

ПРИМЕНЕНИЕ АЛГОРИТМА ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ ПРИ ОПТИМИЗАЦИИ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКТОРОВ

А. И. РУБАН

(Представлена научным семинаром по автоматическому управлению кафедры
ПМАХП)

Задачи аналитического расчета оптимальных условий протекания процессов в химических реакторах можно ставить и решать лишь при наличии адекватного математического описания реакторов. Поэтому мы считаем, что такое описание имеется. Например, в стационарном режиме реакторы идеального вытеснения описываются системой обыкновенных дифференциальных уравнений (ДУ) относительно концентраций реагентов. В этом типе реакторов основной переменной, по которой проводится оптимизация, является температурный профиль [1—3].

Для конкретности в дальнейшем мы остановимся лишь на указанном типе реакторов, хотя приводимые основные результаты излагаются в общем виде и могут быть применены для широкой группы химико-технологических объектов (теплообменники, ректификационные и абсорбционные колонны и т. п.).

1. Постановка задачи

Считаем, что исследуемый процесс описывается системой ДУ

$$\frac{d\bar{x}}{dt} = \bar{f}(\bar{x}(t), \bar{u}(t)), \quad (1,1)$$

где $\bar{x}(t)$ — n -мерный вектор-столбец фазовых координат;
 $\bar{u}(t)$ — m -мерный вектор-столбец управляющих воздействий, принадлежащий области U . Для простоты предположим, что начало и конец изменения переменной t фиксированы ($t \in [0, t_k]$), и заданы начальные значения фазовых координат

$$\bar{x}(0) = \bar{x}_0. \quad (1,2)$$

Необходимо так подобрать вектор управляющих воздействий, чтобы первая составляющая вектора \bar{x} в точке $t = t_k$ принимала минимальное значение

$$x_1(t_k) = \min_{\bar{u}(t) \in U}. \quad (1,3)$$

Если кроме начальных условий (1,2) заданы еще и конечные значения для некоторых составляющих вектора \bar{x} , то в дальнейшем в сопряженных уравнениях (1,5) для соответствующих $\bar{\lambda}$ не будут заданы граничные условия.

В соответствии с принципом максимума [1—3] оптимальные управляющие воздействия $\bar{u}(t)$ находятся из критерия

$$H = \bar{\lambda}^T(t) \bar{f}(\bar{x}(t), \bar{u}(t)) = \max_{\bar{u}(t) \in U} \quad (1,4)$$

Здесь T — символ транспонирования матриц, а переменная $\bar{\lambda}(t)$, имеющая размерность вектора $x(t)$, удовлетворяет сопряженной системе

$$\frac{d\bar{\lambda}}{dt} = - \left(\frac{\partial \bar{f}}{\partial \bar{x}} \right)^T \bar{\lambda} = - \left(\frac{\partial H}{\partial \bar{x}} \right)^T, \quad \bar{\lambda}(t_k) = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (1,5)$$

которая решается совместно с ДУ (1,1) при условиях (1,2).

Если \bar{u} лежит внутри области U , то из необходимого условия максимума H

$$\frac{dH}{d\bar{u}} = 0 \quad (1,6)$$

иногда можно получить явную зависимость оптимальных управлений от переменных \bar{x} и $\bar{\lambda}$.

$$\bar{u}^*(t) = \bar{u}^*(\bar{x}, \bar{\lambda}). \quad (1,7)$$

Учитывая (1,7) и решая краевую задачу (1,1), (1,2), (1,5), получаем искомые оптимальные управляющие воздействия $\bar{u}^*(t)$.

Таким образом, на основе использования принципа максимума исходная задача на оптимум свелась к решению системы нелинейных ДУ порядка $2n$ с условиями, заданными в начале ($t = 0$) и в конце траекторий ($t = t_k$), т. е. к так называемой нелинейной двухточечной краевой задаче. Получение надежных численных методов решения этой задачи является одной из основных проблем в теории управления. Из всех существующих методов наиболее универсальным и достаточно эффективным является метод квазилинеаризации [4], успешно развиваемый за рубежом Р. Беллманом и его сотрудниками. В данной статье для решения двухточечной краевой задачи используется другой метод [5], метод линеаризации (чувствительности). Он проще метода квазилинеаризации в вычислительном отношении и в ряде случаев обеспечивает более быструю скорость сходимости.

