Серия «Математика»
2011. Т. 4, № 3. С. 32—41

Онлайн-доступ к журналу:
http://isu.ru/izvestia

И З В Е С Т И Я
Иркутского государственного университета

УДК 517.97

Оптимальное управление процессом ректификации в колонне *

А. В. Аргучинцев
Иркутский государственный университет

В. П. Поплевко
Иркутский государственный университет

Аннотация. В статье рассматривается процесс ректификации в колонне, описываемый системами дифференциальных уравнений в частных производных первого порядка. В классе гладких граничных управлений, удовлетворяющих интегральным ограничениям, получено неклассическое необходимое условие оптимальности. Проведен численный эксперимент при различных входных данных и начальных приближениях.

Ключевые слова: ректификация, гладкое управление, необходимое условие оптимальности, интегральные ограничения.

1. Постановка задачи

В качестве модельной задачи в статье рассмотрен процесс разделения смесей в ректификационных колоннах, описываемый гиперболической системой первого порядка. Управлениями являются функции отбора готового продукта внизу (испаритель) и вверху (конденсатор) колонны. С математической точки зрения, особенностью поставленной задачи является то, что управления: 1) входят в правые части дифференциальных связей на границах колонны – в испарителе и конденсаторе; 2) принадлежат классу гладких функций, которые могут удовлетворять дополнительным ограничениям, задающим балансы потоков сырья и готовой продукции в колонне.

* Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 11–01–00713) и федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 гг.

Для данной задачи разработан оптимизационный алгоритм, эффективность которого проверена на ряде прикладных химико-технологических задач. Была проведена серия расчетов для разделения смесей различного типа в ректификационных колоннах К-21, К-34 (колонны Самарского СКБ "Нефтехимавтоматика"). В качестве примера приведен процесс ректификации в колонне К-34 (установка сернокислотного алкилирования изобутана бутиленами).

Математическая модель процесса ректификации представляет собой систему уравнений, записанных относительно концентраций компонентов [5]:

$$\frac{\partial(G_x x_i)}{\partial t} - \frac{\partial(L x_i)}{\partial s} = k_{y_i}(y_i - y_i^*) + \Phi_{x_i}, \tag{1.1}$$

$$\frac{\partial(G_y y_i)}{\partial t} + \frac{\partial(V y_i)}{\partial s} = k_{y_i}(y_i^* - y_i) + \Phi_{y_i},$$

$$\sum_{i=1}^{N} x_i = 1, \quad \sum_{i=1}^{N} y_i = 1, \quad i = \overline{1,N}.$$

Здесь x_i, y_i – концентрации i-го компонента в жидкой и паровой фазе соответственно, s – координата вдоль колонны, t – время работы колонны, G_x, G_y – количество жидкости и пара в колонне соответственно, k_{y_i} – коэффициент массопередачи, y_i^* – равновесная концентрация компонента в паре, Φ_{x_i}, Φ_{y_i} – вводимый поток жидкости и пара в колонну соответственно.

Концентрация компонентов, находящихся в испарителе, определяется из уравнения материального баланса

$$\frac{d(Q_y(t) y_i(s_0,t))}{dt} = [L(t) + F_x(t)] x_i(s_0,t) - [V(t) + W(t)] y_i(s_0,t), \tag{1.2}$$

$$y_i(s_0,t_0) = y_{i0}(s_0), \quad i = \overline{1,N};$$

$$\frac{dQ_y(t)}{dt} = L(t) + F_x(t) - V(t) - W(t), \quad Q_y(t_0) = Q_{y0}.$$

Уравнения материального баланса в конденсаторе

$$\frac{d(Q_x(t) x_i(s_1,t))}{dt} = V(t) y_i(s_1,t) - [L(t) + D(t)] x_i(s_1,t), \tag{1.3}$$

$$x_i(s_1,t_0) = x_{i0}(s_1), \quad i = \overline{1,N};$$

$$\frac{dQ_x(t)}{dt} = V(t) - L(t) - D(t), \quad Q_x(t_0) = Q_{x0}.$$

В граничных условиях (1.2), (1.3) присутствуют управляемые потоки $D(t)$, $W(t)$. Здесь Q_y, Q_x – количество жидкости в испарителе и конденсаторе соответственно.

