Управляемые системы, ИМ, ИК СО АН СССР 1968 г. выпуск I.
УДК.62-50: 66-02.

ОБ ОДНОМ ЧИСЛЕННОМ МЕТОДЕ РЕШЕНИЯ ОПТИМАЛЬНЫХ ЗАДАЧ ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ.

В.И.Быков, В.А.Кузин, А.В.Федотов.

Среди основных задач теории оптимальных процессов особое внимание привлекает проблема численного решения. Известно, что при решении вариационных задач /I/ оптимальное управление зависит от решения вспомогательной сопряженной системы, но общих правил выбора начальных условий для сопряженной системы не существует. Трудности решения этой задачи носят принципиальный характер и не исчезают при исследовании простых систем. Обычно применяют один из следующих методов:

- метод стрельбы, когда исследуют большое число оптимальных траекторий, исходящих из рассматриваемой точки в прямом или обратном направлении независимой переменной;
- метод проб и ошибок, когда задается некоторое начальное значение управления и последовательные уточнения производятся до тех пор, пока ошибка в граничных условиях не будет сведена к минимуму.

Для успешной реализации численных методов необходимо, чтобы небольшие изменения начальных условий приводили к небольшим изменениям конечных условий. Для некоторых классов задач это не всегда имеет место /2/. Более того, часто конечные условия слишком чувствительны к изменению начальных.

В литературе имеется несколько сообщений о попытках оптимизировать процесс на основе прямого интегрирования уравнений /3-6/. Итерационные алгоритмы, предназначенные для аналоговых и цифровых машин представлены в работах /6-8/. Метод Ньютона-Рафсона и метод наискорейшего спуска применялись к задачам оптимизации в работах /9, IO/. Однако авторы указывают на некоторые трудности, связанные с численным решением.

Вывод, который можно сделать из результатов перечисленных выше исследований и изучения решенных задач, состоит в том, что поиск верных начальных значений для сопряженной системы переменных может быть сделан на основе совместного прямого интегрирования систем уравнений, но для успеха такого поиска необходимы хорошее начальное приближение и надежный способ отыскания функции нескольких переменных /II/.

В данной работе рассматривается один из методов получения численного решения некоторых оптимальных задач.

Задачу оптимизации при ограничении на переменные управления математически можно сформулировать следующим образом. Пусть процесс описывается системой обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\frac{dx}{d\tau} = f(x,u), \qquad /1/$$

где x — n-мерный вектор состояния, u — r — мерный вектор управления, в каждый момент τ удовлетворяющий системе ограничений:

$$Q_j[u_1(\tau),\dots,u_r(\tau)] \le 0, \ (j=1,\dots,k). \qquad /2/$$

Предполагается, что $f(x,u)$ принадлежит классу дважды дифференцируемых функций по всем аргументам. Требуется выбрать такое кусочно-непрерывное управление $u(\tau)$, при котором функция конечного состояния

$$S = \sum_{i=1}^{n} c_i x_i(\tau_k) \qquad /3/$$

достигает максимального возможного значения при выполнении условия /2/. Принцип максимума для задачи формулируется следующим образом. Для оптимальности управления $u(\tau)$ и траектории $x(\tau)$ по критерию максимума функционала /3/ необходимо существование такой ненулевой непрерывной вектор-функции $\psi(\tau)$, удовлетворяющей системе:

$$\frac{d\psi}{d\tau} = -G^*(x^0,u^0)\psi,$$

где u^0, x^0 -оптимальное управление и траектория; $G^*(x^0,u^0)$ -транспортированная матрица Якоби вектор-функции $f(x,u)$, рассматриваемой как функция переменной x, такая что при любом $\tau\in[\tau_0,\tau_k]$ функция

$$H(x,\psi,u) = \sum_{i=1}^{n}\psi_i f_i(x,u)$$

по переменному $u\in U$ достигает в точке $u=u^0(\tau)$ максимума, то есть

$$H(x,\psi,u^0) \ge H(x,\psi,u).$$

Таким образом, нелинейная краевая задача, соответствующая сформулированной выше оптимальной задаче будет иметь следующий вид:

