

OPTIMAL STYRNING AV SULFATKOKARE

LARS-OLOF NILSSON

RE - 108 mars 1972

TILLHÖR REFERENSBIBLIOTEKET
UTLÅNAS EJ

OPTIMAL STYRNING AV SULFITKOKARE

Examensarbete utfört vid Institutionen för Reglerteknik,

Lunds Tekniska Högskola

av Lars-Olof Nilsson

Ansvarig handledare: Lennart Ljung

Lund, mars 1972

Abstract.

The purpose with optimal control theory is to determine what is possible to achieve with a certain dynamic system.

The performance of the system is measured by a scalar cost functional, and control over a period of time is then chosen to minimize this functional.

Differential dynamic programming is a new method for determining optimal control of dynamic systems described by sets of nonlinear ordinary differential equations. This technique vastly reduces storage requirements compared to dynamic programming.

In this work has been used an algorithm based on differential dynamic programming to determine optimal control of the acid sulfit cooking process.

The problem contains both state variable endpoint equality constraints, state variable inequality constraints and control variable inequality constraints and in addition is singular.

The algorithm used with methods to determine singular controls has worked out succesfully on this problem.

Sammanfattning.

Optimering är ett hjälpmedel för att utröna vad som är möjligt att uppnå i ett visst dynamiskt system.

Systemets syfte beskrivs med en skalär funktion, förlustfunktionen, och den styrstrategi, som minimerar förlustfunktionen, bestäms.

Styrstrategien består av ett styrprogram för den tidsrymd processen omfattar.

Differentiell dynamisk programmering är en metod att bestämma optimal styrstrategi för dynamiska system beskrivna med system av olinjära ordinära differentialekvationer.

I denna undersökning har en algoritm baserad på differentiell dynamisk programmering använts för att bestämma optimal styrning av en sulfittkokare.

Problemet innehåller både randvillkor på tillståndsvariablerna och begränsningar på både tillstånds- och styrvariablerna för hela tidsförloppet. Problemet är dessutom singulärt.

Den använda algoritmen tillsammans med speciella metoder för singulära problem ger en mycket allmän metod, som har visat sig fungera bra i denna undersökning.

Innehåll

	sid.
1. Inledning.	1
1.1. Bakgrund.	1
1.2. Syfte.	1
2. Optimal styrning av olinjära dynamiska system.	2
2.1. Historik.	2
2.2. Formulering av optimeringsproblemet.	2
3. Sulfitcellulosaprocessen.	4
3.1. Kokningsprocessen.	4
3.2. Matematisk beskrivning av kokningsprocessen.	4
3.3. Målfunktioner.	6
3.4. Diskontinuiteter i systemekvationerna.	6
4. Tidigare undersökning.	7
4.1. Transformation av tillståndsvariablerna och problemformulering.	7
4.2. Resultat och motivering för införandet av nya styrvariabler.	8
5. Ny problemformulering.	9
5.1. Val av styrvariabler.	9
5.2. Systemekvationer och slutlig problemformulering.	9
5.3. Metoder att lösa singulära problem.	11
5.4. Minimeringen av Hamiltonfunktionen.	12
6. Numeriska resultat då totaltrycket är konstant.	13
6.1. Införande av ε - $\alpha(\cdot)$ -algoritm	13
6.2. Initialgissningens betydelse för konvergensen.	14
6.3. Karakteristiska kurvor, problemets flackhet, olika totaltryck.	16
7. Numeriska resultat av det fullständiga problemet.	25
7.1. Begränsningar på tillståndsvariablerna.	25
7.2. Modifierad form av ε - $\alpha(\cdot)$ -algoritmen.	25
7.3. Karakteristiska kurvor, synpunkter på olika styrstrategier ur kostnadssynpunkt.	28
7.4. Neddragning av sluttemperaturen.	34
8. Metodens användbarhet.	39
9. Referenser.	40

	sid.
Appendix 1: Metoder för optimering på datamaskin.	A1
A1.1. Dynamisk programmering (DP).	A1
A1.2. Differentiell dynamisk programmering (DDP).	A2
A1.3. DDP-algoritm.	A3
Appendix 2 : Beteckningar, parametervärden m.m. för sulfitcellulosa- processen.	AA1
A2.1. Beteckningar.	AA1
A2.2. Nya beteckningar.	AA2
A2.3. Parametervärden.	AA3
A2.4. Kemisk temperaturvariabel.	AA5
Appendix 3 : Kompletterande figurer.	AAA1