Цель задачи – достижение заданных параметров θ_{1i}, θ_{2i} в конечный момент времени

$$J = \sum_{i=1}^{N} \int_{t_0}^{t_1} [K_{1i}(x_i(s_1,t) - \theta_{1i})^2 + K_{2i}(y_i(s_0,t) - \theta_{2i})^2]\, dt \to \min\,. \qquad (1.4)$$

Здесь N – число компонентов в смеси, K_{1i}, K_{2i} – коэффициенты, определяющие ценность продукта.

Управления (потоки $D(t), W(t)$) удовлетворяют дополнительным ограничениям, задающим баланс потоков сырья и готового продукта в колонне за весь период работы

$$\int_T [F_x(t) - D(t) - W(t)]\, dt = 0. \qquad (1.5)$$

Предполагается, что функции управления принадлежат классу гладких функций.

В работе [1] при определенных предположениях исходная гиперболическая система была преобразована к системе

$$\frac{\partial x_i(s,t)}{\partial t} - c_1 \frac{\partial x_i(s,t)}{\partial s} = \overline{a}_i(s,t)x_i(s,t) + \overline{b}_i(s,t)y_i(s,t) + F_{1i}(s,t), \qquad (1.6)$$

$$\frac{\partial y_i(s,t)}{\partial t} + c_2 \frac{\partial y_i(s,t)}{\partial s} = \tilde{a}_i(s,t)x_i(s,t) + \tilde{b}_i(s,t)y_i(s,t) + F_{2i}(s,t),\ i = \overline{1,N},$$

где

$$\frac{L(s,t)}{G_x(s,t)} = c_1 = const, \quad \frac{V(s,t)}{G_y(s,t)} = c_2 = const;$$

$$\overline{a}_i(s,t) = \frac{c_1 F_x(t)\phi_{xi}(s) - c_1 kV(t)\widetilde{p}(s,t) - L^{'}(t)}{L(t)},$$

$$\tilde{a}_i(s,t) = c_2 k\widetilde{p}(s,t), \quad F_{1i}(s,t) = \frac{c_1 F_x(t)\phi_{xi}(s)}{L(t)}, \quad F_{2i}(s,t) = 0,$$

$$\overline{b}_i(s,t) = \frac{c_1 kV(t)}{L(t)}, \quad \tilde{b}_i(s,t) = -(kc_2 + \frac{V^{'}(t)}{V(t)}).$$

Для задачи оптимального управления дифференциальными связями на границе (1.2)–(1.6) в работах [1, 3, 4] были получены необходимые условия оптимальности гладких управлений, удовлетворяющих поточечным и интегральным ограничениям, предложены методы улучшения допустимых управлений.

Приведем основные формулировки.

2. Необходимое условие оптимальности

Введем следующие функции

$$H(\psi, x, y, s, t) =< \psi_1(s,t), \overline{a}(s,t)x(s,t) + \overline{b}(s,t)y(s,t) + F_1(s,t) > +$$

$$+ < \psi_2(s,t), \tilde{a}(s,t)x(s,t) + \tilde{b}(s,t)y(s,t) + F_2(s,t) >,$$

$$h^{(1)}(p^{(1)}, x, y, t) =< p^{(1)}(t), \frac{L(t)+D(t)}{Q_x}(y(s_1,t) - x(s_1,t)) > -$$

$$-K_1(x(s_1,t) - \theta_1)^2,$$

$$h^{(2)}(p^{(2)}, x, y, t) =< p^{(2)}(t), \frac{V(t)+W(t)}{Q_y}(x(s_0,t) - y(s_0,t)) > -$$

$$-K_2(y(s_0,t) - \theta_2)^2.$$

Тогда сопряженная задача примет вид

$$\frac{\partial \psi_1}{\partial t} - c_1 \frac{\partial \psi_1}{\partial s} = -\overline{a}^T(s,t)\psi_1 - \tilde{a}^T(s,t)\psi_2,$$

$$\psi_1(s,t_1) = 0, \;\; \psi_1(s_0,t) = \frac{1}{c_1}\frac{V(t)+W(t)}{Q_y}p^{(2)}(t);$$

$$\frac{\partial \psi_2}{\partial t} + c_2 \frac{\partial \psi_2}{\partial s} = -\overline{b}^T(s,t)\psi_1 - \tilde{b}^T(s,t)\psi_2,$$