$$\begin{cases} \dfrac{dx}{d\tau} = f(x,u), \\ \dfrac{d\psi}{d\tau} = -G^*(x,u)\psi, \end{cases} \qquad /4/$$

$$H(x,\psi,u^0) = \max_{u\in U} H(x,\psi,u); \qquad /5/$$

краевые условия:

$$x(\tau_0) = x_0, \quad \psi(\tau_k) = c, \qquad /6/$$

где $c=[c_1,\dots,c_n]$, c_i - некоторые постоянные величины, определяемые решением задачи.

В работе [1] показано, что система /4/ полная и представляет собой систему $2n$ дифференциальных уравнений с $2n$ неизвестными. Из /6/ видно, что и система краевых условий полная, так как на каждом из концов промежутка интегрирования задано по n условий. Для решения этой краевой задачи наряду со стационарной системой /4/ рассмотрим нестационарную систему уравнений:

$$\frac{\partial x}{\partial \xi} = -\frac{\partial x}{\partial \tau} + f(x,u), \qquad /7/$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial \xi} = +\frac{\partial \psi}{\partial \tau} + G^*(x,u)\psi$$

с теми же стационарными граничными условиями /6/ и какими-либо начальными условиями, например:

$$x(0,\tau) = x_0, \ \psi(0,\tau) = c_i.$$

Если решение нестационарной задачи при $t \to \infty$ стремится к решению стационарной задачи, то искомый алгоритм может быть получен на базе неявной мажорантной схемы, аппроксимирующей нестационарные уравнения /7/. Действительно, пусть u_j^k обозначает приближенное значение функции u при значениях аргументов в точке:

$$(\xi_k, t_j) = (k\cdot\Delta\xi; j\Delta\tau)$$

$$k = 0,1,\dots; \ j = 0,1,\dots,N, \ \Delta\tau = \frac{1}{N}, \ \Delta\xi, \Delta\tau > 0.$$

Тогда после линеаризации разностных уравнений с помощью вынесения нелинейных членов на предыдущий, уже просчитанный k -й слой схемы примет вид:

$$\frac{x_j^{k+1} - x_j^k}{\Delta\xi} = -\frac{x_j^{k+1} - x_{j-1}^{k+1}}{\Delta\tau} + f_j^k \quad (j=1,\dots,N); \qquad /8/$$

$$\frac{\psi_j^{k+1} - \psi_j^k}{\Delta\xi} = \frac{\psi_{j+1}^{k+1} - \psi_j^{k+1}}{\Delta\tau} + G_j^k \psi_j^k \quad (j=N-1,\dots,0); \qquad /9/$$

$$x_0^k = x_0, \ \psi_N^k = c; \quad (k=0,1,\dots),$$

$$x_j^0 = x_0, \quad \psi_j^0 = c, \quad (j=0,1,\dots,N). \qquad /10/$$

Поскольку на нулевом слое / $k=0$ / значения x_j^0, ψ_j^0 $(j=0,1,\dots,N)$ известны, то из условия максимума определяется u_j^0, и, следовательно, функции f_j^0 и $G_j^0\psi_j^0$. Затем по рекуррентным формулам /8/ насчитываются x_j^1 и ψ_j^1. Зная значения x и ψ на первом слое, по тем же правилам насчитываем значения этих функций на втором слое и т.д. до установления. Конечный результат и будет решением стационарной задачи /4/, вернее, ее конечно-разностного аналога. Это непосредственно видно из уравнений /8/, если положить $x^{k+1} = x^k$, $\psi^{k+1} = \psi^k$.

Схему /8/ можно рассматривать в качестве итерационной, где верхний индекс означает номер итерации, а $\Delta\xi$ -релаксационный параметр, определяющий скорость сходимости итерационного процесса.

