

УДК 519.6:004.4

## О ПРИБЛИЖЕННОМ РЕШЕНИИ ЗАДАЧИ ОПТИМАЛЬНОГО СКАЛЯРНОГО УПРАВЛЕНИЯ С ТЕРМИНАЛЬНО-ФАЗОВЫМИ ОГРАНИЧЕНИЯМИ НА ОСНОВЕ ЭВОЛЮЦИОННЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ<sup>1</sup>

© 2024 г. А. Ф. Антипин<sup>1</sup>, Е. В. Антипина<sup>2, \*</sup>, С. А. Мустафина<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Стерлитамакский филиал Уфимского университета науки и технологий, Стерлитамак, Россия

<sup>2</sup>Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

\*e-mail: stepashinaev@ya.ru

Поступила в редакцию 23.04.2023 г.

После доработки 30.06.2023 г.

Принята к публикации 31.08.2023 г.

Разработан численный алгоритм поиска приближенного решения задачи оптимального управления при наличии терминально-фазовых ограничений. В общем виде приведена постановка задачи оптимального управления с терминально-фазовыми ограничениями, в которой управление является ограниченной кусочно-постоянной функцией. Для решения поставленной задачи сформулирован пошаговый алгоритм, в базу которого положены методы штрафов и дифференциальной эволюции. На основе приведенного алгоритма создана программа, с помощью которой проведен вычислительный эксперимент для каталитической реакции синтеза бензилиденбензиламина. Определен температурный профиль процесса, который обеспечивает наибольшее значение концентрации целевого вещества при ограничении на конверсию исходных веществ.

**Ключевые слова:** оптимальное управление, фазовые ограничения, эволюционные вычисления, метод штрафов, дифференциальная эволюция

DOI: 10.31857/S0002338824030097 EDN: UPRXYB

## APPROXIMATE SOLUTION TO THE PROBLEM OF OPTIMAL SCALAR CONTROL WITH TERMINAL-PHASE CONSTRAINTS BASED ON EVOLUTIONARY COMPUTATIONS<sup>2</sup>

A. F. Antipin<sup>a</sup>, E. V. Antipina<sup>b, \*</sup>, S. A. Mustafina<sup>b</sup>

<sup>a</sup>Sterlitamak Branch of Ufa University of Science and Technology, Sterlitamak, Russia

<sup>b</sup>Ufa University of Science and Technology, Ufa, Russia

\*e-mail: stepashinaev@ya.ru

A numerical algorithm is developed for searching for an approximate solution to the optimal control problem in the presence of terminal-phase constraints. In general, the formulation of the optimal control problem with terminal-phase constraints is presented, in which the control is a limited piecewise constant function. To solve the problem, a step-by-step algorithm is formulated, which is based on the methods of penalties and differential evolution. Based on this algorithm, a program is created with the help of which a computational experiment is carried out for the catalytic reaction of the synthesis of benzylidenebenzylamine. The temperature profile of the process, which provides the highest concentration of the target substance with restrictions on the conversion of the starting substances, is determined.

**Keywords:** optimal control, phase constraints, evolutionary computation, penalty method, differential evolution

<sup>1</sup> Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (код научной темы FZWU-2023-0002).

<sup>2</sup> This research was funded by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (scientific code FZWU-2023-0002).

**Введение.** Решение задач оптимального управления динамической системой опирается на ее математическую модель, которую можно представить в виде системы обыкновенных дифференциальных уравнений, содержащую фазовые переменные, определяющие состояние управляемого процесса и неподдающиеся непосредственному воздействию, и управление, значениями которого можно варьировать в ходе процесса.

В задачах оптимального управления ограничения могут быть наложены не только на переменную управления, но и на фазовые переменные. Наличие ограничений на фазовые переменные усложняет решение оптимизационных задач как в теоретическом исследовании свойств оптимальных процессов, так и в реализации алгоритмов численного решения. Однако наличие фазовых ограничений позволяет учитывать особенности протекания процесса, и тем самым делает его математическое описание более точным.

Существует несколько подходов к решению задач оптимального управления динамическими системами с фазовыми ограничениями. Один из них связан с получением точных необходимых условий оптимальности и построением на их основе вычислительных процедур [1]. Наиболее точные результаты решения задач оптимального управления можно найти, используя принцип максимума. С помощью принципа максимума исходная постановка задачи сводится к краевой задаче для системы обыкновенных дифференциальных уравнений, решение которой связано с выбором начальных значений сопряженных переменных [2–5].

