Robustné riadenie chemického reaktora

Jana Závacká, Monika Bakošová, Dalibor Puna

Príspevok je venovaný návrhu robustného spätnoväzbového regulátora pre exotermický prietokový chemický reaktor (PCHR), ktorý pre meniace sa reakčné entalpie v pracovnej oblasti možno považovať za systém s neurčitosťami. Ďalším problémom, ktorý treba riešiť, je skutočnosť, že pre maximálnu výťažnosť hlavného produktu treba reaktor stabilizovať v nestabilnom rovnovážnom stave. Na syntézu regulátora je použitý matematický model reaktora vo forme lineárnej prenosovej funkcie s intervalovými neurčitosťami a následne je použitý algebrický polynomický prístup. Na analýzu robustnej stability regulačného obvodu je využitá Charitonova teoréma.

Úvod

Chemické reaktory predstavujú jedny z najdôležitejších zariadení v chemickom priemysle [1]. Ich prevádzku a následne aj riadenie však ovplyvňujú rôzne neurčitosti. Tie sú dôsledkom meniacich sa alebo nie presne známych fyzikálnych parametrov, ako sú napr. rýchlosti chemických reakcií, reakčné entalpie a pod. Inokedy sa menia počas prevádzky reaktorov ich pracovné body. Na chemické reaktory vplývajú aj rôzne poruchy. Všetky tieto neurčitosti môžu nepriaznivo ovplyvniť riadenie alebo dokonca spôsobiť nestabilitu uzavretého regulačného obvodu. Aplikácia robustného riadenia je jedna z ciest ako prekonať spomenuté problémy, ktoré môžu vážne ovplyvniť riadenie nielen chemických reaktorov, ale aj iných chemickotechnologických procesov [2], [3], [4].

Opis neurčitého systému

Predpokladajme, že systém s reálnou parametrickou neurčitosťou možno opísať prenosovou funkciou

$$G(s,q)=\frac{b(s,q)}{a(s,q)} \tag{1}$$

kde q je vektor neurčitých parametrov,
s – argument Laplaceovej transformácie a
b, a sú polynómy s koeficientmi, ktoré závisia od q.

Neurčitý polynóm

$$a(s,q)=\sum_{i=0}^{n} a_i(q)s^i \tag{2}$$

má nezávislú štruktúru neurčitosti, ak každý prvok q_i z q ovplyvňuje iba jeden koeficient polynómu.

Rodina polynómov

$$A=\{a(s,q):q\in Q\} \tag{3}$$

je rodina intervalových polynómov, ak $a(s, q)$ má nezávislú štruktúru neurčitosti, každý koeficient je spojitou funkciou q a Q je kváder. Rodina intervalových polynómov A pozostáva z neurčitých polynómov opísaných pomocou $a(s, q)$ s hranicami neurčitosti $|q_i| \le 1$ pre $i = 0,\dots,n$. Pre intervalovú rodinu možno použiť skrátené označenie

$$a(s,q)=\sum_{i=0}^{n}\left[q_i^-,q_i^+\right]s^i \tag{4}$$

kde $[q_i^-,q_i^+]$ označuje hranice intervalu i-teho prvku neurčitosti q_i.

Charitonova teoréma

Doslova míľnikom v analýze robustnej stability systémov s parametrickými neurčitosťami sa stala Charitonova teoréma [5]. Rodina intervalových polynómov A je robustne stabilná vtedy a len vtedy, ak sú stabilné štyri tzv. Charitonove polynómy. Netreba teda testovať stabilitu všetkých možných hraničných variácií, ale bez ohľadu na počet neurčitých parametrov vždy len stabilitu štyroch Charitonových polynómov. Konštrukcia Charitonových polynómov je veľmi jednoduchá a využíva špeciálne stanovené poradia horných a dolných hraníc koeficientov intervalového polynómu (4), a to podľa nasledujúcej schémy