$$\psi_2(s,t_1) = 0, \;\; \psi_2(s_1,t) = \frac{1}{c_2}\frac{L(t)+D(t)}{Q_x}p^{(1)}(t); \tag{2.1}$$

$$\frac{dp^{(1)}(t)}{dt} = \frac{L(t)+D(t)}{Q_x}p^{(1)}(t) - c_1\psi_1(s_1,t) + 2K_1(x(s_1,t)-\theta_1), \;\; p^{(1)}(t_1) = 0;$$

$$\frac{dp^{(2)}(t)}{dt} = \frac{V(t)+W(t)}{Q_y}p^{(2)}(t) - c_2\psi_2(s_0,t) + 2K_2(y(s_0,t)-\theta_2), \;\; p^{(2)}(t_1) = 0.$$

Необходимое условие оптимальности в случае интегральных ограничений на управления сформулировано в следующей теореме.

Теорема 1. *Если процесс $\{D, W, x, y\}$ является оптимальным в рассматриваемой задаче, тогда всюду на T выполняется условие*

$$h^{(1)}_{Dt}(p^{(1)}(t), x(s_1,t), y(s_1,t), t)D = 0,$$

$$h^{(2)}_{Wt}(p^{(2)}(t), x(s_0,t), y(s_0,t), t)W = 0, \;\; t \in T,$$

где $p^{(1)}(t)$, $p^{(2)}(t)$ – решение сопряженной задачи (2.1).

Доказательство основано на использовании специальной вариации, сохраняющей гладкость допустимых управлений [3, 4].

3. Оптимизационный алгоритм

Опишем общую схему алгоритма.

1. Выбираются начальные гладкие управления $D^0(t)$, $W^0(t)$, удовлетворяющие интегральным ограничениям (1.5). Пусть с помощью численного метода на k-ой итерации найдены управления $D^k(t)$, $W^k(t)$.

2. На управлениях $D^k(t)$, $W^k(t)$ находим решение прямой $x^k(s,t)$, $y^k(s,t)$ и сопряженной задач $\psi_1^k(s,t)$, $\psi_2^k(s,t)$, $p_k^{(1)}(t)$, $p_k^{(2)}(t)$.

3. На полученных решениях вычисляется значение функционала $J^k = J^k(D^k(t), W^k(t))$ (1.4), строятся функции $\omega_k^{(1)}(t)$ и $\omega_k^{(2)}(t)$:

$$\omega_k^{(1)}(t) = h^{(1)}_{D^k t}(p_k^{(1)}(t), x^k(s_1,t), y^k(s_1,t), t)D^k(t),$$

$$\omega_k^{(2)}(t) = h^{(2)}_{W^k t}(p_k^{(2)}(t), x^k(s_0,t), y^k(s_0,t), t)W^k(t).$$

Далее, проверятся условие оптимальности $\omega_k^{(1)}(t) = 0$, $\omega_k^{(2)}(t) = 0$. Если условие оптимальности выполнено, метод заканчивает свою работу.

4. Если данные управления не удовлетворяют условию оптимальности, строятся их гладкие вариации:

$$D^k_{\varepsilon_{1k}}(t) = (1 + \varepsilon_{1k}\dot{\delta}_k^{(1)}(t))D^k(t + \varepsilon_{1k}\delta_k^{(1)}(t)),$$

$$W^k_{\varepsilon_{2k}}(t) = (1 + \varepsilon_{2k}\dot{\delta}_k^{(2)}(t))W^k(t + \varepsilon_{2k}\delta_k^{(2)}(t)),$$

$$\delta_k^{(1)}(t) = \frac{\gamma_k^{(1)}(t)}{K_1}, \quad \delta_k^{(2)}(t) = \frac{\gamma_k^{(2)}(t)}{K_2},$$

$$\gamma_k^{(1)}(t) = \frac{(t-t_0)(t_1-t)\omega_k^{(1)}(t)}{(t_1-t_0)\max\limits_{t\in T}|\omega_k^{(1)}(t)|}, \quad \gamma_k^{(2)}(t) = \frac{(t-t_0)(t_1-t)\omega_k^{(2)}(t)}{(t_1-t_0)\max\limits_{t\in T}|\omega_k^{(2)}(t)|},$$

$$K_1 = \max_{t\in T}|\dot{\gamma}_k^{(1)}(t)|, \quad K_2 = \max_{t\in T}|\dot{\gamma}_k^{(2)}(t)|.$$