Другой подход предполагает применение штрафных функций, с помощью которых обеспечивается переход к задаче оптимального управления без ограничений [6–10]. Однако большинство численных методов решения оптимизационных задач без ограничений зависит от начального приближения, с которого начинается поиск решения [11]. Данную трудность позволяет преодолеть применение эволюционных методов оптимизации, в частности метода дифференциальной эволюции [12–14].

Метод дифференциальной эволюции имеет меньшее количество настраиваемых параметров, в отличие от других методов эволюционного поиска, таких как генетические алгоритмы, метод искусственных иммунных систем и др. Данный метод является прямым и не зависит от начального приближения решения задачи. Отсутствие чувствительности метода дифференциальной эволюции к начальному приближению достигается за счет того, что на каждой итерации оптимизируется не одно возможное решение, а одновременно рассматривается их совокупность, что позволяет увеличить область поиска. Метод дифференциальной эволюции позволяет за небольшое время найти приближенное значение параметров оптимального управления процессом. В работе [15] показано, что для решения оптимизационных задач с помощью метода дифференциальной эволюции затрачивается меньше времени по сравнению с другими стохастическими методами оптимизации.

Целью работы является разработка численного алгоритма решения задачи оптимального управления с терминально-фазовыми ограничениями на основе методов штрафов и дифференциальной эволюции.

**1. Постановка задачи.** Пусть динамика управляемого процесса описывается системой обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\frac{dx_i}{dt} = f_i(x(t), u(t), t), \quad i = \overline{1, n}, \quad (1.1)$$

с начальными условиями

$$x_i(0) = x_i^0, \quad i = \overline{1, n}, \quad (1.2)$$

где  $x_i(t) = [x_1(t), \dots, x_n(t)]^T$  – фазовые переменные,  $u(t) \in D_u \subseteq \mathbf{R}$  – переменная управления,  $D_u$  – множество допустимых значений управления,  $t \in [0, \tau]$  – время,  $f_i(x(t), u(t), t)$  – непрерывные вместе со своими частными производными функции.

Управление  $u(t)$  принадлежит классу кусочно-постоянных функций  $u(t) = u_j, \quad t \in [t_j, t_{j+1}]$ ,  $j = \overline{0, r}$ , где  $r$  – число моментов переключений при разбиении  $t_0 < t_1 < \dots < t_{r+1}$ ,  $t_0 = 0$ ,  $t_{r+1} = \tau$ . Множество допустимых значений управления  $D_u$  задается неравенством:

$$u_{\min} \leq u(t) \leq u_{\max}, t \in [0, \tau]. \quad (1.3)$$

Положим, что в конечный момент времени на фазовые переменные наложены ограничения:

$$\varphi_j(x(\tau)) = 0, j = \overline{1, m}, \quad (1.4)$$

$$\varphi_j(x(\tau)) \leq 0, j = \overline{m+1, p}, \quad (1.5)$$

где  $\varphi_j(x)$  — непрерывно-дифференцируемые функции.

Задача оптимального управления процессом, который описывается системой дифференциальных уравнений (1.1) с начальными условиями (1.2), заключается в том, чтобы найти управление  $u^*(t) \in D_u$ , при которой выполняются ограничения (1.4), (1.5) и достигается минимум критерия оптимальности:

$$I(u) = \varphi_0(x(\tau)). \quad (1.6)$$

Критерий оптимальности (1.6) представляет собой терминальный функционал. Будем рассматривать задачу Майера, так как к ней можно свести задачи Лагранжа и Больца, добавив к системе (1.1) дополнительное уравнение и граничное условие.

**2. Эволюционный алгоритм решения задачи оптимального управления с терминально-фазовыми ограничениями.** Приведем способ решения задачи оптимального управления с терминально-фазовыми ограничениями на основе метода штрафных функций и дифференциальной эволюции.

Для перехода от задачи с терминально-фазовыми ограничениями к задаче без ограничений введем в рассмотрение вспомогательный функционал:

$$J(u) = I(u) + R(u, s^k) \rightarrow \min, \quad (2.1)$$

где

$$R(u, s^k) = \frac{s^k}{2} \left( \sum_{j=1}^m (\varphi_j(x)) ^2 + \sum_{j=m+1}^p (g_j(x))^2 \right)$$

— штрафной функционал,  $s^k$  — параметр штрафа, вычисляемый на  $k$ -й итерации по формуле  $s^k = b \cdot s^{k-1}$ ,  $b > 1$  — параметр увеличения штрафа;  $g_j(x) = 0$ , если выполнено условие (1.5), иначе  $g_j(x) = \varphi_j(x(\tau))$ .

Чтобы найти решение задачи оптимального управления без ограничений (1.4), (1.5) с целью минимизации функционала (2.1), применим метод дифференциальной эволюции. Работа метода основана на имитации эволюционных процессов, которым подвергаются векторы-индивиды [16, 17].