$$\begin{aligned}
K_1(s)&=q_0^-+q_1^-s+q_2^+s^2+q_3^+s^3+q_4^-s^4+q_5^-s^5+q_6^+s^6+\dots\\
K_2(s)&=q_0^++q_1^+s+q_2^-s^2+q_3^-s^3+q_4^+s^4+q_5^+s^5+q_6^-s^6+\dots\\
K_3(s)&=q_0^++q_1^-s+q_2^-s^2+q_3^+s^3+q_4^+s^4+q_5^-s^5+q_6^-s^6+\dots\\
K_4(s)&=q_0^-+q_1^+s+q_2^+s^2+q_3^-s^3+q_4^-s^4+q_5^+s^5+q_6^+s^6+\dots
\end{aligned} \tag{5}$$

Rodina intervalových polynómov A invariantného stupňa je stabilná vtedy a len vtedy, ak sú stabilné štyri Charitonove polynómy (5).

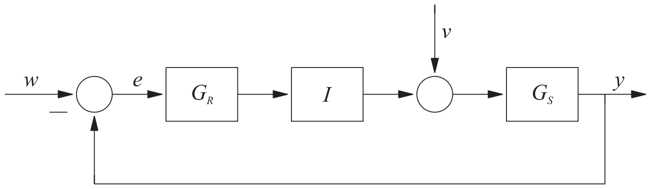
Polynomická syntéza

Uvažujme systém riadenia znázornený na obr. 1, kde G_S je riadený systém opísaný externým lineárnym modelom, G_R je spätnoväzbový regulátor a I je integračný člen, ktorý je súčasťou regulátora G_R a zaisťuje integračné vlastnosti regulátora. V schéme na obr. 1 ďalej w je žiadaná veličina, e je regulačná odchýlka, y je riadená veličina a v je poruchová veličina. Prenosové funkcie riadeného systému a regulátora majú tvar

$$G_S=\frac{b(s)}{a(s)} \qquad I=\frac{1}{s} \qquad G_R=\frac{q(s)}{p(s)} \tag{6}$$

kde a, b a q, p sú polynómy vzhľadom na s.

Syntéza regulátora opísaná v tejto časti je založená na algebrickom polynomickom prístupe. Hlavné požiadavky na systém ria-



Obr.1 Systém riadenia

denia, ktoré treba návrhom regulátora zabezpečiť, sú vnútorná rýdzosť a stabilita systému riadenia, asymptotické sledovanie žiadanej veličiny a odstránenie vplyvu poruchy. Postup pri odvodení vhodného regulátora je opísaný napr. v [6].

Stabilitu systému riadenia na obr. 1, odstránenie vplyvu poruchy a asymptotické sledovanie žiadanej veličiny zabezpečí spätnoväzbový regulátor, ktorý sa získa riešením polynomickej rovnice

$$a(s)sp(s)+b(s)q(s)=d(s) \tag{7}$$

so stabilným polynómom d na pravej strane, ktorý reprezentuje charakteristický polynóm uzavretého regulačného obvodu. Prvým krokom syntézy je určenie stupňov polynómov p, q, d. Stupne neznámych polynómov p, q možno odvodiť na základe analýzy opísanej v [7] takto

$$\deg(p)=\deg(q)=\deg(a) \tag{8}$$

a stupeň polynómu d je potom

$$\deg(d)=2\deg(a)+1 \tag{9}$$

Koeficienty polynómu d sa získajú voľbou príslušného počtu koreňov d. V ďalšom kroku sa vypočítajú koeficienty polynómov p, q riešením rovnice (7). Tieto koeficienty závisia od koeficientov polynómu d, a teda od voľby pólov uzavretého regulačného obvodu.