1. Inledning.

1.1. Bakgrund.

Inom reglertekniken har på senare år utvecklats framgångsrika metoder för optimal styrning av komplicerade olinjära dynamiska system. Samtidigt har kunskaperna ökat om hur en del komplicerade industriella processer fungerar i detalj. Genom att man har kunnat beskriva sådana processer med system av differentialekvationer, på vilka reglertekniska metoder kan appliceras, har förutsättningar skapats, att kunna lösa problem med optimal styrning av komplicerade processer. Ett dylikt problem, optimal styrning av sulfitkokare, har behandlats genom samarbete mellan inst. för Kemisk reaktionsteknik, CTH, Göteborg och inst. för Reglerteknik, LTH, Lund. Bertil Hagberg, CTH, gav en matematisk beskrivning av sulfitcellulosaprocessen och målfunktioner för styrningen. På detta styrproblem kunde sedan tillämpas optimeringsmetoder, för vilka programvaran utvecklats av Krister Mårtensson, LTH. Denna undersökning utfördes framgångsrikt av Lennart Ljung, LTH, under sensommaren 1971 (se [4]). Förutsättningarna i det ursprungliga problemet var dock sådana, att dess lösning inte direkt gick att realisera i den verkliga processen.

1.2. Syfte.

Detta examensarbete har bestått i att införa nya styrvariabler och lösa det nya styrproblemet, så att de nya lösningarna skulle ligga närmare en möjlig realisation. Syftet har därmed varit dels att tillämpa optimeringsmetoderna på ett komplext problem, dels att undersöka sulfitcellulosaprocessens uppförande.

2. Optimal styrning av olinjära dynamiska system.

2.1. Historik.

Reglering av industriella processer bestod fram till 1930-talet av att man satte in regulatorer på olika ställen i processen. Dimensioneringen av regulatorerna skedde från rent statistiska betraktelser. Senare försökte man beakta processens dynamiska egenskaper genom att tillämpa teorin för servomekanismer. Men detta var svårt och man saknade dessutom något entydigt optimalitetskriterium. Sökandet efter nya metoder ledde till införandet av en skalär funktion, förlustfunktionen, som entydigt definierar systemets syfte. Syntesproblemet kunde nu formuleras:

Bestäm styrlag, som minimerar förlustfunktionen då eventuella villkor på tillstånds- och styrvariabler är uppfyllda.

Man kunde nu utveckla metoder, som lämpar sig för behandling på datamaskin. Dynamisk programmering introducerades av Bellman. En praktiskt mer användbar metod, differentiell dynamisk programmering, används i algoritmer, som presenterades omkr. 1965 av Jacobson och Mayne, [1].

2.2. Formulering av optimeringsproblemet.

Systembeskrivning: Olinjärt dynamiskt system med kontinuerlig tid t ; $t \in [t_0, t_f]$ beskrivs med:

$$\begin{cases} \dot{x} = f(x, u, t) \\ x(t_0) = x_0 \end{cases} \quad (2.2.1)$$

$x(t) = \begin{pmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \\ \vdots \\ x_n(t) \end{pmatrix}$ där $x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t)$ är systemets tillståndsvariabler.

$u(t) = \begin{pmatrix} u_1(t) \\ u_2(t) \\ \vdots \\ u_m(t) \end{pmatrix}$ där $u_1(t), u_2(t), \dots, u_m(t)$ är systemets styrvariabler.