Параметры ε_{1k}, ε_{2k} определяются из численного решения одномерной задачи минимизации

$$\varepsilon_{1k}, \varepsilon_{2k}: \ J^k(D^k_{\varepsilon_{1k}}(t), W^k_{\varepsilon_{2k}}(t)) = \min_{\varepsilon_1,\varepsilon_2\in[0,1]} J^k(D^k_{\varepsilon_1}(t), W^k_{\varepsilon_2}(t)).$$

5. В качестве $k+1$-приближения выбираются

$$D^{k+1}(t) = D^k_{\varepsilon_{1k}}(t), \quad W^{k+1}(t) = W^k_{\varepsilon_{2k}}(t),$$

и итерационный процесс продолжается дальше.

Критерием остановки служит одна из ситуаций (аналогично [2]), полученных на k-й итерации метода:

а) выполнение с заданной точностью необходимого условия оптимальности для функций $D^k(t)$, $W^k(t)$. Например, близость к нулю соответствующих функций $\omega_k^{(1)}(t)$, $\omega_k^{(2)}(t)$ в каждой точке $t \in T$ можно гарантировать, если справедливы соответствующие неравенства

$$\max_{t\in T} |\omega_k^{(1)}(t)| \leq 10^{-5}, \ \ \max_{t\in T} |\omega_k^{(2)}(t)| \leq 10^{-5};$$

б) достижение заданной точности по значению функционала. Поскольку минимальное значение функционала известно и равно $J^* = 0$, то условием остановки может быть, например, неравенство

$$J^k \leq 10^{-3};$$

в) неулучшение значения функционала, полученного на предыдущей $(k-1)$-й итерации, например

$$J^k - J^{k-1} > 10^{-6}.$$

Задача удовлетворяет условиям теоремы о сходимости, доказанной в [2]: 1) целевой функционал ограничен снизу; 2) функции, входящие в правую часть гиперболической системы (1.1), линейны по состоянию процесса (по концентрации); следовательно, их производные удовлетворяют условию Липшица; 3) функции, входящие в правую часть дифференциальных условий на границах (1.2), (1.3), линейны по состоянию и управляющим потокам; следовательно, их производные удовлетворяют условию Липшица.

Тогда последовательности управлений, генерируемые методом, являются релаксационными, то есть

$$J(D^{k+1}, W^{k+1}) \leq J(D^k, W^k), \ k = 0, 1, 2, \ldots,$$

и сходятся в смысле

$$\mu^{(1)}(D^k) = \int_T \delta_k^{(1)}(t)\omega_k^{(1)}(t)dt \to 0, \ k \to \infty,$$

$$\mu^{(2)}(W^k) = \int_T \delta_k^{(2)}(t)\omega_k^{(2)}(t)dt \to 0, \ k \to \infty.$$

Рассмотрим тестовый пример.

4. Численный эксперимент

В качестве примера приведен процесс ректификации в колонне К-34, предназначенной, в частности, для сернокислотного алкилирования изобутана бутиленами (разделяемая многокомпонентная смесь сведена к бинарной [5]).

В качестве входных данных были выбраны следующие данные одного из режимов работы колонны: $T = [0, 20]$ – временной промежуток работы колонны; $S = [0, 20]$ – геометрические размеры колонны; $s_0 = 0$ – координата испарителя, $s_1 = 20$ – координата конденсатора; c_1=36 м/ч, c_2=520 м/ч – потоковые коэффициенты жидкости и пара соответственно; Q_x=50 кмоль, Q_y=30 кмоль – удерживающие способности в конденсаторе и испарителе соответственно. Параметры для целевого функционала: $K_{1i} = K_{2i} = 1,\ i = 1, 2$ – весовые коэффициенты, определяющие ценность продукта; $\theta_{11} = 0,84;,\quad \theta_{12} = 0,16;\quad \theta_{21} = 0,2;\quad \theta_{22} = 0,8$.

В качестве управления выбирается отбор готового продукта в конденсаторе – $D(t)$ (бутан), в испарителе – $W(t)$ (пентан) соответственно.

