

# Параллельное вычисление оценки приближенно оптимальных управлений

О.В. Фесько

Институт Программных Систем им. А.К. Айламазяна РАН

В статье предложен метод расчета априорной оценки, позволяющей судить о качестве приближенного решения, полученного в ходе работы программы улучшения управления для задач оптимизации динамических систем [1]. Метод реализован в виде параллельного алгоритма, являющегося частью программного комплекса оптимизации динамических систем на множествах управлений. Проведено исследование масштабируемости параллельной реализации программы для решения задач химической технологии и биохимической инженерии.

## 1. Введение

При использовании различных численных методов решения задач оптимального управления крайне важное значение представляет собой возможность получения количественной оценки найденного приближенного управления, которая позволяет судить о точности, близости к точному оптимуму. Такую возможность открывают достаточные условия оптимальности Кротова [2].

В работе [1] рассматривалась задача оптимального управления вида

$$\begin{aligned} \dot{x}(t) &= f(t, x(t), u(t)), \quad x(t_I) = x_I, \quad t \in [t_I, t_F], \\ u(t) &\in D_u = \{u(t) \mid \underline{u} \leq u(t) \leq \bar{u}\}, \quad F(x(t_F)) \rightarrow \min, \end{aligned} \quad (1)$$

где  $x = (x_1, \dots, x_n)^T \in \mathbb{R}^n$ ,  $x_i(t), i = \overline{1, n}$  – кусочно-гладкие. Управление  $u = (u_1, \dots, u_p)^T \in \mathbb{R}^p$  принадлежит одному из двух классов: кусочно-линейному

$$u(t) = \frac{((w^{2i+1} - w^{2i})t - (\tau_i w^{2i+1} - \tau_{i+1} w^{2i}))}{(\tau_{i+1} - \tau_i)}, \quad t \in [\tau_i, \tau_{i+1}], \quad (2)$$

или кусочно-постоянному  $u(t) = w^i, t \in [\tau_i, \tau_{i+1}], i = \overline{0, m}$ , где  $m$  – число моментов переключений при разбиении  $t_I = \tau_0 < \tau_1 < \tau_2 < \dots < \tau_{m+1} = t_F$ . На параметры управления наложены ограничения типа  $w^i \in W = \{w^i \mid \underline{u} \leq w^i \leq \bar{u}\}$ .

Задача (1) была сведена к задаче условной конечномерной минимизации функции многих переменных  $G(w, \tau)$  [3, 4]. Процесс решения полученной задачи состоит в поочередном применении численных алгоритмов: метода Рунге–Кутты для решения задачи Коши и комбинации метода Ньютона с модифицированным методом градиентного спуска для минимизации многоэкстремальной функции  $G(w, \tau)$ . Требуется количественно оценить полученное при использовании данного подхода приближенное управление.

## 2. Оценки приближенно оптимального решения

В силу рассматриваемых классов управлений непрерывную задачу (1) сведем к дискретной задаче оптимального управления. Введем множество индексов  $K = \{0, 1, \dots, m+1\}$  для моментов переключений  $t_I = \tau_0 < \tau_1 < \tau_2 < \dots < \tau_{m+1} = t_F$ , где  $m$  – число моментов переключений. В случае *кусочно-постоянного* управления  $u(t) = w(k), t \in [\tau_k, \tau_{k+1}], k \in K$ , эквивалентная непрерывной задаче (1) дискретная задача примет вид

$$\begin{aligned} z(k+1) &= \mu(k, z(k), w(k)), \quad k \in \{0, 1, \dots, m+1\}, \\ z(0) &= z_0 = x_I, \quad w(k) \in W = \{w(k) \mid \underline{u} \leq w(k) \leq \bar{u}\}, \\ F(z(m+1)) &\rightarrow \min, \end{aligned} \quad (3)$$

где функция  $\mu(k, z(k), w(k))$  — решение задачи Коши

$$\dot{x}(\xi) = f(\xi, x(\xi), w(k)), \quad \xi \in [\tau_k, \tau_{k+1}], \quad x(\tau_k) = z(k),$$

взятое в точке  $\xi = \tau_{k+1}$ .