Пусть математическим аналогом вектора-индивида является управление  $u = (u_0, u_1, \dots, u_r)$ , где  $u_i = u(t_i)$ ,  $t_i \in [0, \tau]$ ,  $i = 0, r$ ,  $t_0 = 0$ ,  $t_{r+1} = \tau$ . Множеством возможных решений задачи оптимального управления, называемым популяцией, будет набор из  $P$  векторов  $u_j = (u_{j0}, u_{j1}, \dots, u_{jr})$ ,  $j = 1, P$ . Каждому вектору ставится в соответствие значение фитнес-функции, которой является критерий оптимальности (2.1). Для этого необходимо найти численное решение системы дифференциальных уравнений (1.1) с начальными условиями (1.2).

Алгоритм решения задачи оптимального управления (1.1)–(1.6) состоит из следующих шагов.

Шаг 1. Задать параметры метода штрафов: начальное значение параметра штрафа  $s^0$ , параметр увеличения штрафа  $b > 1$ , параметр завершения поиска решения  $\varepsilon_1 > 0$ .

Задать параметры метода дифференциальной эволюции: параметр скрещивания  $ps \in [0, 1]$ , параметр мутации  $pm \in [0.5, 1]$  [18], параметры завершения вычислений  $d$ ,  $\varepsilon_2 > 0$ .

Установить счетчик итераций  $k: = 1$ .

Шаг 2. Заполнить начальную популяцию  $u_j^0 = (u_{j0}^0, u_{j1}^0, \dots, u_{jr}^0)$ ,  $j = \overline{1, P}$ , значениями из области  $D_u$ . Задать начальную популяцию в качестве текущей:  $u_j := u_j^0$ ,  $j = \overline{1, P}$ .

Шаг 3. Вычислить значение функции приспособленности для каждого вектора  $u_j$ ,  $j = \overline{1, P}$ .

Шаг 4. Номеру вектора-мишени присвоить значение 1:  $mish:=1$ .

Шаг 5. Найти в популяции вектор  $u_{best}$  с наилучшим (наименьшим) значением фитнес-функции.

Шаг 6. Выбрать случайным образом два различных вектора  $u_{num1}, u_{num2}$ , причем  $u_{num1} \neq u_{mish}$ ,  $u_{num2} \neq u_{mish}$ ,  $u_{num1} \neq u_{best}$ ,  $u_{num2} \neq u_{best}$ . Применить оператор мутации, в результате создать новый вектор  $u_{mut}$  :

$$u_{mut} := u_{best} + pm(u_{num1} - u_{num2}).$$

Шаг 7. Применить оператор скрещивания для вектора, полученного в результате мутации, и вектора-мишени. Создать пробный вектор  $u_{prob}$  по правилу:

$$u_{probi} = \begin{cases} u_{muti}, & q_i \leq ps, \\ u_{mishi}, & q_i > ps, \end{cases} \quad i = \overline{0, r},$$

где  $q_i$  – случайное число из отрезка  $[0, 1]$ .

Шаг 8. Вычислить значение функции приспособленности для пробного вектора  $u_{prob}$ .

Шаг 9. Обновить популяцию. Если значение критерия оптимальности (2.1), вычисленное для  $u_{prob}$ , меньше его значения, найденного для  $u_{mish}$ , то в новую популяцию вместо вектора-мишени поместить пробный вектор, т.е.  $u_{mish} := u_{prob}$ . Иначе вектор-мишень  $u_{mish}$  остается в популяции.

Шаг 10. Если  $mish < P$ , то  $mish := mish + 1$ , перейти к шагу 5, иначе перейти к шагу 11.

Шаг 11. Проверить условие окончания поиска решения задачи оптимального управления без терминальных ограничений. Вычислить расстояние между векторами текущей  $u_j^k$  и предыдущей  $u_j^{k-1}$  популяций  $\rho_{ij}$ ,  $i, j = \overline{1, P}$ , и изменение фитнес-функций  $\Delta_{ij}$  :

$$\rho_{ij} = \rho(u_i^k, u_j^{k-1}) = \|u_i^k - u_j^{k-1}\| = \sqrt{\sum_{l=0}^r (u_{il}^k - u_{jl}^{k-1})^2},$$

$$\Delta_{ij} = \Delta(u_i^k, u_j^{k-1}) = |J(u_i^k) - J(u_j^{k-1})|, \quad i, j = \overline{1, P}.$$

Если на протяжении  $d$  поколений выполнены условия  $\rho_{ij} < \varepsilon_2$ ,  $\Delta_{ij} < \varepsilon_2$ , т.е. происходит незначительное изменение популяции и фитнес-функции, то остановить поиск решения и выбрать из последней популяции вектор  $u^{best}$ , которому соответствует наименьшее значение фитнес-функции. В противном случае увеличить счетчик итераций  $k$  на 1 и перейти к шагу 4.