Рассмотренный алгоритм был применен для определения оптимальной температуры для процесса с двумя параллельными реакциями в реакторе идеального вытеснения, а также для процесса с двумя последовательными реакциями как в реакторе идеального вытеснения, так и в реакторе неполного смешения.

I. Процесс с двумя последовательными реакциями, проходящими по схеме $A \to B \to C$ в реакторе идеального вытеснения, описывается в случае реакций первого порядка следующими уравнениями:

$$\begin{cases} \frac{dx_1}{d\tau} = -k_1 x_1 \\ \frac{dx_2}{d\tau} = k_1 x_1 - k_2 x_2 \qquad (0 \leq \tau \leq \tau_k) \end{cases} \qquad /11/$$

с граничными условиями

$$\xi = 0: \quad x_1 = x_1^0, \quad x_2 = x_2^0, \qquad /12/$$

где x_1, x_2 – концентрации исходного продукта A и целевого продукта B соответственно, τ –время контакта, $k_i = k_{i0} \exp(-E/RT)$ $(i=1,2)$.

Допустимым управлением – в данном случае температурой $T(\tau)$ – считаем все кусочно-непрерывные функции $T(\tau)$ на отрезке $[0, \tau_k]$, удовлетворяющие ограничениям

$$0 < T_{min} \leq T(\tau) \leq T_{max} < \infty. \qquad /13/$$

Требуется среди допустимых температур $T(\tau)$ найти такую, при которой выход полезного продукта, то есть $x_2(\tau_k)$, был максимален. Таким образом, задача оптимизации является задачей с фиксированным временем и свободным правым концом. Поэтому для сопряженной системы уравнений

$$\begin{cases} \frac{d\psi_1}{d\tau} = k_1(\psi_1 - \psi_2) \\ \frac{d\psi_2}{d\tau} = k_2 \psi_2 \, , \end{cases} \qquad /14/$$

граничные условия примут вид:

$$\tau = \tau_k: \quad \psi_1 = 0, \quad \psi_2 = 1. \qquad /15/$$

При этом гамильтониан H записывается так:

$$H = k_1(T)(\psi_2 - \psi_1)x_1 - k_2(T)\psi_2 x_2. \qquad /16/$$

Пусть $u = k_1(T)$ –новое управление. Тогда функцию H можно представить в виде трансцендентного полинома относительно u :

$$H = (\psi_2 - \psi_1)x_1 u - \rho \psi_2 x_2 u^{\alpha},$$

где $\alpha = E_2/E_1 > 1$, $\rho = k_{20} \cdot (k_{10})^{-\alpha}$,

и отыскание максимального значения гамильтониана H сводится к исследованию некоторого полинома, который при $\psi_2 x > 0, (\psi_2 - \psi_1)x_1 > 0$ имеет вид /16/.

Следовательно, если H достигает максимального значения внутри допустимой области значений /13/, то оптимальная температура определяется из условия

$$\frac{\partial H}{\partial T} = 0$$

единственным образом, в аналитической форме:

$$T = \frac{E_2 - E_1}{R \ln \dfrac{k_{20} E_2 x_2 \psi_2}{k_{10} E_1 x_1 (\psi_2 - \psi_1)}} \qquad /17/$$

Если же $T(\tau)$ лежит вне допустимой области, то оптимальная температура принимает предельно допустимые значения T_{max} или T_{min}, соответственно тому, какое ограничение из /13/ нарушено.

Для решения краевой задачи /II/, /I2/, /I4/, /I5/, где $T(\tau)$ определяется либо из /I7/, либо принимает граничные значения из допустимой области /I5/, рассмотрим соответствующую нестационарную задачу:

$$
\begin{cases}
\dfrac{\partial x_1}{\partial \xi} = -\dfrac{\partial x_1}{\partial \tau} - k_1(T)x_1 \\
\dfrac{\partial x_2}{\partial \xi} = -\dfrac{\partial x_2}{\partial \tau} + k_1(T)x_1 - k_2(T)x_2 \\
\dfrac{\partial \psi_1}{\partial \xi} = \dfrac{\partial \psi_1}{\partial \tau} + k_1(T)(\psi_2 - \psi_1) \\
\dfrac{\partial \psi_2}{\partial \xi} = \dfrac{\partial \psi_2}{\partial \tau} - k_2(T)\psi_2
\end{cases}
$$