Для случая *кусочно-линейного* управления  $u(t) = w^1(k) + w^2(k)t$ ,  $t \in [\tau_k, \tau_{k+1}]$ , эквивалентная дискретная задача будет выглядеть как

$$\begin{aligned} z(k+1) &= \eta(k, z(k), w^1(k), w^2(k)), \quad k \in \{0, 1, \dots, m+1\}, \\ z(0) &= z_0 = x_I, \quad w(k) \in W, \quad F(z(m+1)) \rightarrow \min, \end{aligned} \quad (4)$$

где функция  $\eta(k, z(k), w^1(k), w^2(k))$  — решение задачи Коши

$$\dot{x}(\xi) = f(\xi, x(\xi), w^1(k) + w^2(k)\xi), \quad \xi \in [\tau_k, \tau_{k+1}], \quad x(\tau_k) = z(k),$$

взятое в точке  $\xi = \tau_{k+1}$ .

Пусть  $(\tilde{z}(k), \tilde{w}(k))$  — допустимое решение задачи (3). Любой функции  $\varphi(k, z)$  согласно [5] соответствует нижняя граница минимизируемого функционала  $F(x(t_F))$  и оценка  $\Delta(z, w, \varphi) \geq 0$  его близости к оптимуму. Запишем оценочную функцию Кротова для задачи (3):

$$\begin{aligned} \Delta(\tilde{z}, \tilde{w}, \varphi) &= F(\tilde{z}(m+1)) - \min_{z \in \mathbb{R}^n} (F(z) + \varphi(m+1, z)) + \\ &+ \sum_{k=1}^m \max_{\substack{w \in W, \\ z \in \mathbb{R}^n}} (\varphi(k+1, \mu(k, z, w)) - \varphi(k, z)) + \max_{w \in W} \varphi(1, \mu(0, z_0, w)). \end{aligned} \quad (5)$$

Оценочная функция Кротова для задачи (4) имеет вид:

$$\begin{aligned} \Delta(\tilde{z}, \tilde{w}^1, \tilde{w}^2, \varphi) &= F(\tilde{z}(m+1)) - \min_{z \in \mathbb{R}^n} (F(z) + \varphi(m+1, z)) + \\ &+ \sum_{k=1}^m \max_{\substack{w^1, w^2 \in W, \\ z \in \mathbb{R}^n}} (\varphi(k+1, \eta(k, z, w^1, w^2)) - \varphi(k, z)) + \\ &+ \max_{w^1, w^2 \in W} \varphi(1, \eta(0, z_0, w^1, w^2)), \end{aligned} \quad (6)$$

где  $(\tilde{z}(k), \tilde{w}^1(k), \tilde{w}^2(k))$  — допустимое решение задачи.

Если функция  $\varphi(k, z)$  удовлетворяет условиям (схема Беллмана [2])

$$\begin{aligned} \varphi(k, z) &= \max_{w^1, w^2 \in W} \varphi(k+1, \eta(k, z, w^1, w^2)), \\ \varphi(m+1, z) &= -F(z), \quad k \in \{0, 1, \dots, m+1\}, \end{aligned} \quad (7)$$

то формулы оценок принимают более простой вид:

$$\Delta(\tilde{z}, \tilde{w}, \varphi) = F(\tilde{z}(m+1)) + \varphi(0, z_0), \quad \Delta(\tilde{z}, \tilde{w}^1, \tilde{w}^2, \varphi) = F(\tilde{z}(m+1)) + \varphi(0, z_0) \quad (8)$$

вместо формул (5) и (6) соответственно. Управление, на котором достигается максимум в равенствах (7), может быть выбрано в качестве оптимального решения задач (3) и (4).

### 3. Описание алгоритма

Параллельный алгоритм поиска начального приближения для решения задачи оптимального управления (1) и вычисления количественной оценки приближенно оптимального управления представлен на схеме 1 и состоит из нескольких блоков.