Пример

При проведении численного эксперимента применялась следующая методика построения конкретного варианта задачи оптимального управления. На первом этапе задавались концентрации компонентов в готовых продуктах, удовлетворяющие начальным условиям, и функции отбора готового продукта в испарителе $W^*(t)$ и конденсаторе $D^*(t)$, а именно

$$D^*(t) = -2\sin(t/4) + 6\cos(t/2) - 6\sin(t) + 34,$$

$$W^*(t) = \cos(t/2) - 4\sin(t/6) - \sin(t) + 60.$$

Остальные параметры задачи, такие как поток жидкости в колонне $L(t)$, поток пара в колонне $V(t)$, вводимый поток $F_x(t) = 94,07$ и коэффициенты задачи определялись по этим функциям. Значение функционала на этом процессе $J^* = 0,0003$.

Далее решалась оптимизационная задача с начальными управлениями:

$$D^0(t) = 8\cos(t/2) + 32,$$

$$W^0(t) = -8\sin t + 61,$$

удовлетворяющими интегральному ограничению (1.5). Значение функционала на начальном приближении $J^0 = 5,46$.

Результаты вычислений – на рис. 1 и в табл. 1.

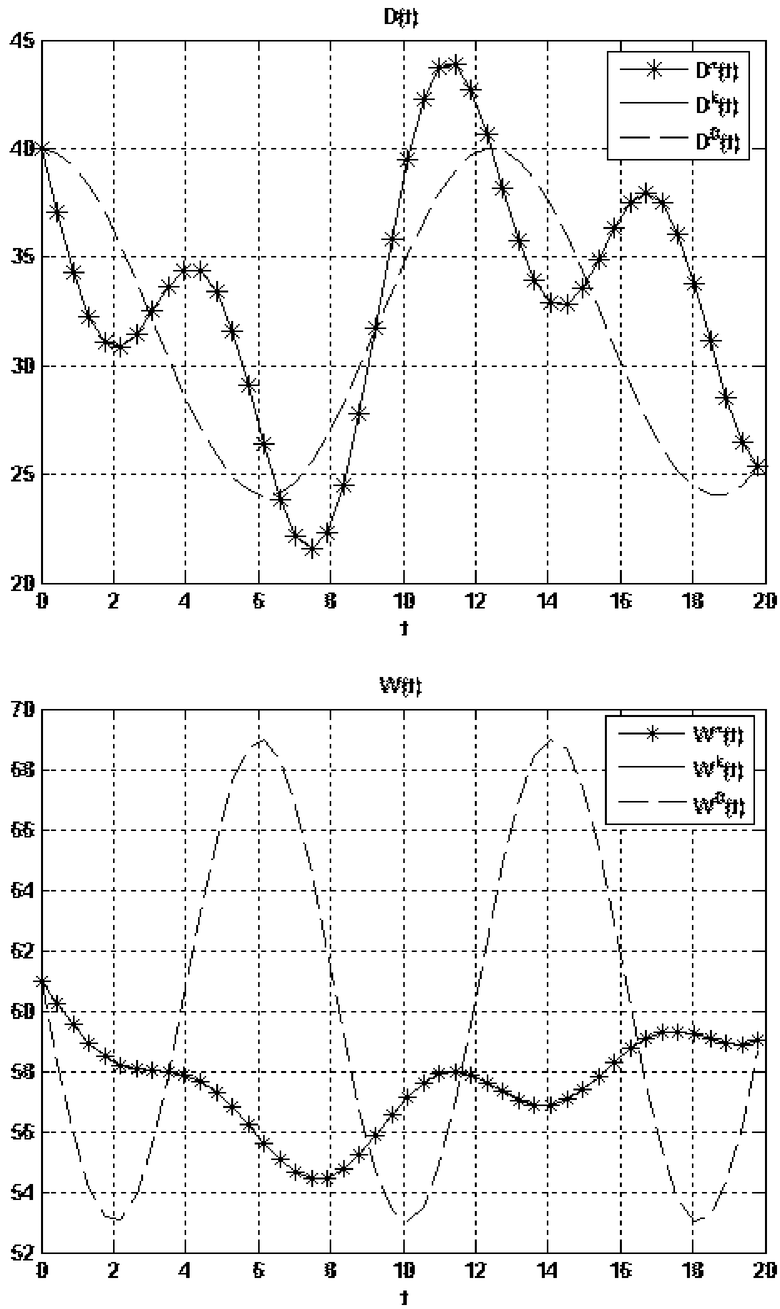
D(t)
$D^*(t)$
$D^k(t)$
$D^a(t)$
45
40
35
30
25
20
0
2
4
6
8
10
12
14
16
18
20
t
W(t)
$W^*(t)$
$W^k(t)$
$W^a(t)$
70
68
66
64
62
60
58
56
54
52
t

Рис. 1.