Begränsningar på tillstånds- och styrvariabler:

$$S(x, t) \leq 0 \quad (2.2.2)$$

$$g(u, t) \leq 0 \quad (2.2.3)$$

Randvillkor på tillståndsvariablerna i slutpunkten $t = t_f$:

$$\Psi(x(t_f), t_f) = 0 \quad (2.2.4)$$

S, g och Ψ är vektorfunktioner:

$$\text{t.ex. } g(u, t) \leq 0 \Leftrightarrow \begin{cases} g_1(t) \leq 0 \\ g_2(t) \leq 0 \\ \vdots \\ g_p(t) \leq 0 \end{cases}$$

Förlustfunktion: $V(x_0, t_0) = \int_{t_0}^{t_f} L(x, u, t) dt + F(x(t_f), t_f)$ (2.2.5)
(V, L och F är skalära funktioner.)

Optimeringsproblemet:

Bestäm en styrlag (egentligen ett styrprogram) $u(t), t \in [t_0, t_f]$,
som minimerar (2.2.5) då (2.2.2)-(2.2.4) är uppfyllda.

I appendix A1.3. ges en kort beskrivning av en algoritm för differentiell dynamisk programmering enligt [1], som klarar av villkoren (2.2.3)-(2.2.4), samt modifieringar enligt [2] för att klara även (2.2.2).

Den programvara, för algoritmen enligt A1.3., som har använts i denna undersökning har utvecklats av Krister Mårtensson, LTH.

Körningar på datamaskin har utförts på UNIVAC 1108, Lunds datacentral.

3. Sulfitcellulosaprocessen.

3.1. Kokprocessen.

Principen för kemiska metoder att framställa cellulosa ur ved är att behandla denna med kemikalier, som löser de "inkrusterade" ämnena lignin, harts m.m. Veden huggs till flis och "kokas" i stora behållare under tryck. Processen i kokaren är ingen egentlig kokning utan snarare en extraktion av flisen (engelska för kokare: digester). Kokaren kan vara kontinuerlig eller kan arbeta med avskilda kok. Kokvätskan består av en lösning av NaHSO_3 eller av $\text{Ca}(\text{HSO}_3)_2$. Efter "kokningen" och avskiljning av kokvätskan erhålls cellulosan tillsammans med en viss mängd hemicellulosa, vilken också tas till vara.

3.2. Matematisk beskrivning av kokningsprocessen.

Följande beskrivning av den sura sulfitcellulosaprocessen har givits av Bertil Haglund, CTH, [3].

Beteckningar se appendix A2.1.

Hastighetsekvationer:

1) Delignifiering

$$-dL/dt = k_L^0 e^{-E_L/T} L^m [\text{HSO}_3^-]^\alpha [\text{H}^+]^\beta \quad (3.2.1)$$

2) Hemicellulosautlösning

$$-dC/dt = k_c^0 e^{-E_c/T} C^n [\text{H}^+]^\nu \quad (3.2.2)$$

3) Bildning av anjoner till starka syror

$$d[\text{S}^-]/dt = -dL/dt \left[\frac{[\text{S}^-]}{(L_0 - L)} + (h/v)(L_0 - L) \right] + (k_s^0/v) e^{-E_s/T} (L_0 - L)^{s+1} [\text{HSO}_3^-]^\delta [\text{H}^+]^\epsilon \quad \text{för } L \neq L_0 \quad (3.2.3.a)$$

$$d[\text{S}^-]/dt = - (g/v) dL/dt \quad \text{för } L = L_0 \quad (3.2.3.b)$$

Elektroneutralitetsvillkor:

$$[\text{Na}^+] + [\text{H}^+] = [\text{HSO}_3^-] + [\text{S}^-] \quad (3.2.4)$$

Jämviktstvillkor:

$$[\text{H}^+] \cdot [\text{HSO}_3^-] / p_{\text{SO}_2} = K_{p_{\text{SO}_2}} (T) \quad (3.2.5)$$

För totala kokartrycket gäller:

$$P = p_{\text{SO}_2} + p_{\text{H}_2\text{O}} = p_{\text{SO}_2} + K_{\text{H}_2\text{O}} (T) \quad (3.2.6)$$

(3.2.4) och (3.2.5) omformas:

$$[\text{HSO}_3^-] = ([\text{Na}^+] - [\text{S}^-])/2 + \sqrt{([\text{Na}^+] - [\text{S}^-])^2/4 + K_{\text{pSO}_2} \cdot \text{pSO}_2} \quad (3.2.7)$$

$$[\text{H}^+] = K_{\text{pSO}_2} \cdot \text{pSO}_2 / [\text{HSO}_3^-] \quad (3.2.8)$$

($[\text{Na}^+]$ är konstant under ett kok.)