Шаг 12. Проверить условие окончания работы алгоритма. Если  $R(u^{best}, s^k) > \varepsilon_1$ , то увеличить значение штрафа по формуле  $s^{k+1} = b \cdot s^k$  и перейти к шагу 4.

Если  $R(u^*, s^k) \leq \varepsilon_1$ , то остановить работу алгоритма. Приближенным решением задачи оптимального управления с терминально-фазовыми ограничениями  $u^*$  будет вектор  $u^{best}$  из последней популяции.

**3. Вычислительный эксперимент.** Используя описанный алгоритм, найдем численное решение задачи оптимального управления каталитическим процессом с терминальными ограничениями. Рассмотрим реакцию синтеза бензилиденбензиламина под действием  $FeCl_3 \times 6H_2O$ , схема и кинетические уравнения стадий  $w_j(C, T)$  которой имеют следующий вид [19]:



где  $X_1$  – бензиламин,  $X_2$  – четыреххлористый углерод,  $X_3$  – хлорбензиламин,  $X_4$  – хлороформ,  $X_5$  – 1-фенилметанимин,  $X_6$  – хлористый водород,  $X_7$  – бензилиденбензиламин,  $X_8$  – аммиак,  $X_9$  – хлористый аммоний,  $C_i$  – значение концентрации  $i$ -го вещества (моль/л,  $i = \overline{1,9}$ ),  $k_j$  – константа скорости  $j$ -й стадии реакции (л/(моль·ч) для  $j = 1, 3, 4$  1/ч для  $j = 2$ ), рассчитываемая исходя из уравнения Аррениуса:

$$k_j(T) = k_{0j} \exp\left(-\frac{E_j}{RT}\right),$$

где  $k_{0j}$  – предэкспоненциальный множитель (л/(моль·ч) для  $j = 1, 3, 4$ ; 1/ч для  $j = 2$ ),  $E_j$  – значение энергии активации  $j$ -й стадии, Дж/моль,  $T$  – температура, К,  $R$  – универсальная газовая постоянная (8.31 Дж/(моль·К)).

Система дифференциальных уравнений материального баланса периодического реактора идеального смешения для реакции (3.1) имеет вид [19]:

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{F_i(x, T) - x_i F_n(x, T)}{N}, \quad F_i = \sum_{j=1}^4 v_{ij} W_j, \quad i = \overline{1,9}, \quad (3.2)$$

$$\frac{dN}{dt} = F_n(x, T) = \sum_{j=1}^4 W_j \sum_{i=1}^9 v_{ij} \quad (3.3)$$

с начальными условиями

$$x_i(0) = x_i^0, \quad i = \overline{1,9}, \quad N(0) = 1, \quad (3.4)$$

где  $x_i$  – концентрация  $i$ -го вещества, мольная доля,  $N = C/C_0$  – относительное изменение числа молей реакционной среды,  $C$  и  $C_0$  – суммарная концентрация веществ и ее начальное значение, моль/л,  $v_{ij}$  – матрица стехиометрических коэффициентов ( $i = \overline{1,9}, j = \overline{1,4}$ ),  $W_j = w_j/C_0$  – приведенная скорость  $j$ -й стадии реакции, 1/ч.

Значения приведенных кинетических констант реакции синтеза бензилиденбензиламина при  $T = 293$  К приведены в работе [19] (1/ч):  $K_1 = 1.5 \times 10^{-2}$ ,  $K_2 = 4.7$ ,  $K_3 = 13.4$ ,  $K_4 = 0.6$ . Значения истинных констант  $k_1, k_2, k_4$  определяются по формуле  $k_i = K_i/C_0$ ,  $i = 1, 3, 4$ , а значение  $k_2 = K_2$ . Значения энергий активации стадий реакции равны (кДж/моль):  $E_1 = 44.35$ ,  $E_2 = 32.22$ ,  $E_3 = 6.69$ ,  $E_4 = 1.67$ .

Пусть управлением является температура  $T$ , на значения которой наложены технологические ограничения:

$$285 \text{ К} \leq T(t) \leq 373 \text{ К}, \quad t \in [0, \tau]. \quad (3.5)$$

Фазовыми переменными, описывающими состояние процесса, являются концентрации веществ  $x_i$ ,  $i = \overline{1,9}$ , и относительное изменение числа молей реакционной среды  $N$ .

