

Optimálne riadenie sústavy chemických reaktorov

Tomáš Hirmajer, Miroslav Fikar

Úvod

Príspevok sa zaoberá optimálnym riadením sústavy chemických reaktorov. Predstavený systém môžeme považovať za hybridný, pretože v určitom časovom momente, ktorý je tiež predmetom optimalizácie, dôjde k pridaniu určitej zložky, čo vedie k zmene matematického opisu. Optimálne riadenie je zabezpečené dynamickou optimalizáciou, konkrétne metódou parametrizácie vektora riadenia (CVP), ktorá patrí medzi priame numerické metódy. CVP preformuluje dynamický optimalizačný problém na statický optimalizačný problém – nelineárne programovanie (NLP). Tento problém je už potom iteračne riešiteľný pomocou optimalizačného algoritmu a vhodnej gradientovej metódy.

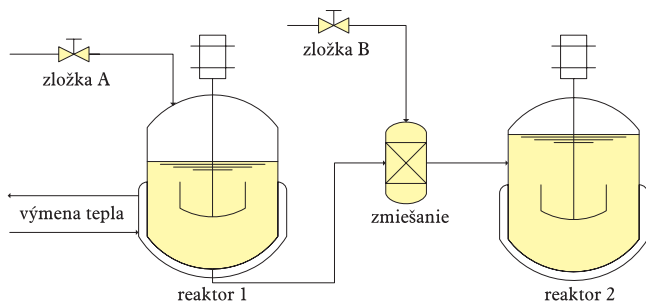
1. Oboznámenie sa s problémom

V praxi existuje veľké množstvo procesov, ktoré charakterizuje zmena operačných fáz. Či už ide o procesy s prepínaním dynamiky na základe jednoduchkej logickej podmienky, ako napríklad zmena matematického opisu pri zásobníkoch kvapaliny bez interakcie na s interakciou [1], alebo ide o zložitejšie vsádzkové a polovsádzkové procesy s chemickou reakciou [2], ktoré sú typické pre farmaceutický priemysel, pre výrobu polymérov, biotechnológiu, alebo ide o procesy nitrifikácie a denitrifikácie prebiehajúce v čističkách odpadových vôd [3].

Pre dôležitosť týchto procesov v procesnom priemysle sme sa v príspevku zamerali na optimálne riadenie systému, ktorý vykazuje takúto zmenu operačných fáz.

2. Proces

Predpokladajme nelineárny systém dvoch chemických reaktorov zobrazených na obr. 1. Prvý chemický reaktor je na začiatku procesu naplnený objemom V_1 kvapalného roztoku zložky A s koncentráciou $c_A(t_0)$ a tuhým katalyzátorom. Ako riadiaca veličina pre prvú reakčnú fázu je použitá ohrevná cievka, ktorá zabezpe-

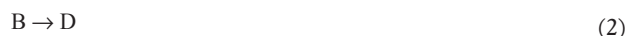


Obr.1 Dvojstupňový chemický reaktor

čuje celkový optimálny teplotný priebeh. Po skončení prvej chemickej reakcie



v čase t_S sa určité množstvo rozpusteného kvapalného roztoku zložky B s koncentráciou c_B^S pridá k produktu po prvej reakčnej fáze a táto zmes je vložená do druhého chemického reaktora, kde prebiehajú tieto tri paralelné chemické reakcie



pri izotermických podmienkach (druhá reakčná fáza). Detailné informácie o procese sú ukázané v článku [4].

3. Model

Model chemického reaktora je založený na predpoklade ideálneho miešania a ideálneho zmiešania kvapalín. Na obr. 1 je zobrazený dvojstupňový chemický reaktor, ktorý je opísaný nasledujúcou skupinou diferenciálnych rovníc (f_1 a f_2 pre fázu 1 a 2)

$$f_1 = \frac{dx}{dt} = \begin{bmatrix} -2k_1(T)c_A^2 \\ k_1(T)c_A^2 - k_2(T)c_B \\ k_2(T)c_B \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (5)$$

$$f_2 = \frac{dx}{dt} = \begin{bmatrix} 0 \\ -0,02c_B - 0,05c_B - 0,00008c_B^2 \\ 0 \\ 0,02c_B \\ 0,05c_B \\ 0,00004c_B^2 \end{bmatrix} \quad (6)$$

s kinetickými konštantami definovanými ako

$$k_1(T) = 0,0444e^{\frac{-2500}{T}} \quad (7)$$

$$k_2(T) = 6889,0e^{\frac{-5000}{T}} \quad (8)$$

kde $x[\text{mol}\cdot\text{m}^{-3}]$ je vektor stavových veličín, ktorý charakterizuje koncentráciu zložiek A-F, $T[\text{K}]$ je teplotný profil prvej reakčnej fázy – riadiaca veličina u a nakoniec rýchlostné konštanty $k_1(T)[\text{m}^3\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{min}^{-1}]$ a $k_2(T)[\text{min}^{-1}]$, ktoré charakterizujú rýchlosť chemických reakcií.