$$
\begin{aligned}
&\tau = 0: \ x_1 = x_1^0, \ \ x_2 = x_2^0; \\
&\tau = \tau_k: \ \psi_1 = 0, \ \ \psi_2 = 1; \\
&E = 0: \ x_1 = x_1^0, \ x_2 = x_2^0, \ \psi_1 = 0, \ \psi_2 = 1.
\end{aligned}
$$

Ее конечно-разностный аналог в случае неявной мажорантной схемы представляет собой систему соотношений вида:

$$\frac{(x_e)_i^j - (x_e)_i^{j-1}}{\Delta\xi} = -\frac{(x_e)_i^j - (x_e)_{i-1}^j}{\Delta\tau} + (f_e)_i^{j-1} \quad (i=1,\ldots,N);$$

$$\frac{(\psi_e)_i^j - (\psi_e)_i^{j-1}}{\Delta\xi} = \frac{(\psi_e)_{i+1}^j - (\psi_e)_i^j}{\Delta\tau} + (g_e)_i^{j-1} \quad (i=N-1,\ldots,0);$$

$$(e = 1, 2)$$

$$(x_e)_0^j = x_e^0, \quad (\psi_1)_N^j = 0, \quad (\psi_2)_N^j = 1 \quad (j = 0,\ldots\ );$$

$$(x_e)_i^0 = x_e^0, \quad (\psi_1)_i^0 = 0, \quad (\psi_2)_i^0 = 1 \quad (i = 0, 1,\ldots,N);$$

$$(f_1)_i^j = -k_1(T_i^j)(x_1)_i^j;$$

$$(f_2)_i^j = k_1(T_i^j)(x_1)_i^j - k_2(T_i^j)(x_2)_i^j;$$

$$(g_1)_i^j = k_1(T_i^j)[(\psi_2)_i^j - (\psi_1)_i^j];$$

$$(g_2)_i^j = -k_2(T_i^j)(\psi_2)_i^j.$$

Приводя подобные члены и опуская индекс e, получаем рекуррентные формулы:

$$x_i^j = \frac{\Delta\xi}{\Delta\xi + \Delta\tau} x_{i-1}^j + \frac{\Delta\tau}{\Delta\xi + \Delta\tau} x_i^{j-1} + \frac{\Delta\xi\cdot\Delta\tau}{\Delta\xi + \Delta\tau} f_i^{j-1} \quad (i=1,\ldots;N);$$

$$\psi_i^j = \frac{\Delta\xi}{\Delta\xi + \Delta\tau} \psi_{i+1}^j + \frac{\Delta\tau}{\Delta\xi + \Delta\tau} \psi_i^{j-1} + \frac{\Delta\xi\cdot\Delta\tau}{\Delta\xi + \Delta\tau} g_i^{j-1} \quad (i=N-1,\ldots,0).$$

Процесс итераций считался установившимся, если выполнялось неравенство:

$$|(x_1)_i^{j+1} - (x_1)_i^j| + |(x_2)_i^{j+1} - (x_2)_i^j| + |(\psi_1)_i^{j+1} - (\psi_1)_i^j| + |(\psi_2)_i^{j+1} - (\psi_2)_i^j| < \varepsilon, \quad /18/$$

где ε - достаточно малая положительная константа.

2. Выпишем теперь аналогичные формулы для задачи оптимизации процесса с двумя паралельными реакциями, проходящими по схеме $A \begin{smallmatrix} \nearrow B \\ \searrow C \end{smallmatrix}$ в реакторе идеального вытеснения. Математическое описание этого процесса в случае реакций первого порядка представляет собой систему уравнений вида:

$$\begin{cases} \dfrac{dx_1}{d\tau} = -(k_1+k_2)x_1 \\ \dfrac{dx_2}{d\tau} = k_1 x_1 \qquad (0 \leq \tau \leq \tau_k) \end{cases}$$

с граничными условиями $\tau=0, \ x_1=x_1^0, \ x_2=x_2^0$.