2. Метод решения краевой задачи

Систему ДУ (1,1), (1,2), (1,5) запишем в компактной форме

$$\frac{d\bar{z}(t)}{dt} = \bar{g}(\bar{z}), \quad (2,1)$$

где $\bar{z}(t)$ — N -мерный вектор-столбец переменных, представляющих собой $\bar{x}(t)$ и $\bar{\lambda}(t)$, с линейными краевыми условиями

$$\begin{aligned} (\bar{z}(0), \bar{a}_i) &= b_i, \quad i = 1, 2, \dots, r, \\ (\bar{z}(t_k), \bar{a}_i) &= b_i, \quad i = r + 1, \dots, N. \end{aligned} \quad (2,2)$$

Здесь (\bar{z}, \bar{a}) — скалярное произведение векторов, \bar{a}_i, b_i — известные константы. Требуется получить решение системы (2,1) — $\bar{z}(t)$.

Если бы для ДУ (2,1) были заданы значения вектора \bar{z} либо в начальной $t = 0$, либо в конечной $t = t_k$ точках, то это была бы

задача Коши, и решать ее можно было бы любым стандартным численным методом на УЦВМ. Использование метода линеаризации как раз позволяет от условий (2,2) перейти к начальным условиям для $\bar{z}(t)$, т. е. позволяет привести краевую задачу (2,1), (2,2) к задаче Коши.

Так как уравнения (2,1) нелинейные, то, естественно, процедура решения будет итерационной и сводится к следующему. На $l+1$ -й итерации совместно решаем систему DY с известными начальными условиями

$$\frac{d\bar{z}^l(t)}{dt} = \bar{g}(\bar{z}^l(t)), \quad \bar{z}^l(0) = \bar{z}_0^l, \quad (2,3)$$

$$\frac{d\bar{Z}^l(t)}{dt} = J(\bar{z}^l) \bar{Z}^l(t), \quad \bar{Z}^l(0) = I,$$

где $J(\bar{z}^l) = \left(\frac{\partial g_i}{\partial z_j} \right)$ — Якобива матрица, (2,4)

I — единичная матрица,

$\bar{Z}^l(t)$ — матрица функций чувствительности размером $N \times N$, и вычисляем $(l+1)$ -е приближение начальных условий $\bar{z}^{l+1}(0)$ из системы линейных неоднородных алгебраических уравнений

$$(\bar{z}^{l+1}(0), \bar{a}_i) = b_i, \quad i = 1, \dots, r, \quad (2,5)$$

$$(\bar{Z}^l(t_\kappa) \bar{z}^{l+1}(0), \bar{a}_i) = b_i - (\bar{z}^l(t_\kappa) - \bar{Z}^l(t_\kappa) \bar{z}^l(0), \bar{a}_i), \quad i = r+1, \dots, N.$$

Успешность применения описанной итерационной процедуры в значительной мере зависит от успешности выбора начального приближения начальных условий для системы (2,1) — $\bar{z}^0(0)$. Можно показать, что если $\bar{z}^0(0)$ выбрано в окрестности неизвестных истинных начальных условий $\bar{z}(0)$, то последовательность $\bar{z}^0(0), \bar{z}^1(0), \dots, \bar{z}^l(0), \dots$, получаемая из уравнений (2,3), (2,5), сходится к $\bar{z}(0)$ и имеет квадратичную сходимость

$$\|\bar{z}^{l+1}(0) - \bar{z}(0)\| \leq \delta \|\bar{z}^l(0) - \bar{z}(0)\|^2, \quad (2,6)$$

где $\|\bar{z}^l(0) - \bar{z}(0)\|$ означает норму отклонения вектора $\bar{z}^l(0)$ от вектора $\bar{z}(0)$.

3. Пример. Рассмотрим химический реактор идеального вытеснения, в котором идет реакция типа



где P — полезный продукт реакции, D — побочный продукт. Будем обозначать через $x_1(t)$ и $x_2(t)$ соответственно концентрации продуктов P и A . t — это длина вектора, которая меняется от 0 до t_κ . Считаем также, что задана концентрация продукта A в начале и в конце реактора, т. е. $x_2(0) = x_2^0$, $x_2(t_\kappa) = x_2^\kappa$, и концентрация продукта P в начале реактора, т. е. $x_1(0) = x_1^0$.