Proces zmiešania v čase prepnutia t_S je opísaný nasledovnými chemickými rovnicami

$$V_2 c_A(t_S^+) = V_1 c_A(t_S^-) \quad (9)$$

$$V_2 c_B(t_S^+) = V_1 c_B(t_S^-) + S c_B^S \quad (10)$$

$$V_2 c_C(t_S^+) = V_1 c_C(t_S^-) \quad (11)$$

a

$$V_2 = V_1 + S \quad (12)$$

kde V_1 [m³] je začiatočný objem zložky A vlozenej do prvého chemického reaktora, S [m³] je množstvo pridanej zložky B po prvej reakčnej fáze s koncentráciou c_B^S [mol.m⁻³] a V_2 [m³] je celkový objem zmesi vlozenej do druhého chemického reaktora.

4. Definícia problému

Cieľom optimalizácie je dosiahnuť maximálne množstvo zložky D v koncovom čase t_P vzhľadom na obmedzenie koncovej koncentrácie, ktorá musí byť rovná alebo väčšia ako želaná hodnota c_D^w . Optimalizovanými premennými sú teplotný profil prvej reakčnej fázy, celkové trvanie reakcií t_P a množstvo S zložky B pridanej v čase prepnutia fázy t_S . Účelová funkcia J_0 potom nadobudne tvar

$$\max_{S, \Delta t_i, T} J_0 = V_2 c_D(t_P) \quad (13)$$

vzhľadom na obmedzenia

$$J_1 = c_D(t_P) - c_D^w \geq 0 \quad (14)$$

$$J_2 = t_P - \sum_{i=1}^P \Delta t_i \geq 0 \quad (15)$$

kde c_D^w [mol.m⁻³] je želaná minimálna hodnota koncentrácie zložky D v koncovom čase a t_P [min] je celkový čas oboch reakčných fáz.

Hodnoty parametrov vstupujúcich do optimalizácie sú definované ako objem $V_1 = 0,1$ m³, začiatočné koncentrácie $c_A(t_0) = 2000$ mol.m⁻³, $c_{B-F}(t_0) = 0$ mol.m⁻³, koncentrácia pridanej zložky B $c_B^S = 600$ mol.m⁻³, minimálna koncentrácia zložky D v koncovom čase $c_D^S = 150$ mol.m⁻³ a maximálny čas oboch reakčných fáz $t_P = 180$ min.

5. Odvodenie gradientov

Pri odvodení gradientov predpokladáme spojitú riadiacu trajektóriu, ktorá je rozdelená na P úsekov. Pôvodný problém dynamickej optimalizácie možno potom preformulovať na problém statickej optimalizácie. Na to, aby sme mohli daný problém nelineárneho programovania vyriešiť, treba odvodiť gradienty jednotlivých optimalizovaných premenných a implementovať ich do daného optimalizačného algoritmu, ktorý je SQP (sekvenčné kvadratické programovanie) typu. Odvodeniu gradientov sa na tomto mieste nebudeme venovať, čitateľa odkazujeme na prácu [5], v ktorej sú gradienty pre jednotlivé optimalizované premenné (čas t_i , riadiace veličiny u_i a parametre p) získané z adjugovaných rovníc na základe podmienky optimality variačného počtu. V našom prípade sú rovnice na výpočet gradientov zjednodušené nasledovne

$$\frac{\partial J_j}{\partial t_P} = H_j(t_P^-) + \frac{\partial G_j}{\partial t_P} \quad (16)$$

$$\frac{\partial J_j}{\partial t_i} = H_j(t_i^-) - H_j(t_i^+) + \frac{\partial G}{\partial t_i} \quad i = \overline{1, P-1} \quad (17)$$

$$\frac{\partial J_j}{\partial u_i} = L_{u,j}(t_{i-1}) - L_{u,j}(t_i) \quad i = \overline{1, P} \quad (18)$$

$$\frac{\partial J_j}{\partial p^T} = L_{p,j}(t_0) + \frac{\partial G_j}{\partial p^T} + \sum_{i=1}^{P-1} \lambda^T(t_i^+) \left(\frac{\partial \Delta_i}{\partial p^T} \right) \quad (19)$$

kde H je Hamiltonova funkcia, G je zložka účelovej funkcie alebo obmedzení, ktorá závisí od konečných podmienok, $L_{u,j}$ a $L_{p,j}$ sú integrálne časti gradientov, λ je adjugovaná premenná a Δ je nespojitost stavového vektora v čase prepnutia.