Постановка оптимальной задачи и обозначения остаются прежними. Сопряженная система вырождается в одно уравнение

$$\frac{d\psi}{d\tau} = (k_1+k_2)\psi - k_1$$

с условием на правой границе $\psi(\tau_k)=0$. Как и раньше, можно выписать явный вид оптимальной температуры, лежащей внутри допустимой области /13/:

$$T = \frac{E_2-E_1}{R\ln\dfrac{k_{20}E_2\psi}{k_{10}E_1(1-\psi)}} .$$

Нестационарная система уравнений запишется так:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial x_1}{\partial \xi} = -\dfrac{\partial x_1}{\partial \tau} - [k_1(T)+k_2(T)]x_1 , \\ \dfrac{\partial x_2}{\partial \xi} = -\dfrac{\partial x_2}{\partial \tau} + k_1(T)x_1 , \\ \dfrac{\partial \psi}{\partial \xi} = \dfrac{\partial \psi}{\partial \tau} - [k_1(T)+k_2(T)]\psi + k_1(T) \end{cases}$$

с начальными $x_1(\tau,0)=x_1^0, \ x_2(\tau,0)=x_2^0, \ \psi(\tau,0)=0$ и граничными $x_1(0,\xi)=x_1^0, \ x_2(0,\xi)=x_2^0, \ \psi(\tau_k,\xi)=0$ условиями.

Рекуррентные формулы, позволяющие решить поставленную задачу, примут вид:

$$x_{1i}^j = \frac{\Delta\xi}{\Delta\xi+\Delta\tau}x_{1i-1}^j + \frac{\Delta\tau}{\Delta\xi+\Delta\tau}x_{1i}^{j-1} + \frac{\Delta\xi\cdot\Delta\tau}{\Delta\xi+\Delta\tau}f_{1i}^{j-1} ,$$

$$x_{2i}^j = \frac{\Delta\xi}{\Delta\xi+\Delta\tau}x_{2i-1}^j + \frac{\Delta\tau}{\Delta\xi+\Delta\tau}x_{2i}^{j-1} + \frac{\Delta\tau\cdot\Delta\xi}{\Delta\xi+\Delta\tau}f_{2i}^{j-1} , \qquad (i=1,\dots,N)$$

$$\psi_i^j = \frac{\Delta\xi}{\Delta\xi+\Delta\tau}\psi_{i+1}^j + \frac{\Delta\tau}{\Delta\xi+\Delta\tau}\psi_i^{j-1} + \frac{\Delta\tau\cdot\Delta\xi}{\Delta\xi+\Delta\tau}g_i^{j-1} \quad (i=N-1,\dots,0),$$

где

$$f_{1i}^{j-1} = -[k_1(T_i^{j-1})+k_2(T_i^{j-1})]x_{1i}^{j-1} ;$$

$$f_{2i}^{j-1} = k_1(T_i^{j-1})x_{1i}^{j-1} ;$$

$$g_i^{j-1} = -[k_1(T_i^{j-1})+k_2(T_i^{j-1})]\psi_i^{j-1} + k_1(T_i^{j-1}) ;$$

и

$$T_i^{j-1} = \frac{E_2 - E_1}{R \ln \frac{k_2^0 E_2 \psi_i^{j-1}}{k_1^0 E_1 (1-\psi_i^{j-1})}}$$

При вычислении T_i^{j-1} необходимо проверять выполнение условий /13/, так как оптимальная температура на правой границе всегда принимает максимально допустимое значение T_{max}. Описанный итерационный процесс продолжается до установления в смысле неравенства /18/.