Riadený chemický reaktor

Uvažujme prietokový chemický reaktor (PCHR) s dvoma paralelnými nevratnými reakciami prvého poriadku, ktoré prebiehajú podľa reakčnej schémy

$$A \xrightarrow{k_1} B \qquad A \xrightarrow{k_2} C$$

kde B je hlavný produkt a C je vedľajší produkt. Za predpokladu dokonalého miešania je dynamický matematický model reaktora odvodený pomocou materiálových bilancií reaktantov, entalpickej bilancie reakčnej zmesi a entalpickej bilancie chladiaceho média v plášti reaktora. Pri platnosti zvyčajných zjednodušujúcich predpokladov možno model PCHR opísať štyrmi nelineárnymi diferenciálnymi rovnicami [3]

$$\frac{\mathrm{d}c_\mathrm{A}}{\mathrm{d}t}=-\left(\frac{q_r}{V_r}+k_1+k_2\right)c_\mathrm{A}+\frac{q_r}{V_r}c_\mathrm{Af} \tag{10}$$

$$\frac{\mathrm{d}c_\mathrm{B}}{\mathrm{d}t}=-\frac{q_r}{V_r}c_\mathrm{B}+k_1c_\mathrm{A}+\frac{q_r}{V_r}c_\mathrm{Bf} \tag{11}$$

$$\frac{\mathrm{d}T_\mathrm{r}}{\mathrm{d}t}=-\frac{h_1k_1+h_2k_2}{\rho_\mathrm{r}c_{pr}}c_\mathrm{A}+\frac{q_\mathrm{r}}{V_\mathrm{r}}(T_\mathrm{rf}-T_\mathrm{r})+\frac{A_\mathrm{h}U}{V_\mathrm{r}\rho_\mathrm{r}c_{pr}}(T_\mathrm{c}-T_\mathrm{r}) \tag{12}$$

$$\frac{\mathrm{d}T_\mathrm{c}}{\mathrm{d}t}=\frac{q_\mathrm{c}}{V_\mathrm{c}}(T_\mathrm{cf}-T_\mathrm{c})+\frac{A_\mathrm{h}U}{V_\mathrm{c}\rho_\mathrm{c}c_{pc}}(T_\mathrm{r}-T_\mathrm{c}) \tag{13}$$

so začiatočnými podmienkami $c_A(0)$, $c_B(0)$, $T_r(0)$ a $T_c(0)$

kde t je čas,
c – koncentrácia,
T – teplota,
V – objem,
ρ – hustota,
c_p sú špecifické tepelné kapacity,
q je objemový prietok,
h – reakčná entalpia,
A_h – plocha prestupu tepla a
U – koeficient prestupu tepla.

Dolný index r znamená reakčnú zmes, c chladenie, f vstupné veličiny. Horný index s znamená hodnoty v ustálenom stave. Reakčné rýchlosti k_1, k_2 sú vyjadrené v tvare

$$k_j=k_{0j}\,e^{-\frac{E_j}{RT_r}} \qquad j=1,2 \tag{14}$$

$V_r = 0{,}23$ m^3	$c_{pr} = 4{,}02$ kJ.kg^{-1}.K^{-1}	$U = 42{,}8$ kJ.m^{-2}.min^{-1}.K^{-1}
$V_c = 0{,}21$ m^3	$c_{pc} = 4{,}182$ kJ.kg^{-1}.K^{-1}	$A_h = 1{,}51$ m^2
$q_r = 0{,}015$ m^3.min^{-1}	$g_1 = E_1/R = 9850$ K	$T_{cf} = 288$ K
$q_c = 0{,}004$ m^3.min^{-1}	$g_2 = E_2/R = 22019$ K	$T_{rf} = 310$ K
$\rho_r = 1020$ kg.m^{-3}	$c_{Af} = 4{,}22$ kmol.m^{-3}	$k_{01} = 1{,}55 \times 10^{11}$ min^{-1}
$\rho_c = 998$ kg.m^{-3}	$c_{Bf} = 0$ kmol.m^{-3}	$k_{02} = 8{,}55 \times 10^{26}$ min^{-1}

Tab.1 Parametre a vstupné veličiny chemického reaktora

kde k_0 je predexponenciálny faktor,
E – aktivačná energia,
R – plynová konštanta.