На начальном этапе формулируется задача оптимального управления: задаются ее параметры, правые части системы дифференциальных уравнений  $f(t, x(t), u(t))$  и терминальный функционал качества  $F(x(t_F))$  в виде синтаксически правильных выражений языка C++. Далее исполняются следующие блоки:

**Блок А: Вычисление начального приближения для ЗОУ.**

**Шаг 1.** Задание параметров: начального состояния системы  $z_0 = x_I$ ; ограничений на управление  $\underline{u}, \bar{u}$ ; шага  $\tilde{h}$  для построения расчетной сетки по управлению, моментов переключений  $\tau$ .

**Шаг 2.** Построение сетки по управлению  $\{\underline{u}, \underline{u} + \tilde{h}, \dots, \bar{u} - \tilde{h}, \bar{u}\}$ .

**Шаг 3.** Рекурсивно разрешается цепочка относительно функции Кротова  $\varphi(k, z)$  на построенной сетке по управлению.

**Шаг 4.** Вычисление траекторий  $\tilde{z}$ , соответствующих найденному оптимальному управлению  $\tilde{u}$ .

**Блок В: Улучшение управления [4].**

**Шаг 1.** Задание начального состояния системы  $x_I$ ; управления  $\tilde{u}$  (найденного в блоке А), области поиска, моментов переключений управления  $\tau$ .

**Шаг 2.** При данном управлении численно интегрируется система обыкновенных дифференциальных уравнений (метод Рунге-Кутты 4-го порядка или метод Рунге-Кутты-Фельберга с адаптивным шагом).

**Шаг 3.** Вычисляется значение целевого функционала  $G(\tilde{u}, \tau)$ .

**Шаг 4.** Вызывается функция поиска очередного приближения к решению.

**Шаг 5.** Проверка условий останова. Если условия останова не выполняются, переходим к шагу 2, иначе блок В завершает свою работу.

**Блок С: Вычисление оценки приближенно оптимального решения.**

**Шаг 1.** Задание параметров: начального состояния системы  $z_0 = x_I$ ; допустимого управления  $u^*$  (найденного в блоке В), которое требуется оценить; ограничений на управление  $\underline{u}, \bar{u}$ ; шага  $\bar{h} \leq \tilde{h}$  для построения расчетной сетки по управлению, моментов переключений  $\tau$ .

**Шаг 2.** Вычисление траекторий  $z^*$  и функционала качества  $F(z^*)$ , соответствующих заданному допустимому управлению.

**Шаг 3.** Построение сетки по управлению  $\{u^*, \underline{u}, \underline{u} + \bar{h}, \dots, \bar{u} - \bar{h}, \bar{u}\}$ .

**Шаг 4.** Рекурсивно разрешается цепочка относительно функции Кротова  $\varphi(k, z)$  на построенной сетке по управлению.

**Шаг 5.** Вычисление оценки согласно формулам (8).

**Шаг 6.** Вывод результатов в виде текстовых файлов и графиков. Завершение работы программы.

Шаги 3 и 4 рекурсивного вычисления функции Кротова  $\varphi(k, z)$  блоков **A** и **C** соответственно могут выполняться независимо для различных наборов управлений, сгенерированных при построении сетки, за счет чего алгоритм допускает параллельное исполнение.