Nu införs:

Tillståndsvariabler: $x_1 = L$, $x_2 = C$, $x_3 = [\text{S}^-]$

Styrvariabler: $u_1 = e^{-1/T}$, $u_2 = \text{pSO}_2$

Slaskvariabler: $sl_1 = [\text{HSO}_3^-]$, $sl_2 = [\text{H}^+]$

Nya beteckningar på konstanterna införs enligt appendix A2.2.

Med (3.2.7) & (3.2.8) insatt i (3.2.1)-(3.2.3) fås då:

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = -k_1 \cdot u_1^{l_1} \cdot x_1^{l_4} \cdot sl_1^{l_5} \cdot sl_2^{l_6} & \text{o.v.} \\ \dot{x}_2 = -k_2 \cdot u_1^{l_2} \cdot x_2^{l_7} \cdot sl_2^{l_8} & \text{o.v.} \\ \dot{x}_3 = -\dot{x}_1 \cdot (x_3 / (L_0 - x_1) + k_4 (L_0 - x_1)) + k_3 \cdot u_1^{l_3} \cdot (L_0 - x_1)^{l_9} \\ \quad \cdot sl_1^{l_{10}} \cdot sl_2^{l_{11}} \end{cases}$$

där

$$sl_1 = (N - x_3)/2 + \sqrt{(N - x_3)^2/4 + u_2 \cdot l_{12}}$$

$$sl_2 = u_2 \cdot l_{12} / sl_1$$

Begynnelsevillkor: $x_1(0) = L_0$, $x_2(0) = C_0$, $x_3(0) = [\text{S}^-]_0$

Begränsningar: $0 \leq x_1 \leq L_0$, $0 \leq x_2 \leq C_0$, $0 \leq x_3$

$$293 \leq T \leq 423 \Rightarrow u_{1\min} \leq u_1 \leq u_{1\max}$$

$$1 \leq P \leq P_{\max} \Rightarrow 1 \leq u_2 + \text{p}_{\text{H}_2\text{O}}(T) \leq P_{\max}$$

3.3. Målfunktioner.

Bertil Hagberg, [3], har givit följande målfunktioner: Bestäm styrslag, som minimerar hemicellulosautlösningen $C_o - C_f$ då ligninutlösningen $L_o - L_f$ och koktiden $t_f - t_o$ är givna . Med andra ord:

Bestäm styrstrategi, som maximerar $x_2(t_f)$ då

 $x_1(t_f)$ och t_f är givna.

$x_1(t_f)$ sätts till 2 %. Parametervärden för processen finns i appendix A2.3.

3.4. Diskontinuiteter i systemekvationerna.

Vissa av konstanterna är diskontinuerliga. Detta beror på att processen i kemiskt hänseende skiftar karaktär vid ligninhalten $x_1 = 12,42$ %. Konstanternas värden i de båda regionerna före och efter omslaget har bestämts experimentellt (se appendix A2.3.).

För att införa detta omslag i konstanterna används följande metod:

Betrakta : $k = \begin{cases} k_1 & \text{för } x_1 \leq 12,42 \\ k_2 & \text{för } x_1 > 12,42 \end{cases}$

Då kan k beskrivas med:

$$k = (k_1 + k_2)/2 + ((k_1 - k_2) \cdot \text{atan}((x_1 - 12,42) \cdot s))/\pi$$

där s är ett mått på brantheten i övergången, se fig. 3.4.1.

I [4] visas att s=2 är ett lämpligt värde på brantheten.

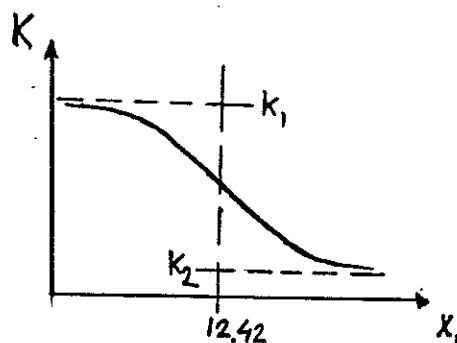


Fig. 3.4.1.