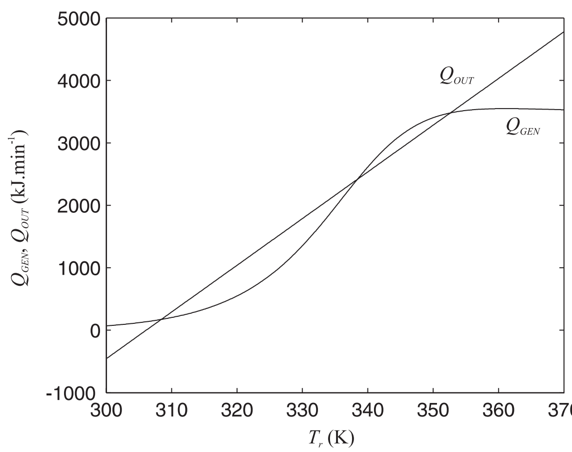
Hodnoty všetkých parametrov a vstupných veličín reaktora sú uvedené v tab. 1.

Neurčitosť modelu reaktora vyplýva zo skutočnosti, že hodnoty dvoch fyzikálnych parametrov sú známe len približne a pohybujú sa v intervaloch

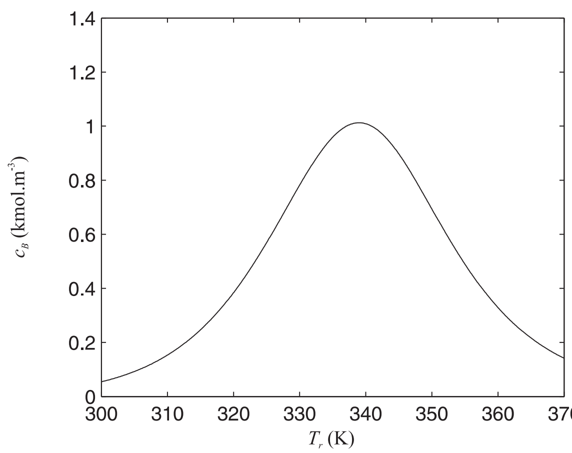
$$h_1=\left[-0{,}8\times10^4;-8{,}4\times10^4\right]$$
$$h_2=\left[-5{,}7\times10^4;-5{,}3\times10^4\right]$$

Nominálne hodnoty týchto parametrov sú strednými hodnotami intervalov.

Najprv sa skúmalo správanie chemického reaktora v rovnovážnom stave s nominálnymi hodnotami neurčitých parametrov a tiež so všetkými 4 kombináciami minimálnych a maximálnych hodnôt neurčitých parametrov. Touto analýzou sa zistilo, že reaktor má tri rovnovážne stavy, dva z nich sú stabilné a jeden je nestabilný. Maximálna koncentrácia hlavného produktu B sa však získa v nestabilnom rovnovážnom stave. Analýza stability rovno-



a)



b)

Obr.2 Rovnovážne stavy PCHR s nominálnymi hodnotami neurčitých parametrov

vážnych stavov chemického reaktora pre nominálny model je graficky znázornená na obr. 2, kde Q_{GEN} je teplo generované chemickými reakciami a Q_{OUT} je teplo odvedené z reaktora cez stenu plášťa a výstupným prúdom reakčnej zmesi. Hlavný pracovný bod pre nominálny model je teda daný týmito rovnovážnymi hodnotami stavových veličín $[c_A^s, c_B^s, T_r^s, T_c^s]$ = [1,8614 kmol.m^{-3}; 1,0113 kmol.m^{-3}; 338,41 K; 328,06 K].

Návrh robustného regulátora na riadenie chemického reaktora

Návrh robustného regulátora algebrickou polynomickou syntézou je založený na získaní prenosovej funkcie chemického reaktora. Linearizovaný matematický model chemického reaktora bol odvodený za predpokladu, že riadiacou veličinou je prietok chladiaceho média q_c, riadenou veličinou je teplota reakčnej zmesi T_r a pracovný bod je nestabilný rovnovážny stav reaktora. Odvodené prenosové funkcie pre nominálny model a 4 kombinácie neurčitých parametrov sú uvedené v tab. 2, z ktorej je zrejmé, že PCHR s uvedenými neurčitosťami možno opísať vo forme prenosovej funkcie s intervalovými polynómami v čitateli a menovateli v tvare