6. Algoritmus riešenia

V algoritme sa predpokladá účelová funkcia J_0 a k obmedzení, kde $j = \overline{1, k}$. Potom môže byť napísaný nasledujúci optimalizačný algoritmus, ktorý rozdelíme do dvoch krokov. V prvom kroku integrujeme systém (5) alebo (6) a integrálne tvary F_j na celom časovom intervale $t \in \langle t_0; t_P \rangle$. Reštart integrácie nastáva pri podmienkach zámeny v čase t_S , pričom stavy môžu byť nespojité podľa rovnice (10). Ďalší krok slúži na výpočet gradientov účelovej funkcie a obmedzení v každom kroku iterácie počas cyklu ($j = \overline{0, k}$); kde adjugované premenné $\lambda_j(t_P)$ sú inicializované podľa rovnice

$$\lambda_j(t_P) = \frac{\partial G_j}{\partial x(t_P)} \quad (20)$$

Následne, integrálne časti gradientov (dočasné veličiny) $L_{u,j}$ a $L_{p,j}$ sú nastavené na nulu a spätne integrované v čase $t \in \langle t_P; t_0 \rangle$ spolu s adjugovaným systémom, pomocou rovníc

$$L_{u,j} = \frac{\partial H_j}{\partial u_i} \quad (21)$$

$$L_{p,j} = \frac{\partial H_j}{\partial p} \quad (22)$$

$$\dot{\lambda}_j(t) = - \frac{\partial H_j}{\partial x} \quad (23)$$

V prípade nespojitosti adjugovaných rovníc reštartujeme integráciu v týchto bodoch na základe rovnice

$$\lambda_j^T(t_i^-) = \lambda_j^T(t_i^+) \left[\mathbf{I} + \left(\frac{\partial \Delta_i}{\partial x^T(t_i^-)} \right) \right] \quad i = \overline{1, (P-1)} \quad (24)$$

a pokračujeme v integrácii rovníc (21 – 23). Nakoniec vypočítame gradienty J_j na základe rovníc (16 – 19) pre jednotlivé optimalizované premenné (časové úseky (16 – 17), vektor riadenia (18) a parametre (19)).

Týmto získame hodnoty J_j v prvom kroku a hodnoty gradientov v druhom kroku. Z numerických dôvodov sa jednotlivé časové úseky t_i optimalizujú ľahšie ako absolútna hodnota času. Preto sa gradienty vzhľadom na čas mierne modifikovali na základe rovnice

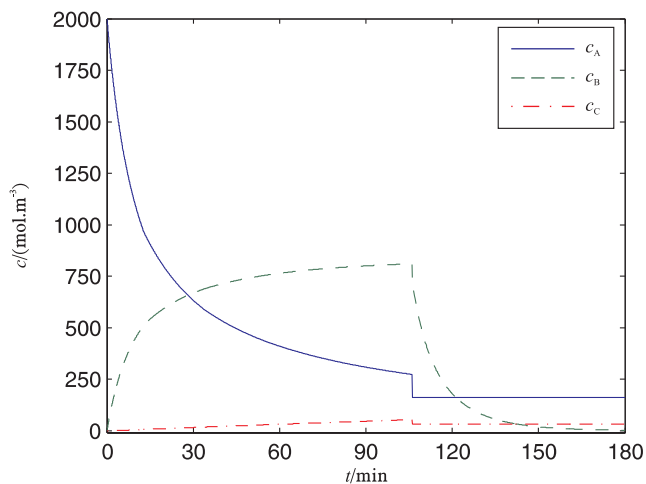
$$\frac{\partial J_j}{\partial \Delta t_i} = \sum_{r=1}^P \frac{\partial J_j}{\partial t_r} \frac{\partial t_r}{\partial \Delta t_i} \quad (25)$$

Toto je všetko, čo treba vedieť pri riešení NLP problému.