Approximativ beskrivning av diskontinuerliga konstanter

4. Tidigare undersökning.

Det i föregående avdelning beskrivna problemet har behandlats i [4].

4.1. Transformation av tillståndsvariabler och problemformulering.

Följande transformation av tillståndsvariablerna visade sig nödvändig:

$$\begin{aligned}x_1 &\rightarrow x_1 \\x_2 &\rightarrow x_2 \\x_3 &\rightarrow x_3 \cdot (L_0 - x_1)\end{aligned}$$

För närmare utredning av detta hänvisas till [4].

Då erhöles systemekvationerna:

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = -k_1 \cdot u_1^{l_1} \cdot x_1^{l_4} \cdot sl_1^{l_5} \cdot sl_2^{l_6} \\ \dot{x}_2 = -k_2 \cdot u_1^{l_2} \cdot x_2^{l_7} \cdot sl_2^{l_8} \\ \dot{x}_3 = -\dot{x}_1 \cdot k_4 + k_3 \cdot u_1^{l_3} \cdot (L_0 - x_1)^{l_9-1} \cdot sl_1^{l_{10}} \cdot sl_2^{l_{11}} \end{cases}$$

där

$$sl_1 = (N - x_3(L_0 - x_1))/2 + \sqrt{(N - x_3(L_0 - x_1))^2/4 + u_2 \cdot l_{12}}$$

$$sl_2 = u_2 \cdot l_{12} / sl_1$$

Som styrvariabler användes : $u_1 = 10^4 \cdot e^{-3500/T}$, $u_2 = p_{SO_2}$

$$\text{Begränsningar: } g_1(u_1) \leq 0 \Leftrightarrow \begin{cases} u_1 - u_{1\max} \leq 0 \\ -u_1 + u_{1\min} \leq 0 \end{cases}$$

$$g_2(u_2) \leq 0 \Leftrightarrow \begin{cases} u_2 - u_{2\max} \leq 0 \\ -u_2 + u_{2\min} \leq 0 \end{cases}$$

$$\text{Randvillkor: } \Psi_1(x(t_f)) = x_1(t_f) - 2,0 = 0$$

Med beteckningar enligt avd. 2.2. valdes:

$$F(x(t_f), t_f) = -k_a \cdot x_2(t_f) + k_b \cdot (x_1(t_f) - 2,0)^2 \quad \text{där } k_a, k_b$$

är konstanter. Den första termen maximerar x_2 i slutpunkten $t = t_f$ och den andra termen förbättrar konvergensen då den driver $x_1(t_f)$ mot 2,0.

I den ursprungliga problemformuleringen var $L(x, u, t) = 0 \forall t$ men för att lättare få problemet att konvergera valdes :

$$L(x, u, t) = \xi_I(u_1(t) - u_{1\text{med}})^2 + \xi_{II}(u_2(t) - u_{2\text{med}})^2 \quad \text{där}$$

u_{1med} och u_{2med} är konstanter, som valdes som de troliga medelvärdena av respektive styrvariabel över tidsintervallet $[t_0, t_f]$.

Förlustfunktionen blev då:

$$V(x_0, t_0) = \int_{t_0}^{t_f} (\xi_I (u_1(t) - u_{1med})^2 + \xi_{II} (u_2(t) - u_{2med})^2) dt - k_a \cdot x_2(t_f) + k_b \cdot (x_1(t_f) - 2,0)^2$$

4.2. Resultat och motivering för införandet av nya styrvariabler.

Tillämpning av algoritmen enligt Al.3. på problemet gav som resultat en temperaturprofil enligt fig. 4.2.1., medan trycket tenderade att lägga sig på maximalt tillåtet tryck.

I praktiken har man begränsningar på hur snabbt temperaturen och trycket kan ökas från rumstemperatur och normaltryck. För att få en lösning, som ligger närmare en möjlig realisering, behövs därför begränsningar på tidsderivatorna av tryck respektive temperatur. Alltså bör nya styrvariabler väljas, som är proportionella mot tryckökning per tidsenhet respektive temperaturökning per tidsenhet.