$$G_S = \frac{b_2 s^2 + b_1 s + b_0}{s^4 + a_3 s^3 + a_2 s^2 + a_1 s + a_0} \qquad (15)$$

kde $b_2 = [-13,48; -12,76]$, $a_3 = [0,09144; 0,09869]$, $b_1 = [-3,165; -2,5525]$, $a_2 = [-0,01065; -0,007619]$, $b_0 = [-0,1491; -0,1121]$, $a_1 = [-0,001634; -0,001289]$, $a_0 = [-5,499\times10^{-5}; -4,439\times10^{-5}]$

PCHR opísaný pomocou (15) je nestabilný systém. Všetky prenosové funkcie v tab. 2 majú aj nestabilné póly. Napr. číselné hodnoty pólov pre nominálny systém sú –0,0652; 0,119; –0,0741 + 0,0310 i; –0,0741 – 0,0310 i. Preto je potrebné riadený systém s intervalovými neurčitosťami stabilizovať.

Na syntézu regulátora použijeme postup opísaný v časti Polynomická syntéza. Predpokladáme pri tom, že reaktor je opísaný nominálnou prenosovou funkciou G_S, ktorej minimálna realizácia predstavuje systém 3. rádu v tvare

$$G_S = \frac{-13,07s - 1,933}{s^3 + 0,0288s^2 - 0,01125s - 0,0007715} \qquad (16)$$

Stupeň polynómu d v (7) je podľa (9) rovný 7 a d bol zvolený v tvare

$$d = (s + 0,3)^7 \qquad (17)$$

Po zvolení d možno regulátor G_R jednoducho vypočítať napr. použitím príkazu [x, y] = axbyc(a, b, d) z polynomického toolboxu pre MATLAB. Prenosová funkcia regulátora G_R vypočítaná pre d v tvare (17) je

$$G_R = \frac{-0,05189s^3 - 0,0152s^2 - 0,00197s - 0,0001132}{s^3 + 2,071s^2 + 1,842s + 0,2377} \qquad (18)$$

Kvôli odstráneniu trvalej regulačnej odchýlky treba v regulačnom obvode použiť navrhnutý regulátor G_R spolu s integračným členom I.

Teraz treba otestovať, či je navrhnutý regulátor robustný a či dokáže robustne stabilizovať riadený systém (15) s intervalovými neurčitosťami. Charakteristická rovnica uzavretého regulačného obvodu z obr. 1 má tvar

$$1 + G_R I G_S = 0 \qquad (19)$$

Po dosadení G_S z (15) a G_R z (18) získame charakteristickú rovnicu uzavretého regulačného obvodu v tvare

$$\begin{aligned} d(s,q) = s^8 &+ [2,1619; 2,1699]s^7 + [2,0188; 2,0363]s^6 + \\ &+ [1,0570; 1,08862]s^5 + [0,3286; 0,3741]s^4 + \\ &+ [0,0644; 0,0781]s^3 + [0,0077; 0,0096]s^2 + \\ &+ [0,0005; 0,0006]s + [1,3\times10^{-5}; 1,7\times10^{-5}] \end{aligned} \qquad (20)$$

Robustná stabilita uzavretého regulačného obvodu bola testovaná použitím Charitonovej teorémy. S intervalovým polynómom $d(s,q)$ sú združené štyri Charitonové polynómy, ktoré sa vytvoria podľa (5) a potom sa otestuje ich stabilita. Z polynomického toolboxu pre MATLAB bol použitý príkaz kharit a výsledok tohto testu ukázal, že polynóm (20) je robustne stabilný. Z toho vyplýva, že uzavretý regulačný obvod s regulátorom G_R v tvare (18) je tiež robustne stabilný.