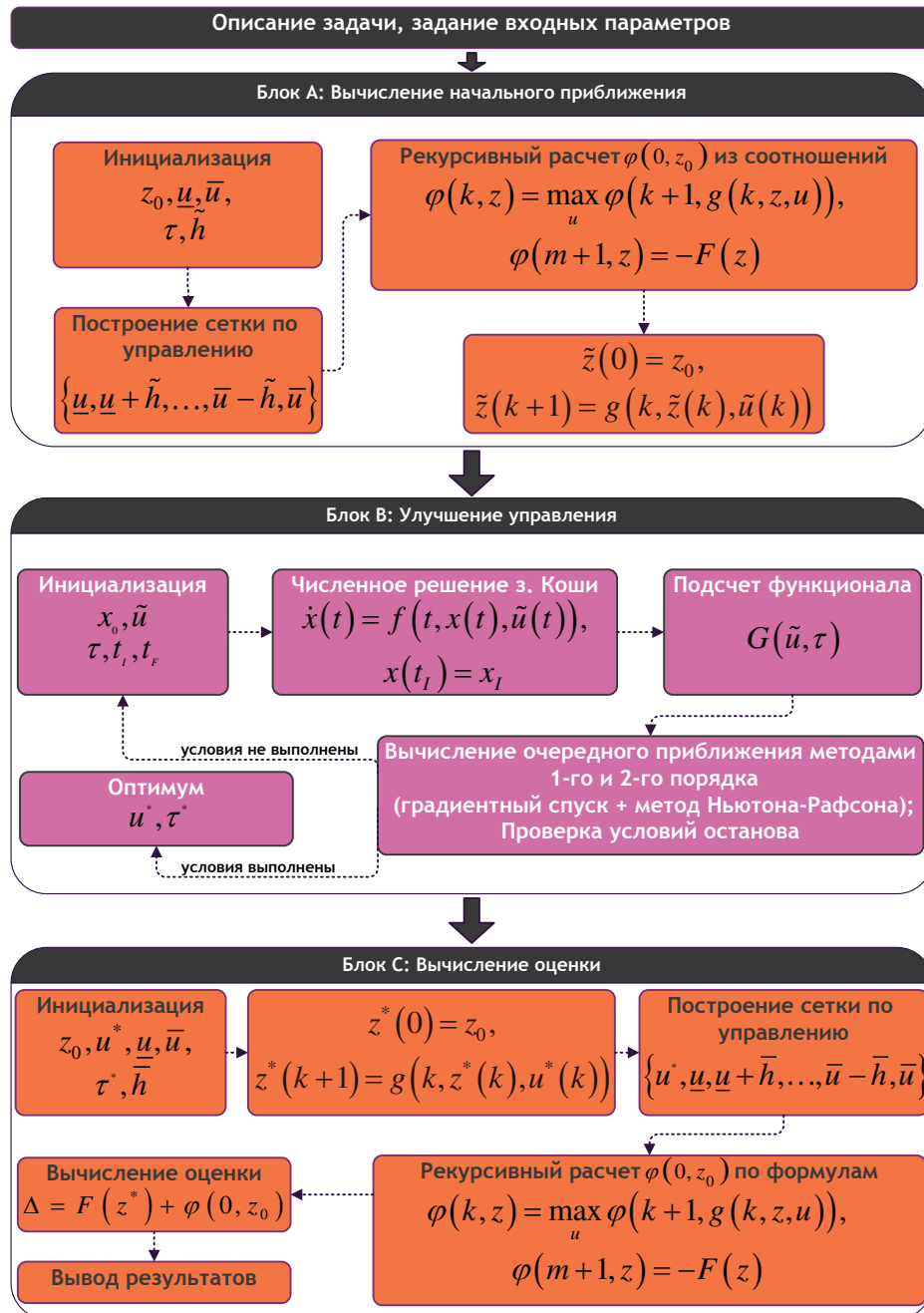


Рис. 1. Вычислительная схема решения поставленной задачи

Распараллеливание вычислительного процесса осуществляется по схеме процессорной фермы. Главный процессор считывает входные данные и формирует сетку по управлению, после чего распределяет наборы управлений между процессорами-подчиненными, на которых производится рекурсивный расчет функции Кротова; после этого главный процессор собирает результаты.

Параллельный алгоритм для решения задачи оптимального управления (1), в основе которого лежит геометрическая декомпозиция расчетной области, описан в работах [3, 4].

## 4. Вычислительные эксперименты

Программа решения задачи оптимального управления была реализована на языке C++, а в параллельной версии исполнена в среде OpenTS на языке T++ [6]. Преимущество данного подхода заключается в том, что данная система позволяет в динамике выполнять распараллеливание кусков кода программы, планировку вычислений, распределение данных по узлам и пр. без участия пользователя.

Расчеты проводились на высокопроизводительном вычислительном кластере «BLADE» Института Программных Систем РАН, оснащенный 8 вычислительными узлами с двумя процессорами Intel Xeon E5472 (4 ядра по 3.0 ГГц) и 16 ГБ оперативной памяти на каждом узле. Используя предложенный выше подход, решим следующие задачи.

