значения координат. Затем последовательно фиксируем $x_2 = I$, $x_3 = +I$, $x_3 = -I$, отыскиваем и запоминаем максимальное значение $\mathcal{J}$. Из этих четырех максимальных значений $\mathcal{J}$ выбираем наибольшее - решение задачи на грани $x_1 = +I$.

б) Фиксируем $x_1 = -I$ и вновь повторяем все действия, описанные в пункте "а".

Затем последовательно исследуем грани $x_2 = +I$, $x_2 = -I$, $x_3 = +I$, $x_3 = -I$. В конце для каждой грани выбираем из решений то, которое соответствует наибольшему значению (x).

Заключение. На основе описанного алгоритма автором решены экстремальные задачи на поиск оптимальных условий ведения процесса гидрокрекинга при получении чистых бензола, нафталина и мезитилена / I /. Алгоритм прост в вычислительном отношении, доступен любому инженеру-технологу и с малыми затратами его можно реализовать на УЦВМ.

Литература

I. Рубан А.И., Эльберт Э.И. Расчет экстремальных значений параметров гидрокрекинга при получении чистых бензола, нафталина и мезитилена. Отчет по НИР. Томск - Новокузнецк, 1971.

ИССЛЕДОВАНИЕ СОРБЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ ОКИСИ МАГНИЯ С ДОБАВКАМИ

В.В.Нахалов, Н.Ф.Стась, Г.Г.Савельев, Т.С.Горина

Исследования по сорбции углекислого газа и паров воды проведены на I3 образцах окиси магния, полученной при различных условиях, и на II образцах с "гомофазными" добавками.

Окись магния без добавок получали термовакуумным разложением основных карбонатов магния непосредственно в ячейке весовой установки. Основные карбонаты осаждали из растворов азотнокислого или хлористого магния различной концентрации растворами бикарбонатов аммония, калия или натрия. Все синтезы проводились при комнатной температуре. Основные данные по методикам