Výsledky simulácií

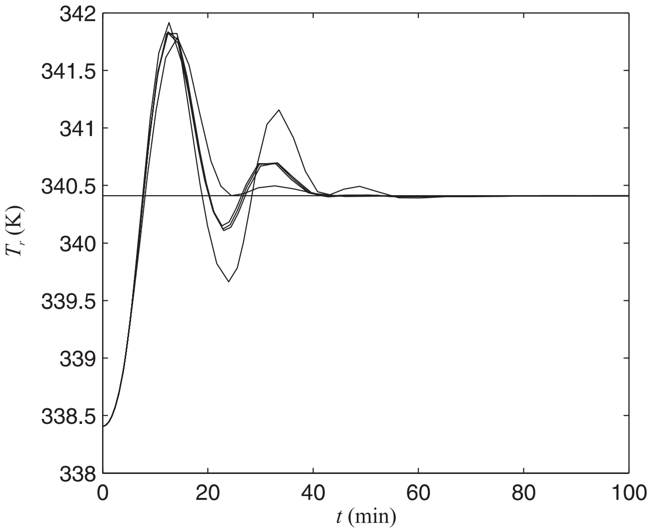
Navrhnutý regulátor G_R (18) a jeho schopnosť riadiť PCHR s neurčitosťami boli testované simulačne.

Na obr. 3 možno vidieť výsledky simulácie riadenia nelineárnych modelov PCHR – nominálneho modelu a štyroch modelov získaných štyrmi kombináciami minimálnych a maximálnych hodnôt neurčitých parametrov – navrhnutým regulátorom z nominálneho rovnovážneho stavu do iného rovnovážneho stavu. Začiatočné podmienky simulácie riadenia boli dané rovnovážnymi hodnotami stavových veličín reaktora s číselnými hodnotami $[c_A^s, c_B^s, T_r^s, T_c^s]$ = [1,8614 kmol.m^{-3}; 1,0113 kmol.m^{-3}; 338,41 K; 328,06 K] a žiadaná hodnota riadenej veličiny bola 340,41 K.

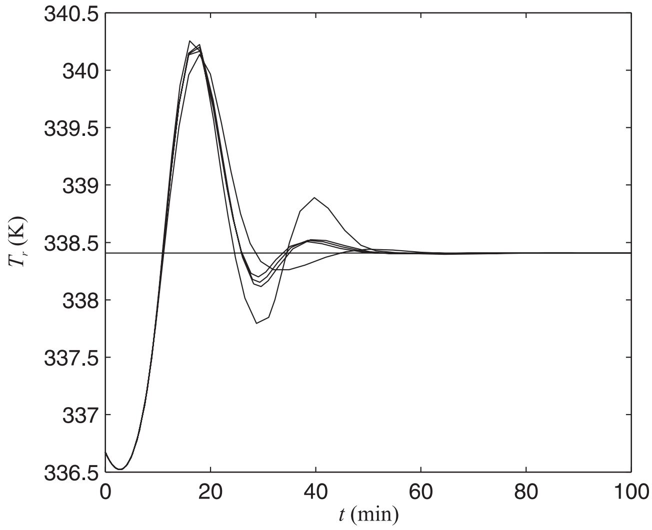
Obr. 4 prezentuje výsledok simulácie stabilizácie reaktora do nominálneho rovnovážneho stavu. Stabilizované boli opäť nelineárne modely reaktora – nominálny model a štyri modely získané štyrmi kombináciami minimálnych a maximálnych hodnôt neurčitých parametrov – navrhnutým regulátorom. V tomto prípade bol začiatočný stav reaktora daný stavovými veličinami reaktora

h_1 [kJ.kmol^{-1}]	h_2 [kJ.kmol^{-1}]	G_S
$-8,4\times10^4$	$-5,3\times10^4$	$\frac{-13,48s^2 - 3,165s - 0,1491}{s^4 + 0,09144s^3 - 0,007619s^2 - 0,001289s - 4,439\times10^{-5}}$
$-8,4\times10^4$	$-5,7\times10^4$	$\frac{-13,03s^2 - 2,748s - 0,1238}{s^4 + 0,0907s^3 - 0,01065s^2 - 0,001634s - 5,419\times10^{-5}}$
$-8,8\times10^4$	$-5,3\times10^4$	$\frac{-13,13s^2 - 2,831s - 0,1288}{s^4 + 0,09735s^3 - 0,008016s^2 - 0,001367s - 4,613\times10^{-5}}$
$-8,8\times10^4$	$-5,7\times10^4$	$\frac{-12,76s^2 - 2,552s - 0,1121}{s^4 + 0,09869s^3 - 0,0097s^2 - 0,001587s - 5,272\times10^{-5}}$
$-8,6\times10^4$	$-5,5\times10^4$	$\frac{-13,07s^2 - 2,785s - 0,1261}{s^4 + 0,09401s^3 - 0,009375s^2 - 0,001505s - 5,03\times10^{-5}}$