Целевой продукт реакции (3.1) – бензилиденбензиламин  $X_7$ . Поэтому зададим следующий критерий оптимальности:

$$I(u) = x_7(\tau), \quad (3.6)$$

выражающий значение концентрации  $X_7$  в конце реакции.

Поскольку выход  $X_7$  зависит от конверсии исходных веществ, потребуем, чтобы конверсия  $X_1$  и  $X_2$  в конце реакции была не ниже 75%, т.е. выполнялось условие:

$$1 - (x_1(\tau) + x_2(\tau)) \geq 0.75. \quad (3.7)$$

Тогда задача оптимального управления реакцией синтеза бензилиденбензиламина формулируется следующим образом. Требуется найти оптимальный температурный режим  $T^* = T^*(t)$  процесса, описываемого системой дифференциальных уравнений (3.2), (3.3) с начальными

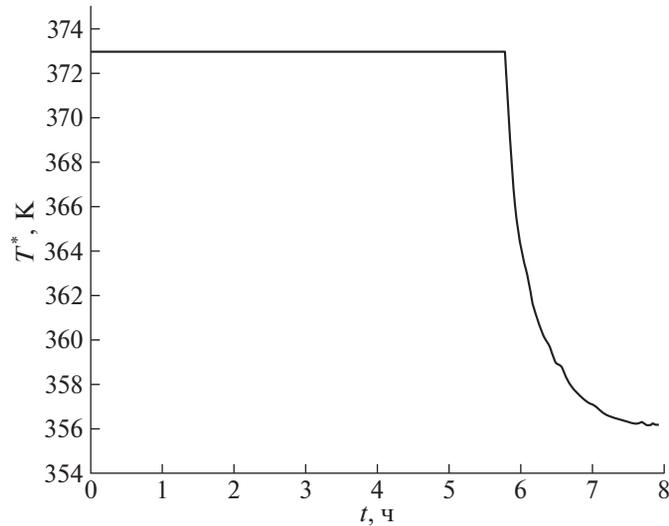


Рис. 1. Субоптимальный температурный режим.

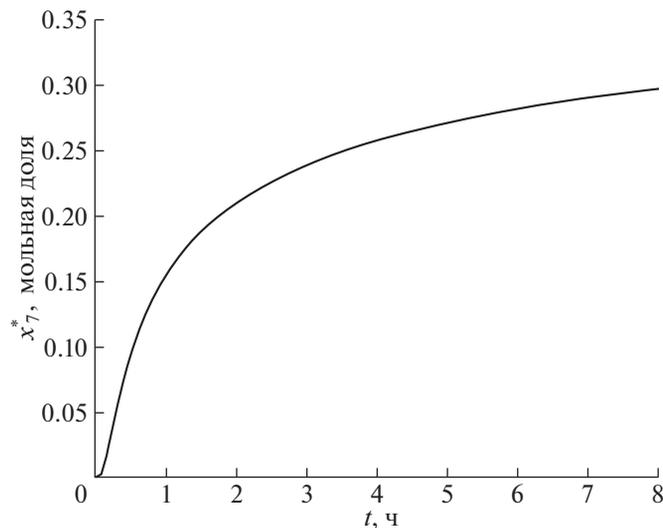


Рис. 2. Динамика концентрации бензилиденбензиламина.

условиями (3.4), который с учетом ограничений (3.5), (3.7) обеспечивает достижение максимума критерия оптимальности (3.6).

Численное решение задачи (3.1)–(3.7) найдено на основе методов штрафов и дифференциальной эволюции с помощью программы на языке Delphi, реализующей решение задачи оптимального управления реакцией синтеза бензилиденбензиламина продолжительностью  $\tau = 8$  ч. Для решения системы дифференциальных уравнений (3.2), (3.3) с начальными условиями

$$x_1(0) = 0.51, x_2(0) = 0.49, x_i(0) = 0, i = \overline{3,9}, N(0) = 1, \quad (3.8)$$

применен метод Рунге–Кутты четвертого порядка.

Задача решена со следующими параметрами алгоритма: начальное значение параметра штрафа  $s^0 = 0.1$ , параметр увеличения штрафа  $b = 10$ , параметр скрещивания  $ps = 0.5$ , параметр мутации  $pm = 0.7$ , параметры завершения поиска решения  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 10^{-4}$ ,  $d = 5$ .

В результате проведенных расчетов найдено приближенное решение задачи оптимального управления (3.1)–(3.7). Определен температурный режим  $T^*(t)$  реакции синтеза бензилиденбензиламина (рис. 1), при котором достигается наибольшее значение целевого продукта реакции, равное 0.2974 мольных долей (рис. 2). При этом конверсия исходных веществ составляет 72.8% (рис. 3).