### 4.1. Задача об оптимизации бифункциональной каталитической смеси

Рассматривается трубчатый реактор, в котором протекает процесс получения бензола из метилциклопентана. Процедура состоит из смешения двух монофункциональных каталитических компонентов, приводящих к реакциям гидрирования и изомеризации. Роль управления  $u$  играет массовая доля гидрирующего катализатора (отношение массы компонента гидрогенизации к общей массе катализатора). Характерное время  $t$  определяется отношением массы катализатора в конкретном разделе реактора к входному молярному расходу метилциклопентана. На выходе из реактора, финальный момент времени  $t_F$  определяется из отношения общей массы катализатора в реакторе к молярному расходу метилциклопентана в реакторе.

Задача оптимизации состоит в отыскании оптимальной каталитической смеси по всей длине реактора с целью максимизации концентрации бензола. То есть необходимо максимизировать функционал

$$F(x(t_F)) = x_7(t_F) \rightarrow \max,$$

где  $t_F = 2000 \text{ г} \cdot \text{ч}/\text{моль}$ .

Имеющие место химические реакции описываются системой дифференциальных уравнений

$$\begin{aligned} \dot{x}_1(t) &= -k_1 x_1, & \dot{x}_2(t) &= k_1 x_1 - (k_2 + k_3) x_2 + k_4 x_5, \\ \dot{x}_3(t) &= k_2 x_2, & \dot{x}_4(t) &= -k_6 x_4 + k_5 x_5, \\ \dot{x}_5(t) &= k_3 x_2 + k_6 x_4 - (k_4 + k_5 + k_8 + k_9) x_5 + k_7 x_6 + k_{10} x_7, \\ \dot{x}_6(t) &= k_8 x_5 - k_7 x_6, & \dot{x}_7(t) &= k_9 x_5 - k_{10} x_7, \end{aligned} \quad (9)$$

где константы скорости протекания реакций выражаются кубическими функциями от управления  $u$  каталитической смеси  $k_i = c_{i0} + c_{i1}u + c_{i2}u^2 + c_{i3}u^3$ ,  $i = \overline{1, 10}$ . Коэффициенты  $c_{ij}$ ,  $j = \overline{0, 3}$  представлены в таблице 1.

Переменные состояния представляют собой массовые доли химических соединений: при  $i = \overline{1, 6}$  для метилциклопентана, при  $i = 7$  — бензола. Начальное состояние системы задано:  $x(0) = (1, 0, 0, 0, 0, 0, 0)^T$ . На управление наложено ограничение:  $0.6 \leq u \leq 0.9$ .

Задача имеет множество локальных максимумов [7]. Необходимо найти глобальный. Управление ищется в классе кусочно-линейных функций с двумя моментами переключений.

При поиске начального кусочно-линейного управления (**блок А** схемы 1) с шагом по управлению  $\tilde{h} = 0.1$  были найдены следующие параметры  $(w^0, w^1, w^2, w^3, w^4, w^5) = (0.6, 0.7, 0.7, 0.7, 0.9, 0.9)$ . Значение функционала составило  $F = 0.0099729$ . На этапе улучшения управления (**блок В**) найдено  $(w^0, w^1, w^2, w^3, w^4, w^5) = (0.648, 0.683, 0.674, 0.675, 0.9, 0.9)$ . При этом значение функционала  $F = 0.0100956$  против  $F = 0.0100942$  (см. [7]). При вычислении оценки приближенно оптимального управления (**блок С** схемы) с шагом по управлению  $\bar{h} = 0.05$  получено  $\Delta = 0$ . На рис. 2(а) и 2(б) изображены оптимальное кусочно-линейное управление и соответствующие ему траектории (на логарифмической шкале). В