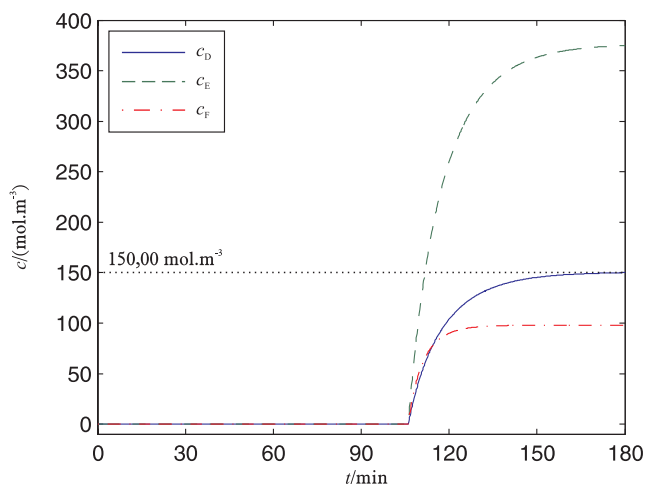
6.1 Implementácia algoritmu riešenia

Prezentovaný algoritmus bol implementovaný v programovacom jazyku FORTRAN 77, ktorý sa vyznačuje rýchlosťou matematických operácií. Prvá časť programu obsahuje ODE solver pre doprednú a spätnú integráciu so schopnosťou prepnutia dynamiky v čase t_S [6]. Druhá časť programu obsahuje modul, ktorý počítá gradienty a volá NLP solver NLPQL [7], pri ktorom dochádza k minimalizácii účelovej funkcie.

Pri spätnom integrovaní adjugovaných rovníc treba poznať hodnotu stavových veličín $x(t)$. V našom prípade program pri doprednej integrácii uloží hodnoty stavových veličín do vopred na-



Obr.2 Optimálne stavové trajektórie zložiek A, B, C



Obr.3 Optimálne stavové trajektórie zložiek D, E, F

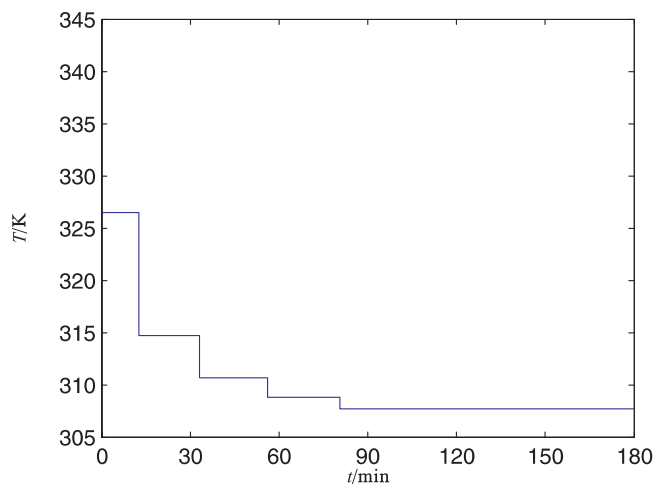
definovanej mriežky a pri spätnej integrácii tieto hodnoty interpoluje kubickou interpoláciou.

7. Dosiahnuté výsledky

Pri danom optimalizačnom probléme sme uvažovali nad situáciou, keď prvá reakčná fáza obsahovala $(P - 1)$ časových intervalov a druhá reakčná fáza iba jeden interval. Začiatkové hodnoty optimalizovaných premenných boli zadefinované ako $\Delta t_i = 15$ min, $u_i = 350$ K, $S = 0,1$ m³ s obmedzeniami na $u_i \in [298;398]$ pre $t \in [t_0; t_S]$, $S \in [0;0,1]$ a $\Delta t_i \in [10;100]$. Tolerancia optimalizácie a integrácie bola nastavená na hodnotu 10^{-4} a 10^{-10} .

Optimálny profil koncentrácie zložiek A, B, C je zobrazený na obr. 2 a zložiek D, E, F na obr. 3. Príslušná trajektória riadenia pre $P = 6$ úsekov je na obr. 4. Prvá a druhá podmienka zabezpečila, že koncová hodnota zložky D je 150 mol.m^{-3} a optimálne trvanie procesu je 180 min. Vidíme, že dané riešenie leží na obmedzení, čo je typické pre veľa problémov optimálneho riadenia. Optimálna hodnota účelovej funkcie je $25,54 \text{ mol}$, čo je v dobrej zhode s hodnotou, ktorá je uvedená v práci [4], kde je koncová hodnota účelovej funkcie získanej pomocou citlivostných rovníc $25,55 \text{ mol}$.