Необходимо так подобрать температурный профиль реактора, чтобы выход полезного продукта был максимальным

$$x_1(t_\kappa) = \max_{T(t)} \quad (3,2)$$

Математическим описанием рассматриваемого реактора является система ДУ

$$\frac{dx_1}{dt} = \kappa_1 x_2, \quad x_1(0) = x_1^0, \quad (3,3)$$

$$\frac{dx_2}{dt} = -(\kappa_1 + \kappa_2) x_2, \quad x_2(0) = x_2^0, \quad x_2(t_\kappa) = x_2^\kappa,$$

где константы скоростей κ_1 , κ_2 связаны с температурой реактора в каждой точке по закону Арениуса

$$\kappa_1 = \kappa_{10} \exp\left\{-\frac{E_1}{RT(t)}\right\}, \quad \kappa_2 = \kappa_{20} \exp\left\{-\frac{E_2}{RT(t)}\right\}. \quad (3,4)$$

В константы κ_{10} , κ_{20} мы включили объемную скорость потока реагентов и сечение реактора.

В соответствии с принципом максимума запишем функцию H (1,4)

$$H = \lambda_1 \kappa_1 x_2 - \lambda_2 (\kappa_1 + \kappa_2) x_2 \quad (3,5)$$

и составим систему ДУ, сопряженную исходной (3,3);

$$\frac{d\lambda_1}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_1} = 0, \quad \lambda_1(t_\kappa) = 1, \quad (3,6)$$

$$\frac{d\lambda_2}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_2} = -\lambda_1 \kappa_1 + \lambda_2 (\kappa_1 + \kappa_2).$$

В последней системе (3,6) отсутствует граничное условие в точке $t = t_\kappa$ для λ_2 , ибо для соответствующей координаты x_2 уже задано условие в точке $t = t_\kappa$ (3,3). $\lambda_1(t_\kappa) = 1$, так как ищется тах продукта $x_1(t_\kappa)$ (в отличие от (1,3)). Из первого уравнения системы (3,6) получаем, что

$$\lambda_1(t) = 1. \quad (3,7)$$

С учетом этого результата

$$H = [\kappa_1(1 - \lambda_2) - \kappa_2 \lambda_2] x_2. \quad (3,8)$$

Заметим, что в (3,8) входят лишь координаты $x_2(t)$ и $\lambda_2(t)$ и $x_2(t)$ не зависит от $x_1(t)$ (3,3). Поэтому индекс 2 для простоты можно опустить и рассматривать систему уравнений

$$\frac{dx}{dt} = -(\kappa_1 + \kappa_2) x, \quad x(l) = x^0, \quad x(t_\kappa) = x^\kappa, \quad (3,9)$$

$$\frac{d\lambda}{dt} = -\kappa_1 + \lambda(\kappa_1 + \kappa_2),$$

связанную общим температурным профилем.

Считаем пока, что на температуру реактора не наложено ограничений. Тогда можно воспользоваться необходимым условием экстремума H

$$\frac{dH}{dT} = \frac{1}{RT^2} [E_1 \kappa_1 (1 - \lambda) - E_2 \kappa_2 \lambda] x = 0. \quad (3,10)$$

Отсюда находим явную зависимость оптимальной температуры T^* от $x(t)$ и $\lambda(t)$

$$T^*(t) = \frac{E_2 - E_1}{R \ln \frac{\kappa_{20} E_2 \lambda(t)}{\kappa_{10} E_1 (1 - \lambda(t))}}. \quad (3,11)$$

Подставляем эту зависимость в (3.9) и получаем краевую задачу типа (2.1), (2.2)

$$\begin{aligned}\frac{dx}{dt} &= -\kappa_1(t) \left(\frac{E_1(1-\lambda)}{E_2\lambda} + 1 \right) x, \quad x(0) = x^0, \\ \frac{d\lambda}{dt} &= \kappa_1(t) \left(-\frac{E_1(1-\lambda)^2}{E_2\lambda} + \lambda \right), \quad x(t_\kappa) = x^\kappa,\end{aligned}\quad (3,12)$$

где

$$\kappa_1(t) = \kappa_{10} \left(\frac{\kappa_{20} E_2 \lambda(t)}{\kappa_{10} E_1 (1-\lambda(t))} \right)^{\frac{E_1}{E_1-E_2}}. \quad (3,13)$$