Таблица 1. Коэффициенты для констант  $k_i$ , определяющих скорость реакций

$i$	$c_{i0}$	$c_{i1}$	$c_{i2}$	$c_{i3}$
1	0.2918487e-002	-0.8045787e-002	0.6749947e-002	-0.1416647e-002
2	0.9509977e+001	-0.3500994e+002	0.4283329e+002	-0.1733333e+002
3	0.2682093e+002	-0.9556079e+002	0.1130398e+003	-0.4429997e+002
4	0.2087241e+003	-0.7198052e+003	0.8277466e+003	-0.3166655e+003
5	0.1350005e+001	-0.6850027e+001	0.1216671e+002	-0.6666689e+001
6	0.1921995e-001	-0.7945320e-001	0.1105666e+000	-0.5033333e-001
7	0.1323596e+000	-0.4696255e+000	0.5539323e+000	-0.2166664e+000
8	0.7339981e+001	-0.2527328e+002	0.2993329e+002	-0.1199999e+002
9	-0.3950534e+000	0.1679353e+001	-0.1777829e+001	0.4974987e+000
10	-0.2504665e-004	0.1005854e-001	-0.1986696e-001	0.9833470e-002

таблице 2 приведены результаты времени счета задачи оптимизации бифункциональной каталитической смеси на суперЭВМ.

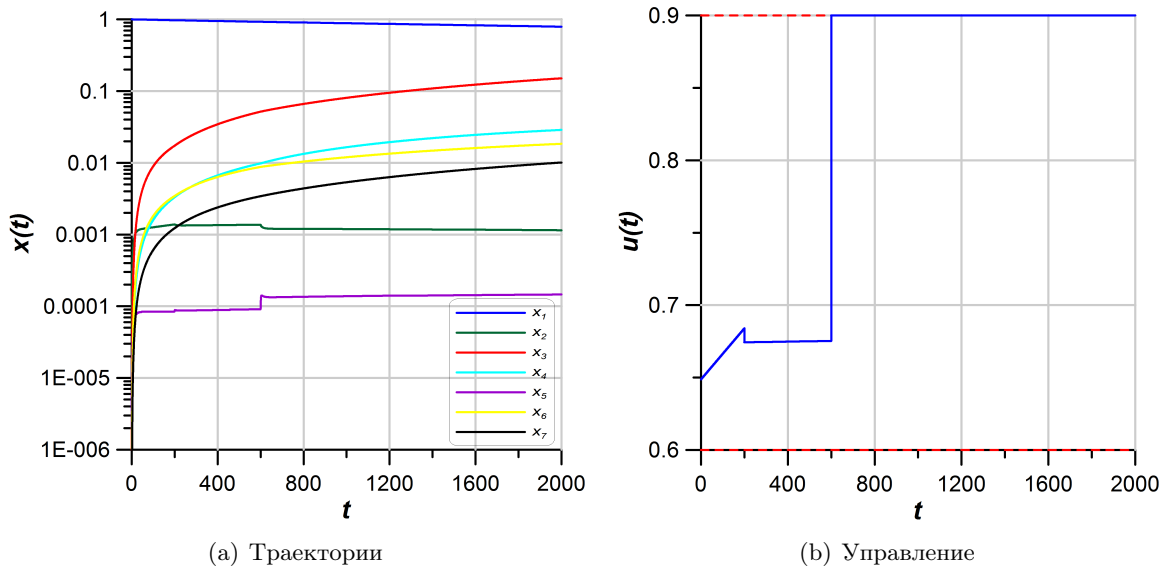


Рис. 2. Оптимальные процессы и управление

Таблица 2. Анализ эффективности параллельной версии программы

Число узлов, $p$	1	2	3	4	5	6	7
Время, $t_p$ (с)	15473.371	7998.311	5555.059	4284.082	3469.615	3081.801	2609.322
Ускорение, $t_1/t_p$	1	1.93	2.78	3.61	4.45	5.02	5.93
Эфф-ть, $t_1/t_p/p$	1	0.97	0.92	0.9	0.89	0.84	0.85

## 4.2. Оптимальное производство белка в биореакторе

Рассмотрим модель по производству секретируемого белка в реакторе периодического действия с подпиткой, представленную в работе [8]. Эта модель использовалась некото-