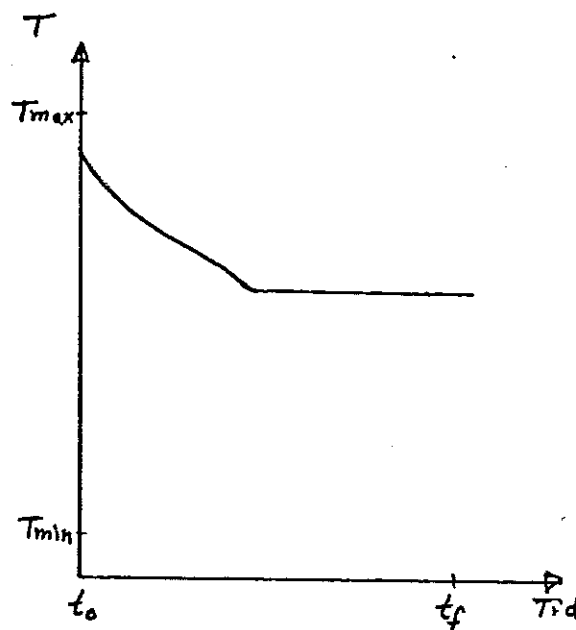


Fig. 4.2.1.

Resultat av det ursprungliga problemet: Temperaturprofilen blev enligt diagr., medan trycket intog $P = P_{max}$

5. Ny problemformulering.

5.1. Val av styrvariabler.

Val av u_1 : Om man valde tidsderivatan av den "kemiska temperaturvariabeln" $10^4 \cdot e^{-3500/T}$ till styrvariabel, dvs. $u_1(t) = 10^4 \cdot d(e^{-3500/T})/dt$, så skulle man få följande betydelser av begränsningar på u_1 :

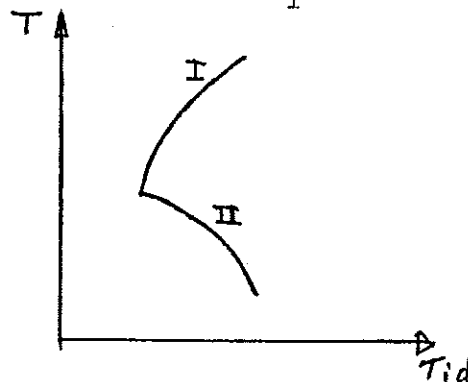


Fig. 5.1.1.

I: Temperaturstigning då $u_1 = u_{1max}$

II: Temperatursänkning då $u_1 = u_{1min}$

Begränsningen u_{1min} är ofysikalisk, då den tillåter snabbare temperatursänkning vid lägre temperatur än vid högre.

I stället valdes $u_1(t) = d(T(t))/dt$.

Val av u_2 : Den komponent av trycket, som pumpas upp är p_{SO_2} . Därför val-

des $u_2(t) = d(p_{SO_2}(t))/dt$

5.2. Systemekvationer och slutlig problemformulering.

Med de nya styrvariablerna fås nu systemekvationerna:

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = -k_1 \cdot x_4^{l_1} \cdot x_1^{l_4} \cdot s_{l_1}^{l_5} \cdot s_{l_2}^{l_6} \\ \dot{x}_2 = -k_2 \cdot x_4^{l_2} \cdot x_2^{l_7} \cdot s_{l_2}^{l_8} \\ \dot{x}_3 = -\dot{x}_1 \cdot k_4 + k_3 \cdot x_4^{l_3} \cdot (L_0 - x_1)^{l_9-1} \cdot s_{l_1}^{l_{10}} \cdot s_{l_2}^{l_{11}} \\ \dot{x}_4 = x_4 \cdot (\log(10^4/x_4))^2 \cdot u_1/3500 \\ \dot{x}_5 = u_2 \end{cases}$$

där

$$s_{l_1} = (N - x_3(L_0 - x_1))/2 + \sqrt{(N - x_3(L_0 - x_1))^2/4 + x_5 \cdot l_{12}}$$