Решаем краевую задачу методом линеаризации (чувствительности) (см. § 2). Для этого на $l+1$ итерации любым численным методом находим решение задачи Коши

$$\begin{aligned}\frac{dx}{dt} &= -\kappa_1(t) \left(\frac{E_1(1-\lambda)}{E_2\lambda} + 1 \right) x, \quad x(0) = x^0, \\ \frac{d\lambda}{dt} &= -\kappa_1(t) \left(\frac{E_1(1-\lambda)^2}{E_2\lambda} - \lambda \right), \quad \lambda(0) = \lambda^l(0), \\ \frac{da}{dt} &= -\kappa_1(t) \left[\frac{E_1 b x_2}{(E_1-E_2)\lambda^2(1-\lambda)} + \left(\frac{E_1(1-\lambda)}{E_2\lambda} + 1 \right) a \right], \quad a(0) = 0, \\ \frac{db}{dt} &= \kappa_1(t) \left[\frac{E_1(-1+2\lambda)}{(E_1-E_2)\lambda^2(1-\lambda)} + \left(\frac{E_1(1-\lambda)}{E_2\lambda} + 1 \right) \right] b, \quad b(0) = 1,\end{aligned}\quad (3,14)$$

и следующее приближение для недостающих в (3,12) начальных условий $\lambda(0)$ вычисляем из уравнения

$$\lambda^{l+1}(0) = \frac{x^\kappa - x(t_\kappa) + a(t_\kappa)\lambda^l(0)}{a(t_\kappa)}. \quad (3,15)$$

Рассмотрим также более простой метод решения поставленной выше задачи на оптимум. Воспользовавшись необходимыми условиями экстремума функции H (3,8), получаем, что

$$\lambda = \frac{E_1 \kappa_1}{E_1 \kappa_1 + E_2 \kappa_2}. \quad (3,16)$$

Подставляем это уравнение в H и получаем максимальное значение функции $H - H^*$

$$H^* = x(E_2 - E_1) \frac{\kappa_1 \kappa_2}{E_1 \kappa_1 + E_2 \kappa_2}. \quad (3,17)$$

Так как известно [3], что $H \geq 0$, то оптимальный температурный профиль может быть найден, лишь если

$$E_2 \geq E_1. \quad (3,18)$$

Кроме того, известно, что на оптимальной траектории функция не зависит от переменной t , то есть

$$\frac{dH^*}{dt} = 0.$$

Из этого условия, с учетом (3,9), нетрудно получить DY для оптимальной температуры

$$\frac{dT}{dt} = \frac{RT^2}{E_1 E_2} (E_1 \kappa_1 + E_2 \kappa_2). \quad (3,19)$$

В этом уравнении не известно начальное значение температуры $T(0)$; и если DY (3,19) рассматривать совместно с первым уравнением системы (3,9), то вновь получим краевую задачу, решение которой на $(l+1)$ итерации сводится к совместному решению системы

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= -(\kappa_1 + \kappa_2)x, \quad x(0) = x^0, \\ \frac{dT}{dt} &= \frac{RT^2}{E_1 E_2} (E_1 \kappa_1 + E_2 \kappa_2), \quad T(0) = T^l(0), \\ \frac{da}{dt} &= -(\kappa_1 + \kappa_2)a - \frac{1}{RT^2} (\kappa_1 E_1 + \kappa_2 E_2) bx, \quad a(0) = 0, \\ \frac{db}{dt} &= [2RT(E_1 \kappa_1 + E_2 \kappa_2) + (E_1^2 \kappa_1 + E_2^2 \kappa_2)] \frac{b}{E_1 E_2}, \quad b(0) = 1 \end{aligned} \quad (3,20)$$

с последующим вычислением $(l+1)$ приближения для $T(0)$

$$T^{l+1}(0) = T^l(0) + \frac{x^x - x(t_\kappa)}{a(t_\kappa)}. \quad (3,21)$$

Последний алгоритм был опробован на УЦВМ и показал высокую скорость сходимости.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ю. М. Волин, Г. М. Островский, М. Г. Слиньюко. Применение принципа максимума для определения оптимального режима экзотермических процессов. Кинетика и катализ, т. 4, вып. 5, М., 1963, (760—767).
2. Г. М. Островский, Ю. М. Волин. Об одном методе расчета оптимальных систем.— «Изв. АН СССР. Техническая кибернетика», № 2, 1968, (174—185).
3. А. И. Бояринов, В. В. Кафаров. Методы оптимизации в химической технологии. «Химия», М., 1969.
4. Р. Беллман, Р. Калаба. Квазилинеаризация и нелинейные краевые задачи. «Мир», М., 1968.
5. А. И. Рубан. Некоторые вопросы математического описания динамических объектов (диссертация). Томский госуниверситет, 1969.