рыми исследователями при разработке робастных методов решения задач такого характера. Трудности нахождения оптимального управления здесь частично связаны с низкой чувствительностью функционала к управлению. Биореактор описывается системой дифференциальных уравнений

$$\begin{aligned} \dot{x}_1(t) &= g_1(x_2 - x_1) - \frac{u}{x_5}x_1, & \dot{x}_2(t) &= g_2x_3 - \frac{u}{x_5}x_2, \\ \dot{x}_3(t) &= g_3x_3 - \frac{u}{x_5}x_3, & \dot{x}_4(t) &= -7.3g_3x_3 + \frac{u}{x_5}(20 - x_4), \\ \dot{x}_5(t) &= u, \end{aligned} \quad (10)$$

где  $g_1 = \frac{4.75g_3}{0.12 + g_3}$ ,  $g_2 = \frac{x_4e^{-5x_4}}{0.1 + x_4}$ ,  $g_3 = \frac{21.87x_4}{(x_4 + 0.4)(x_4 + 62.5)}$ , с начальным состоянием  $x(0) = (0, 0, 1, 5, 1)^T$ . Здесь  $x_1$  — концентрация секретируемого белка SUC-s2 в культуре ( $\text{л}^{-1}$ ),  $x_2$  — общая концентрация белка SUC-s2 в культуре ( $\text{л}^{-1}$ ),  $x_3$  — плотность клеток культуры ( $\text{г/л}$ ),  $x_4$  — уровень глюкозы в культуре ( $\text{г/л}$ ),  $x_5$  — объем культуры ( $\text{л}$ ). Роль управления  $u$  играет скорость потока подпитки ( $\text{л} \cdot \text{ч}^{-1}$ ),  $0 \leq u \leq 2$ . Определение оптимальной скорости подпитки в реакторе для получения максимального количества желаемого продукта является очень сложной задачей оптимального управления.

Функционал составлен с целью максимизации количества секретируемого белка SUC-s2:

$$F(x(t_F)) = x_1(t_F)x_5(t_F) \rightarrow \max,$$

где  $t_F = 15$  ч.

Управление ищется в виде (2) с двумя точками переключений. При поиске начального кусочно-линейного управления (**блок А**) с шагом по управлению  $\tilde{h} = 0.25$  были найдены следующие параметры  $(w^0, w^1, w^2, w^3, w^4, w^5) = (0, 0.75, 0.5, 2, 0.5, 1.25)$ . Значение терминального функционала —  $F = 31.62$ . На этапе улучшения управления (**блок В**) найдено  $(w^0, w^1, w^2, w^3, w^4, w^5) = (0.117, 0.526, 0.8, 1.74, 0.54, 1.14)$ . При этом значение функционала составило  $F = 31.82$  против  $F = 32.67$  (см. [9], где функция управления искалась в кусочно-постоянном виде с 15 точками переключений). При вычислении оценки приближенно оптимального управления (**блок С**) с шагом по управлению  $\bar{h} = 0.2$  получено  $\Delta = 0$ . На рис. 3(а) и 3(б) изображены оптимальное кусочно-линейное управление и соответствующие ему траектории. В таблице 3 приведены результаты времени счета оптимального производства белка в биореакторе на кластерной установке.

**Таблица 3.** Анализ эффективности параллельной версии программы

Число узлов, $p$	1	2	3	4	5	6	7
Время, $t_p$ (с)	2281.76	1170.653	803.972	617.148	510.432	440.973	399.476
Ускорение, $t_1/t_p$	1	1.95	2.84	3.7	4.47	5.17	5.71
Эфф-ть, $t_1/t_p/p$	1	0.98	0.95	0.93	0.89	0.86	0.82

## 5. Заключение

В работе предложен параллельный алгоритм вычисления начального приближения для решения задач оптимального управления, а также расчета качества полученного решения в виде количественной оценки на основе достаточных условий оптимальности Кротова. Проведено исследование масштабируемости параллельной программы. Описанный алгоритм — неотъемлемая часть программного комплекса оптимизации динамических систем на множествах управлений простой структуры [3], в котором задействованы возможности современных суперЭВМ, что позволяет, в свою очередь, существенно сократить время вычислений.