Teraz si ukážeme porovnanie prístupu adjugovaných rovníc oproti pôvodným citlivostným rovniciam. Chemický reaktor je opísaný 6 diferenciálnymi rovnicami a optimalizačný problém zahŕňa účelovú funkciu J_0 , jedno obmedzenie závislé od stavových veličín J_1 a druhé nezávislé od stavových veličín J_2 . Ak budeme uvažovať 6 intervalov, potom musí byť integrovaných 20 rovníc pre každú NLP iteráciu. Z toho 6 rovníc pri doprednej integrácii a 2×7 rovníc pri spätnej integrácii (6 adjugovaných rovníc,



Obr.4 Optimálny profil riadenia pre 6 diskretizovaných intervalov

1 integrálna časť Hamiltoniánu) na získanie gradientov vzhľadom na účelovú funkciu a obmedzenia. Prístup pomocou citlivostných rovníc si vyžaduje integrovať 72 diferenciálnych rovníc (počet stavov násobený počtom optimalizovaných premenných).

Na základe predchádzajúceho odseku môžeme povedať, že ak počet časových intervalov narastá, potom rozdiel v počte integrácií tiež narastá v prospech adjugovaných rovníc, pretože pri citlivostných rovniciach každá nová optimalizovaná premenná generuje ďalšie rovnice, ktoré treba integrovať. Z toho vyplýva, že celkový čas výpočtu pomocou adjugovaných rovníc bude značne menší oproti citlivostným rovniciam, pretože čas na integráciu diferenciálnych rovníc predstavuje viac ako 80 % celkového času riešenia.

Treba zdôrazniť, že CVP je priama metóda, ktorej riešenie je často lokálneho charakteru. Avšak v tomto prípade riešenia s viacerými časovými intervalmi [5] indikujú, že získané výsledky sú globálne.

Záver

V príspevku sme ukázali algoritmus a riešenie problému pomocou dynamickej optimalizácie aplikovanej na dvojstupňový chemický reaktor, kde v určitom časovom momente dochádza k zmene matematického opisu. Bola použitá parametrizácia vektora riadenia a gradienty pre nelineárne programovanie boli vyjadrené z teórie optimálneho riadenia. Pôvodný problém bol riešený pomocou citlivostných rovníc, ktoré sú preferované pre ľahšiu implementáciu. Avšak prístup pomocou adjugovaných rovníc je v prípade systému opísaného veľkým počtom diferenciálnych rovníc a malým počtom obmedzení výhodnejší, pretože sa značne zníži počet integrácií, ktoré musia byť vykonané pri každej NLP iterácii tak, ako sme ukázali v predchádzajúcej kapitole. Simulácia ukázala, že pomocou prezentovanej metódy sme schopní navrhnúť optimálnu trajektóriu riadenia a tým aj maximalizovať zisk z produkcie daného zariadenia procesného priemyslu.

Podakovanie

Príspevok vznikol s grantovou podporou grantovej agentúry VEGA MŠ SR a SAV pre projekty č. 1/1046/04 a 1/3081/06.

Literatúra

- [1] HIRMAJER, T., FIKAR, M.: Optimálne riadenie systémov s hybridnou dynamikou. AT&P journal, 12 (12), s. 81 – 84, 2005.
- [2] SCHLEGEL, M., MARQUARDT, W.: Detection and exploitation of the control switching structure in the solution of dynamic

optimization problems. Journal of Process Control, 16, p. 275 – 290, 2006.

[3] COELHO, M. A. Z., RUSSO, C., ARAÚJO, O. Q. F.: Optimization of a sequencing batch reactor for biological nitrogen removal. Water Research, 34 (10), p. 2809 – 2817, 2000.

[4] VASSILIADIS, V. S., SARGENT, R. W. H., PANTELIDES, C. C.: Solution of a class of multistage dynamic optimization problems. 1. problems without path constraints, 2. problems with path constraints. Industrial and Engineering Chemistry Research, 33 (9), p. 2111 – 2122, 2123 – 2133, 1994.

[5] HIRMAJER, T., FIKAR, M.: Optimal Control of a Hybrid Dynamical System: Two-stage Reactor System. Department of Information Engineering and Process Control, FCFT STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia, 2006.

[6] PETZOLD, L. R., HINDMARSH, A. C.: LSODAR. Výskumná správa, Computing and mathematics research division, lawrence livermore national laboratory livermore, ca 94550, 1997.

[7] SCHITTKOWSKI, K.: NLPQL: A new fortran implementation of a sequential quadratic programming algorithm for parallel computing. Výskumná správa, Department of Mathematics, University of Bayreuth, D – 95440 Bayreuth, Germany, 1981.

Ing. Tomáš Hirmajer
doc. Dr. Ing. Miroslav Fikar

48

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
Tel.: 02/52 49 52 69
e-mail: tomas.hirmajer@stuba.sk
miroslav.fikar@stuba.sk