Tab.2 Prenosové funkcie chemického reaktora



Obr.3 Priebeh riadenia PCHR



Obr.4 Stabilizácia reaktora v hlavnom pracovnom bode

s číselnými hodnotami [c_A^s, c_B^s, T_r^s, T_c^s] = [2,1210 kmol.m^{-3}; 0,8644 kmol.m^{-3}; 336,76 K; 326,73 K] a žiadaná hodnota riadenej veličiny bola 338,41 K.

Záver

Príspevok sa venuje jednej z možností návrhu robustného spätnoväzbového regulátora na riadenie PCHR pracujúceho v nestabilnom rovnovážnom stave. Reaktor ako systém s 2 neurčitými parametrami bol pre syntézu regulátora opísaný prenosovou funkciou s intervalovými polynómami v jej čitateli a menovateli. Na syntézu regulátora sa použila algebrická polynomická syntéza. Na testovanie robustnej stability uzavretého regulačného obvodu s navrhnutým regulátorom sa využila Charitonova teoréma. Výsledky simulácií potvrdzujú schopnosť regulátora stabilizovať reaktor s neurčitosťami v jeho hlavnom pracovnom bode, ktorý je reprezentovaný nestabilným rovnovážnym stavom.

Tento príspevok vznikol s grantovou podporou VEGA MŠ SR a SAV pre projekty č. 1/1046/04 a 1/3081/06.

Literatúra

[1] MIKLEŠ, J., FIKAR, M.: Process modelling, identification and control 2. STU Press, Bratislava 2004.

[2] ALVAREZ-RAMIREZ, J., FERMAT, R.: Robust PI stabilization of a class of chemical reactors. Systems Control Lett. 38, 219-225, 1999.

[3] BAKOŠOVÁ, M., PUNA, D., MÉSZÁROS, A.: Robust controller design for a chemical reactor. In: European Symposium on Computer Aided Process Engineering – 15. Elsevier, Amsterdam 2005, 1303-1308.

[4] DANKO, J., ONDROVIČOVÁ, M., VESELÝ, V.: Robust controller design to control of warm air-drying chamber. Journal of Electrical Enginering 55, 7-8, 207-211, 2004.

[5] KHARITONOV, V. L.: Asymptotic stability of an equilibrium position of a family systems of linear differential equations. Differential Equations, 14, 2086-2088, 1978.

[6] DOSTÁL, P., BAKOŠOVÁ, M., BOBÁL, V.: An approach to adaptive control of a CSTR. Chem. Papers, 58(3), 184-190, 2004.

[7] ZÁVACKÁ, J., BAKOŠOVÁ, M., PROKOP, R., PUNA, D.: Robust Control of a chemical reactor with uncertainties. In: Proc. 7th Int. Scientific-Technical Conf. Process Control 2006, Kouty nad Desnou, Czech Republic, CD ROM R075-1 - R075-9, 2006.

Ing. Jana Závacká
doc. Ing. Monika Bakošová, CSc.
Ing. Dalibor Puna

Slovenská technická univerzita v Bratislave
Fakulta chemickej a potravinárskej technológie
Ústav informatizácie, automatizácie a matematiky
Oddelenie informatizácie a riadenia procesov
Radlinského 9, 812 37 Bratislava
e-mail: jana.zavacka@stuba.sk
monika.bakosova@stuba.sk
dalibor.puna@stuba.sk

47