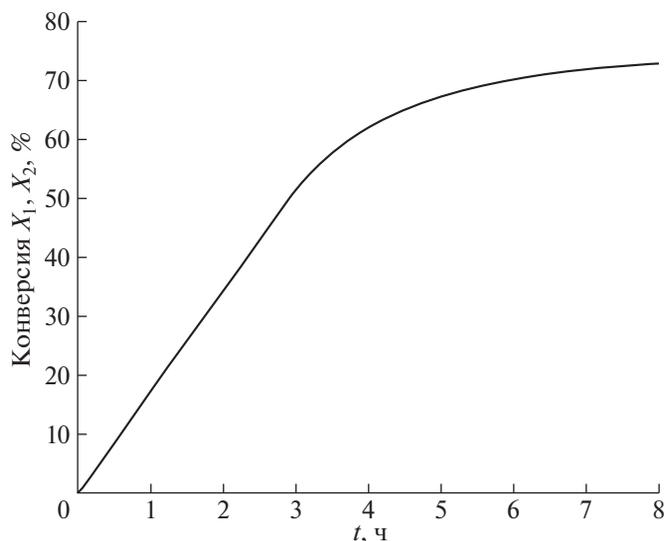


Рис. 3. Динамика конверсии исходных веществ.

Как видно из рис. 1 и 3, температура не меняется на протяжении 6 ч, а прирост конверсии  $X_1$ ,  $X_2$  начинает снижаться примерно через 3 ч, что связано с особенностями протекания каталитического процесса при заданных начальных условиях.

Задача оптимального управления процессом синтеза бензилиденбензилимина решена также с помощью метода вариаций в пространстве управлений [20], реализованного авторами в программе на языке программирования Delphi. Для выбора начального приближения решения задачи найдено численное решение системы дифференциальных уравнений (3.2), (3.3) с начальными условиями (3.4) при различных допустимых значениях температуры, приведенных в таблице. Так как наибольшее значение концентрации  $x_7$  в конце реакции достигается при температуре, равной верхней границе допустимых значений, ее значение принято в качестве начального приближения. Задача решена с шагом  $h=0.1$  и количеством точек разбиения интервала времени  $nt=100$ . Результаты расчетов показали, что наибольшее значение концентрации бензилиденбензиламина, равное 0.2971 мольных долей, достигается при температурном режиме  $T_{var}^*$ , приведенном на рис. 4. Конверсия веществ  $X_1$ ,  $X_2$  при этом равна 72.1%.

Вычислим относительные погрешности векторов  $T^*$  и фазовых переменных  $x_1^*$ ,  $x_2^*$ ,  $x_7^*$  с помощью формул:

$$\delta(T^*) = \frac{\|T_{var}^* - T^*\|}{\|T_{var}^*\|} \cdot 100\%, \quad \delta(x_i^*) = \frac{\|x_{vari}^* - x_i^*\|}{\|x_{vari}^*\|} \cdot 100\%, \quad i = 1, 2, 7.$$

Здесь

$$\|T_{var}^* - T^*\| = \sqrt{\sum_{j=1}^q |T_{varj}^* - T_j^*|^2}, \quad \|T_{var}^*\| = \sqrt{\sum_{j=1}^q |T_{varj}^*|^2}, \quad \|x_{vari}^* - x_i^*\| = \sqrt{\sum_{j=1}^{q+1} |x_{varij}^* - x_{ij}^*|^2},$$

$$\|x_{vari}^*\| = \sqrt{\sum_{j=1}^{q+1} |x_{varij}^*|^2},$$

где  $x_{vari}^*$  – векторы значений концентраций веществ, вычисленные при температурном режиме  $T_{var}^*$ .

Относительные погрешности вектора температуры, векторов концентраций исходных веществ и целевого вещества составили, %:  $\delta(T^*) = 3.27$ ,  $\delta(x_1^*) = 4.13$ ,  $\delta(x_2^*) = 4.42$ ,  $\delta(x_7^*) = 4.55$ . Относительная погрешность значения критерия оптимальности равна  $\delta(I) = 0.1\%$ . Отсюда