3. Рассмотрим теперь процесс с двумя реакциями типа $A \to B \to C$ в реакторе неполного смешения. В случае реакций первого порядка математическое описание этого процесса представляет собой систему обыкновенных дифференциальных уравнений вида:

$$\begin{cases} \frac{1}{Pe}\frac{d^2x_1}{d\tau^2} - \frac{dx_1}{d\tau} - k_1(T)x_1 = 0 \\ \qquad\qquad\qquad\qquad (0 \leq \tau \leq \tau_k) \\ \frac{1}{Pe}\frac{d^2x_2}{d\tau^2} - \frac{dx_2}{d\tau} + k_1(T)x_1 - k_2(T)x_2 = 0 \end{cases} \qquad /19/$$

с граничными условиями:

при $\tau = 0$ при $\tau = \tau_k$

$$\frac{1}{Pe}\frac{dx_1}{d\tau} = x_1 - x_1^0 \qquad \frac{dx_1}{d\tau_2} = 0$$

$$\frac{1}{Pe}\frac{dx_2}{d\tau} = x_2 - x_2^0 \qquad \frac{dx_2}{d\tau} = 0 \qquad /20/$$

Pe - критерий Пекле, характеризующий продольную диффузию в слое катализатора. Остальные обозначения и постановка задачи оптимизации остаются прежними.

Переходя к системе уравнений первого порядка, получим:

$$\begin{cases} \frac{dx_1}{d\tau} = x_3, \\ \frac{dx_2}{d\tau} = x_4, \\ \frac{dx_3}{d\tau} = Pe\,[x_3 + k_1(T)x_1], \\ \frac{dx_4}{d\tau} = Pe\,[x_4 - k_1(T)x_1 + k_2(T)x_2], \\ \tau = 0, \quad \dot{x}_3 = Pe(x_1 - x_1^0), \quad \tau = \tau_k, \quad x_3 = 0 \\ \qquad\quad x_4 = Pe(x_2 - x_2^0), \qquad\qquad x_4 = 0. \end{cases} \qquad /21/$$

В этом случае

$$H = x_3\psi_1 + x_4\psi_2 + Pe\{(x_3 + k_1x_1)\psi_3 + (x_4 - k_1x_1 + k_2x_2)\psi_4\} \qquad /22/$$

и сопряженная система такова:

$$\begin{cases} \frac{d\psi_1}{d\tau} = -Pe(\psi_3 - \psi_4)k_1(T), \\ \frac{d\psi_2}{d\tau} = -Pe\,k_2(T)\psi_4, \\ \frac{d\psi_3}{d\tau} = -(\psi_1 + Pe\,\psi_3), \\ \frac{d\psi_4}{d\tau} = -(\psi_2 + Pe\,\psi_4). \end{cases} \qquad /23/$$

Известно /I/, что если начало оптимальных траекторий в пространстве фазовых координат лежит на множестве типа:

$$F(x_1,\dots,x_n)=0\ ,$$

то

$$\psi_i(0)=-\mu\frac{dF}{dx_i}\quad(i=1,\dots,n)\ .$$

В применении к условиям /21/ это означает:

$$\psi_1(0)=\mu Pe,\ \psi_2(0)=\mu Pe,\ \psi_3(0)=-\mu\ ,\ \psi_4(0)=-\mu$$

или

$$\psi_1(0)+Pe\,\psi_3(0)=0,\ \psi_2(0)+Pe\,\psi_4(0)=0\ . \qquad /24/$$

На конце траектории условия для сопряженных переменных имеют вид:

$$\psi_1(\tau_k)=0,\quad \psi_2(\tau_k)=C,$$

где C - произвольная постоянная, пусть $C=Pe$.

Оптимальная температура $T(\tau)$ при любом $t\in[0,\tau_k]$ определяется из условия максимума гамильтониана /24/, именно: внутри допустимой области /13/ оптимальная температура выражается через x_1, x_2, ψ_3, ψ_4 так же, как в /17/. Аналогичным образом производится учет предельно допустимых значений T_{max} и T_{min}. Это объясняется тем обстоятельством, что виды зависимостей H от T в /16/ и /22/ идентичны.