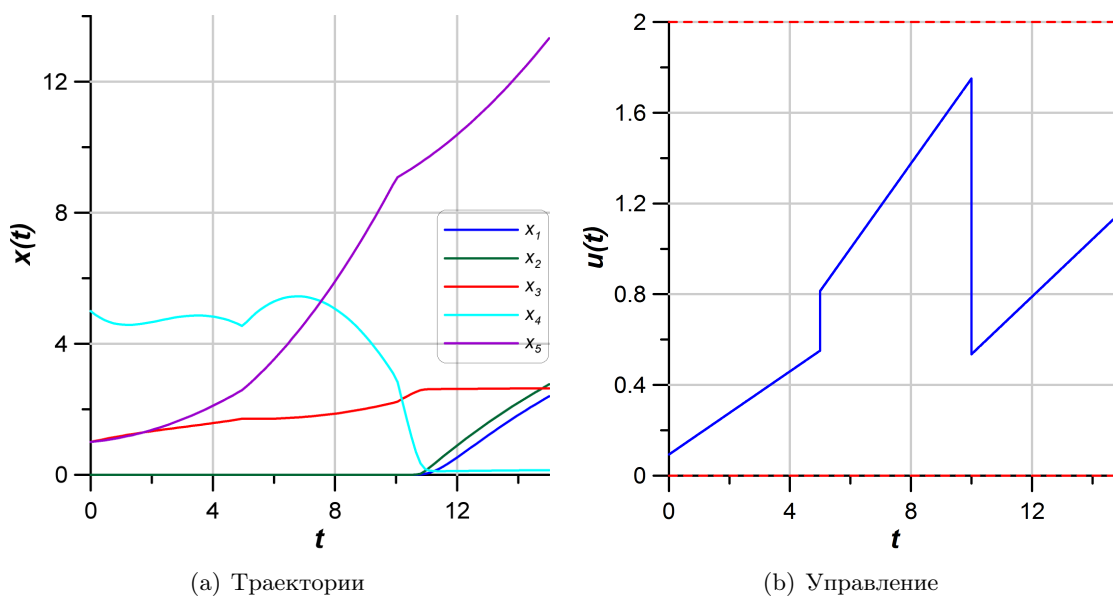


Рис. 3. Оптимальные процессы и управление

## Литература

1. Фесько О.В. Алгоритм поиска кусочно-линейного управления с нефиксированными моментами переключений // Вестник БГУ. Вып. 9: Математика и информатика, Улан-Удэ: Изд-во Бурят. госун-та, 2011. С. 52–56.
2. Кротов В.Ф., Гурман В.И. Методы и задачи оптимального управления. Наука, М., 1973.
3. Фесько О.В. Программный комплекс поиска оптимальных управлений на множествах простой структуры // Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ2011): Труды международной научной конференции / Москва. Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2011. С. 712.
4. Фесько О.В. Параллельный алгоритм оптимизации динамических систем на множестве кусочно-линейных управлений // Вестник Бурятского государственного университета. Вып. 9: Математика и информатика, Улан-Удэ: Изд-во Бурят. госун-та, 2010. С. 79–87.
5. Трушкова Е.А. Оценка приближенно оптимальных решений на основе преобразований модели объекта // Вестник БГУ. Вып. 9: Математика и информатика, Улан-Удэ: Изд-во Бурят. госун-та, 2011. С. 47–51.
6. Moskovsky A., Roganov V., Abramov S. Parallelism granules aggregation with the T-system // 9th International Conference on Parallel Computing Technologies. LNCS 4671, 2007. P. 293–302.
7. Luus R., Dittrich J., Keil F.J. Multiplicity of solutions in the optimization of a bifunctional catalyst blend in a tubular reactor // Can. J. Chem. Eng. 70. 1992. P. 780–785.
8. Park S., Ramirez W.F. Optimal production of secreted protein in fed-batch reactors // AIChE J. 34. 1988. P. 1550–1558.
9. Luus R. Iterative Dynamic Programming. Boca Raton, Chapman and Hall/CRC 2000. 344 p.