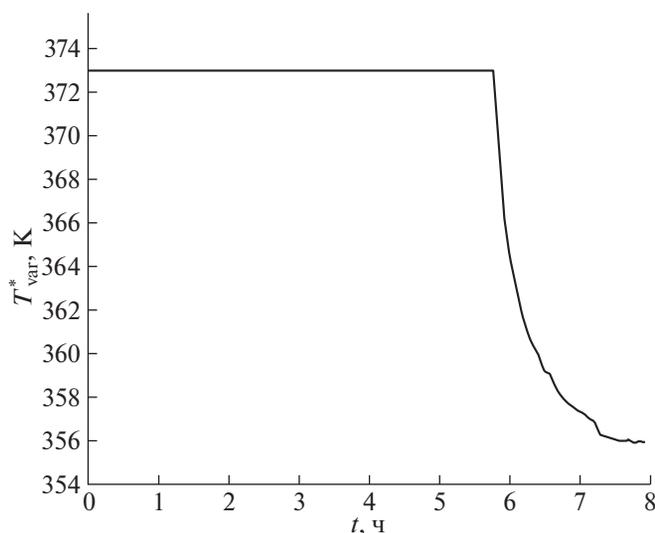


Рис. 4. Субоптимальный температурный режим, вычисленный с помощью метода вариаций в пространстве управлений.

Таблица. Зависимость значения концентрации бензилиденбензиламина от температуры

T, К	Конверсия $X_1$ и $X_2$ , %	Концентрация $X_7$ , мольная доля
285	5.19	0.013
295	9.54	0.023
305	15.59	0.039
315	22.98	0.058
325	31.04	0.079
335	39.05	0.100
345	46.46	0.120
355	52.97	0.138
365	58.47	0.154
373	62.16	0.164

видно, что решение, полученное на основе метода штрафов и дифференциальной эволюции, удовлетворительно согласуется с решением, найденным с помощью метода вариаций в пространстве управлений.

Решение задачи оптимального управления (3.1)–(3.7) определено также для реакции синтеза бензилиденбензиламина продолжительностью  $\tau=6, 4, 2$  ч. Результаты вычислений показали, что с уменьшением времени реакции происходит снижение значения концентрации целевого продукта ( $x_7(6) = 0.2541$ ,  $x_7(4) = 0.1885$ ,  $x_7(2) = 0.1216$ ) и значения конверсии исходных веществ (70.72, 65.27 и 50.34% соответственно), что связано с уменьшением времени контактирования реагентов. Относительные погрешности вектора температуры, по сравнению с температурной кривой, вычисленной с помощью вариационного метода для  $\tau=6, 4, 2$  ч, равны 2.13, 1.21 и 1.98% соответственно.

Также проведено пять вычислительных экспериментов с варьированием значений начальных концентраций (3.8) исходных веществ. Выявлено, что с увеличением начальной концентрации вещества  $X_1$  в реакционной системе повышается концентрация целевого продукта  $X_7$  и конверсия исходных веществ. Это связано с тем, что реагент  $X_1$  расходуется на первой стадии образования вещества  $X_3$ , из которого образуется  $X_5$ , а затем  $X_7$ , а также непосредственно участвует в образовании  $X_7$  (стадия 3 реакции (3.1)). Вещество  $X_2$  расходуется по одному пути образования целевого вещества  $X_7$ , поэтому его концентрации в реакционной смеси требуется меньше по сравнению с  $X_1$ . Наибольшее значение критерия оптимальности (3.6), равное 0.3451 мольных долей, достигается при следующем наборе начальных концентраций исходных веществ:

$$x_1(0) = 0.7, x_2(0) = 0.3. \quad (3.9)$$

При этом на протяжении всего процесса ( $\tau = 8$  ч) необходимо поддерживать температуру, равную 373 К, а конверсия исходных веществ равна 81.56%. Отклонение от температурного режима, вычисленного с помощью метода вариаций в пространстве управлений, составляет 2.67%.

Также задача поиска оптимального температурного режима для реакции (3.1) решена при начальных условиях (3.9), но граничное значение конверсии в конце реакции было повышено до 80 и 90%. Решение задачи оптимального управления для этих случаев практически не отличается от решения, найденного для условия (3.7), что связано с предельными возможностями данного каталитического процесса.

**Заключение.** Для поиска решения задачи оптимального управления с терминально-фазовыми ограничениями можно применить метод штрафов, позволяющий избавиться от ограничений путем введения штрафной функции. Затем для решения новой задачи оптимального управления без ограничений используется метод дифференциальной эволюции. Метод дифференциальной эволюции легко реализуем на практике и позволяет найти приближенное решение оптимизационной задачи. Особенность предложенного подхода состоит в том, что его можно применять для получения приближенного решения задач оптимального управления с терминально-фазовыми ограничениями при неизвестном начальном приближении, которое обычно задается исследователем, исходя из смысла поставленной задачи.