Исключив из сопряженной системы уравнений /23/ - /25/ несущественные переменные ψ_1 и ψ_2, получим эквивалентную систему двух уравнений второго порядка:

$$\begin{cases}\dfrac{1}{Pe}\dfrac{d^2\psi_3}{d\tau^2}+\dfrac{d\psi_3}{d\tau}-(\psi_3-\psi_4)k_1(T)=0,\\[2ex] \dfrac{1}{Pe}\dfrac{d^2\psi_4}{d\tau^2}+\dfrac{d\psi_4}{d\tau}-\psi_4\,k_2(T)=0\end{cases} \qquad /26/$$

с граничными условиями:

при $\tau=0$

$$\frac{d\psi_3}{d\tau}=0,\qquad \frac{d\psi_4}{d\tau}=0$$

при $\tau=\tau_k$

$$\frac{1}{Pe}\frac{d\psi_3}{d\tau}+\psi_3=0,\qquad \frac{1}{Pe}\frac{d\psi_4}{d\tau}+\psi_4=-1\ . \qquad /27/$$

Введем новые обозначения $\psi_3=\varphi_1,\psi_4=\varphi_2$ и рассмотрим нестационарную систему уравнений:

$$\begin{cases}\dfrac{\partial x_1}{\partial\xi}=\dfrac{1}{Pe}\dfrac{\partial^2x_1}{\partial\tau^2}-\dfrac{\partial x_1}{\partial\tau}-k_1(T)x_1,\\[2ex] \dfrac{\partial x_2}{\partial\xi}=\dfrac{1}{Pe}\dfrac{\partial^2x_2}{\partial\tau^2}-\dfrac{\partial x_2}{\partial\tau}+k_1(T)x_1-k_2(T)x_2,\\[2ex] \dfrac{\partial\varphi_1}{\partial\xi}=\dfrac{1}{Pe}\dfrac{\partial^2\varphi_1}{\partial\tau^2}+\dfrac{\partial\varphi_1}{\partial\tau}-(\varphi_1-\varphi_2)k_1(T),\\[2ex] \dfrac{\partial\varphi_2}{\partial\xi}=\dfrac{1}{Pe}\dfrac{\partial^2\varphi_2}{\partial\tau^2}+\dfrac{\partial\varphi_2}{\partial\tau}-k_2(T)\varphi_2\ ,\end{cases} \qquad /28/$$

с теми же стационарными граничными условиями /27/ и произвольно заданными начальными условиями. Одна из возможных разностных аппроксимаций уравнений /28/ имеет вид:

$$\frac{(x_e)_i^j-(x_e)_i^{j-1}}{\Delta\xi}=\frac{1}{Pe}\frac{(x_e)_{i+1}^j-2(x_e)_i^j+(x_e)_i^j}{\Delta\tau^2}-\frac{(x_e)_i^j-(x_e)_i^j}{\Delta\tau}+(f_e)_i^{j-1},$$

$$\frac{(\psi_e)_i^j-(\psi_e)_i^{j-1}}{\Delta\xi}=\frac{1}{Pe}\frac{(\psi_e)_{i+1}^j-2(\psi_e)_i^j+(\psi_e)_{i-1}^j}{\Delta\tau^2}-\frac{(\psi_e)_{i+1}^j-(\psi_e)_i^j}{\Delta\tau}+(g_e)_i^j, \qquad /29/$$

$$(i=1,\dots,N-1),\quad (e=1,2),$$

где $(f_1)_i^j,\ (f_2)_i^j,\ (g_1)_i^j,\ (g_2)_i^j$ вычисляются по формулам:

$$(f_1)_i^j=-k_1(T_i^j)(x_1)_i^j;$$

$$(f_2)_i^j=k_1(T_i^j)(x_1)_i^j-k_2(T_i^j)(x_2)_i^j;$$

$$(g_1)_i^j=k_1(T_i^j)[(\psi_2)_i^j-(\psi_1)_i^j];$$

$$(g_2)_i^j=-k_2(T_i^j)(\psi_2)_i^j.$$

Схема /29/ может быть сведена к виду:

$$\begin{cases} x_{i+1}^j-Bx_i^j+Cx_{i-1}^j=-\varphi_i^{j-1} \\ \psi_{i+1}^j-b\psi_i^j+c\psi_{i-1}^j=-\omega_i^{j-1} \end{cases} \quad (i=1,\dots,N-1),$$