Таблица 1.

N	t	$D^*(t)$	$D^0(t)$	$D^k(t)$	$W^*(t)$	$W^0(t)$	$W^k(t)$
1	0	40	40	40	61	61	61
6	2,222	30,836	35,549	30,831	58,201	53,08	58,197
13	5,333	31,6	24,885	31,9	56,818	67,587	56,810
20	8,444	24,476	28,234	24,468	54,752	59,234	54,746
26	11,111	43,729	37,974	43,735	57,897	54,913	57,902
32	13,778	33,912	38,577	33,917	56,893	68,426	56,899
40	17,333	37,492	26,191	37,488	59,272	55,331	59,277
46	20	25,306	25,306	25,301	59,010	59,010	59,013

Алгоритм закончил работу, достигнув заданной точности по значению функционала на 123 итерации ($J^k = 0,00056$). Управления на выходе близки к оптимальным на всей области определения. При этом

$$\max_{t\in T}|\omega_k^{(1)}(t)| = 0,0031, \quad \max_{t\in T}|\omega_k^{(2)}(t)| = 0,0019.$$

Проведенные численные эксперименты для оптимизации процесса ректификации показали, что предложенные методы улучшения гладких управляющих воздействий, стесненных интегральными ограничениями, в задаче оптимального управления начально-краевыми условиями полулинейных гиперболических систем могут эффективно использоваться для численного решения указанных задач.

Список литературы

1. Аргучинцев А. В. Оптимальное управление граничными условиями гиперболической системы на примере задачи химической ректификации / А. В. Аргучинцев, В. П. Поплевко // Труды XV Байкальской международной школы-семинара «Методы оптимизации и их приложения». – Иркутск, 2011. – Т. 3. – С. 36–40.
2. Аргучинцев А. В. Оптимальное управление гиперболическими системами / А. В. Аргучинцев. – М. : Физматлит, 2007. – 168 с.
3. Аргучинцев А. В. Задачи оптимального управления, возникающие при моделировании процессов химической ректификации / А. В. Аргучинцев, В. П. Поплевко // Изв. Иркут. гос. ун-та. Сер. Математика. – 2009. – Т. 2, № 1. – С. 52–63.
4. Аргучинцев А. В. Оптимизация гиперболических систем при интегральных ограничениях на гладкие управления / А. В. Аргучинцев, С. А. Авдонин, В. П. Поплевко // Изв. Иркут. гос. ун-та. Сер. Математика. – 2010. – Т. 3, № 3. – С. 28–40.
5. Демиденко Н. Д. Моделирование и оптимизация систем с распределенными параметрами / Н. Д. Демиденко, В. И. Потапов, Ю. И. Шокин. – Новосибирск : Наука, 2006. – 551 с.

A. V. Arguchintsev, V. P. Poplevko

Optimal control of process of fractionization in a tower

Abstract. A process of fractionization in a tower is considered. This process is described by a system of first-order partial differential equations. A non-classic necessary optimality condition is given for the optimal control problem in a class of smooth admissible controls. Functions of controls are satisfied by integral constraints. The numerical experiment is carried out.

Keywords: fractionization, smooth control, necessary optimality condition, integral constraints

Аргучинцев Александр Валерьевич, доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой, Институт математики, экономики и информатики, Иркутский государственный университет, 664003, Иркутск, ул. К. Маркса, 1, тел.: (3952)20-13-07 (prorectornir@isu.ru)

Поплевко Василиса Павловна, кандидат физико-математических наук, преподаватель, Институт математики, экономики и информатики, Иркутский государственный университет, 664003, Иркутск, ул. К. Маркса, 1, тел.: (3952)20-13-07
(vasilisa@math.isu.ru)

Arguchintsev Alexander, Irkutsk State University, 1, K. Marks St., Irkutsk, 664003, Phone: (3952)20-13-07 (prorectornir@isu.ru)

Poplevko Vasilisa, Irkutsk State University, 1, K. Marks St., Irkutsk, 664003, Phone: (3952)20-13-07 (vasilisa@math.isu.ru)