Предложенный способ решения задачи оптимального управления с терминально-фазовыми ограничениями сформулирован в виде численного алгоритма. Работа алгоритма апробирована на каталитическом процессе синтеза бензилиденбензиламина. С помощью программы, реализующей алгоритм на основе метода штрафов и метода дифференциальной эволюции, найдены численные решения задач поиска оптимального температурного режима при наличии ограничений, накладываемых на управление и фазовые переменные. Показано, что относительные погрешности решений по сравнению с решениями, полученными с помощью метода вариаций в пространстве управлений, не превышают 5%.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Понтрягин Л.С., Болтянский В.Г., Гамкрелидзе Р.В., Мищенко Е.Ф. Математическая теория оптимальных процессов. М.: Химия, 1976.
2. Карамзин Д.Ю. Принцип максимума Понтрягина для задачи оптимального управления с фазовыми ограничениями при ослабленных предположениях управляемости // Вопросы теории безопасности и устойчивости систем. 2018. № 20. С. 46–61.
3. Арутюнов А.В., Жуков Д.А. Исследование одной линейной задачи оптимального управления с фазовыми ограничениями // Владикавказский математический журнал. 2010. Т. 12. № 1. С. 3–9.
4. Longla M. Pontryagin's Principle of Maximum for Linear Optimal Control Problems with Phase Constraints in Infinite Dimensional Spaces // Discrete and Continuous Models and Applied Computational Science. 2008. № 4. P. 5–19.
5. Bergounioux M., Bourdin L. Pontryagin Maximum Principle for General Caputo Fractional Optimal Control Problems with Bolza Cost and Terminal Constraints // ESAIM: Control, Optimisation and Calculus of Variations. 2020. V. 26. P. 38.
6. Smith S., Mayne D.Q. Exact Penalty Algorithm for Optimal Control Problems with Control and Terminal Constraints // Intern. J. Control. 2007. V. 48. № 1. P. 257–271.
7. Gugat M., Zuazua E. Exact Penalization of Terminal Constraints for Optimal Control Problems // Optimal Control Applications and Methods. 2016. V. 37. № 6. P. 1329–1354.
8. Xiangyu Gao, Xian Zhang, Yantao Wang. A Simple Exact Penalty Function Method for Optimal Control Problem with Continuous Inequality Constraints // Abstract and Applied Analysis. 2014. V. 2014. Article ID752854.
9. Malisani P., Chaplais F., Petit N. An Interior Penalty Method for Optimal Control Problems with State and Input Constraints of Nonlinear Systems // Optimal Control Applications and Methods. 2014. V. 37. № 1. P. 3–33.
10. Duan Y. Application of Penalty Function Method and the Conjugate Gradient Method in Economic Scheduling of Cascade Hydropower Stations // IFAC Proceedings Volumes. 1986. V. 19. № 10. P. 227–232.
11. Горнов А.Ю. Алгоритмы решения задач оптимального управления с терминальными ограничениями // Вычислительные технологии. 2008. Т. 13. № 4. С. 44–50.
12. Антипина Е.В., Мустафина С.А., Антипин А.Ф. Численный алгоритм идентификации кинетической модели химической реакции // Вестн. Технологического ун-та. 2019. Т. 22. № 9. С. 13–17.
13. Mohamed A.W., Mohamed A.K. Adaptive Guided Differential Evolution Algorithm with Novel Mutation for Numerical Optimization // Intern. J. Machine Learning and Cybernetics. 2019. № 10. P. 253–277.

14. *Xue B., Yao X.* A Survey on Evolutionary Computation Approaches to Feature Selection // IEEE Transactions on Evolutionary Computation. 2016. № 20. P. 606–626.
15. *Ковалевич А.А., Якимов А.И., Албекират Д.М.* Исследование стохастических алгоритмов оптимизации для применения в имитационном моделировании систем // Информационные технологии. 2011. № 8. С. 55–60.
16. *Карпенко А.П.* Эволюционные операторы популяционных алгоритмов глобальной оптимизации // Математика и математическое моделирование. 2018. № 1. С. 59–89.
17. *Mohamed A.W.* A Novel Differential Evolution Algorithm for Solving Constrained Engineering Optimization Problems // J. Intelligent Manufacturing. 2018. № 29. P. 659–692.
18. *Storn R., Price K.* Differential Evolution – A Simple and Efficient Heuristic for Global Optimization over Continuous Spaces // J. Global Optimization. 1997. № 11. P. 341–359.
19. *Ахметов И.В., Губайдуллин И.М., Коледина К.Ф., Сафин Р.Р.* Математическое моделирование и оптимизация реакций синтеза ароматических соединений // Электротехнические и информационные комплексы и системы. 2015. Т. 11. № 2. С. 53–58.
20. *Григорьев И.В., Михайлова Т.А., Мустафина С.А.* О численном алгоритме метода вариаций в пространстве управлений // Фундаментальные исследования. 2015. № 5–2. С. 279–283.