где $B=2+Pe\,\Delta\tau\left(1+\frac{\Delta\tau}{\Delta\xi}\right),\ C=1+Pe\Delta\tau,\ b=\frac{B}{C},\ c=\frac{1}{C};$

$$(\varphi_e)_i^j-\frac{Pe\,\Delta\tau^2}{\Delta\xi}[(x_e)_i^j+\Delta\xi(f_e)_i^j],$$

$$(e=1,2)$$

$$(\omega_e)_i^j=\frac{Pe\,\Delta\tau^2}{\Delta\xi}[(\psi_e)_i^j+\Delta\xi(g_e)_i^j].$$

Итак, основная задача сводится к решению четырех независимых систем линейных алгебраических уравнений вида:

$$x_{i+1}-Bx_i+Cx_{i-1}=-\varphi_i,$$

где φ_i – известная функция.

Для решения этих систем применялся метод прогонки /12/. Прогоночные коэффициенты и искомые решения вычислялись по формулам:

$$P_{i+1}=\frac{C}{B-P_i},\quad (i=1,\dots,N),$$

$$Q_{i+1}=P_{i+1}(Q_i+\varphi_i),\quad (i=1,\dots,N),$$

$$x_i=\frac{P_{i+1}x_{i+1}+Q_{i+1}}{C},\quad (i=N-1,\dots,0). \qquad /30/$$

Начальные значения P_1, Q_1, x_N могут быть получены из /30/ и разностных аппроксимаций граничных условий. Процесс итераций продолжался до установления в смысле неравенства /18/, то есть так же, как и в предыдущих задачах.

Описанные выше алгоритмы были реализованы на ЭВМ "Минск-2", "М-20". Расчеты проводились при $\xi = 10^{-6}$, $N = 20-100$, $\Delta\xi = 0{,}05-0{,}01$. Сходимость к стационарному режиму при 0,06 наблюдалась на 50-100-й итерации. Следует отметить наиболее быструю сходимость при расчетах оптимальной температуры в реакторе неполного смешения, что объясняется свойством самих конечно-разностных схем для диффузионных уравнений.

Непосредственный счет показал, что затраты машинного времени по сравнению с временем, необходимым для решения рассмотренных задач методом проб и ошибок, сокращаются в 5 - 10 раз.

Поступила в редакцию 8.7.1968г.

Литература

I. Л.С.Понтрягин, В.Г.Болтянский, Р.В.Гамкрелидзе, Е.Р.Мищенко. Математическая теория оптимальных процессов. Физматгиз 1961.

2. B.H. Paiewonsky. Prceedings of International Symposium on Nonlinear Differential Eguations. Acad. Press New Jork(1963)

3. R.M. Noton, P. Dyer, C.A. Markland, IEEE Trans. Automat. Control I2, N I, 59 (1967)

4. J.B. Rosen, Siam Journal a Control 4, N I, 223 (1966)

5. D.D. Fussel, J.D. Hellums, A.J.Ch. E. Journal II, N 4, 733 (1965)

6. E.G. Gillbert, Computing Methods Optimization Problems Academ Press, New Jork 1964.

7. V.S. Darsey, R.A. Hammen, IEEE Trans. Automat. Control. Ac I2 N I, 59 (1967)

8. W.T. Lee, Control. 8, N 70, I74 (1964)

9. C.H. Schley, J. Lee, IEEE Trans. on Automat. Control Ac-I2, N 2, I39 (1967)

I0. R. Luus, L. Lapidus, A.I.Ch.E. Journal I3, NI, I08 (1967)