$$sl_2 = x_5 \cdot l_{12} / sl_1$$

Tillståndsvariablerna är: $x_1 = L$, $x_2 = C$, $x_3 = \frac{[S^-]}{L_0 - L}$, $x_4 = 10^4 \cdot e^{-3500/T}$,

$$x_5 = p_{SO_2}$$

Styrvariablerna: $u_1 = dT/dt$, $u_2 = dp_{SO_2}/dt$

Slaskvariablerna: $sl_1 = [HSO_3^-]$, $sl_2 = [H^+]$

$$\text{Begränsningar: } g_1(u_1) \leq 0 \Leftrightarrow \begin{cases} u_1 - u_{1\max} \leq 0 \\ -u_1 + u_{1\min} \leq 0 \end{cases}$$

$$g_2(u_2) \leq 0 \Leftrightarrow \begin{cases} u_2 - u_{2\max} \leq 0 \\ -u_2 + u_{2\min} \leq 0 \end{cases}$$

$$\text{där } u_{1\max} = 40 \text{ } ^\circ/h \quad u_{2\max} = 7 \text{ bar/h}$$

$$u_{1\min} = -40 \text{ } ^\circ/h \quad u_{2\min} = -100 \text{ bar/h}$$

Randvillkor: $\Psi_1(x(t_f), t_f) = x_1(t_f) - 2,0 = 0$

Dessutom måste nu införas en begränsning på totaltrycket, så att $P = p_{SO_2} + p_{H_2O} \leq P_{\max}$ är uppfyllt dvs. $x_5 + k_I \cdot x_4^{k_{II}} - P_{\max} \leq 0$

Ytterligare en begränsning: $S(x, t) \leq 0 \Leftrightarrow x_5 + k_I \cdot x_4^{k_{II}} - P_{\max} \leq 0$

(konstanterna k_I och k_{II} : se appendix A2.3.)

Förlustfunktion:

$$V(x_0, t_0) = \int_{t_0}^{t_f} (\epsilon_I (u_1(t) - u_{1\text{med}})^2 + \epsilon_{II} (u_2(t) - u_{2\text{med}})^2) dt - \\ - k_a \cdot x_2(t_f) + k_b (x_1(t_f) - 2,0)^2$$

I algoritmen (se A1.3.) krävs att Hamiltonfunktionen $H(x, u, V_x, t) = L(x, u, t) + \langle V_x, f(x, u, t) \rangle$ skall uppfylla att H_{uu} är inverterbar.

$$\left(V_x = \frac{\partial V}{\partial x} \quad , \quad H_{uu} = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 H}{\partial u_1^2} & \frac{\partial^2 H}{\partial u_1 \partial u_2} \\ \frac{\partial^2 H}{\partial u_1 \partial u_2} & \frac{\partial^2 H}{\partial u_2^2} \end{pmatrix} \right)$$

Med den nya problemformuleringen fås $H_{uu} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$, eftersom f_i inte innehåller kvadratiska termer i u_1 eller u_2 . Problemet har således blivit singulärt (jämför [6])

5.3. Metoder att lösa singulära problem.

Metoder att lösa singulära problem med algoritmen i appendix A1.3. har presenterats av Jacobson, Gerschwin och Lele, [5].

H_{uu} blir inverterbar genom att ett kvadratisk uttryck i u adderas till $L(x,u,t)$. Det kvadratiska uttrycket multipliceras med en parameter $\xi > 0$. Sedan löses det modifierade problemet med algoritmen i A1.3. för en avtagande följd av positiva värden på ξ . Eftersom algoritmen är av andra ordningen, fås kvadratisk konvergens i närheten av optimal lösning. Då $\xi \rightarrow 0$, så går lösningen av det modifierade problemet mot lösningen av det ursprungliga singulära problemet.

I [5] beskrivs två metoder:

ξ -algoritmen: Addera till $L(x,u,t)$ termen $\xi \cdot (u(t) - u_{med})^2$.

- 1) Välj startvärde ξ_1 och nominell styrslag $u_N(t)$, $t \in [t_0, t_f]$.
- 2) Lös optimeringsproblemet med algoritmen i A1.3., så att en optimal styrslag $u_K(t)$, $t \in [t_0, t_f]$, erhålles.
- 3) Välj $\xi_{i+1} < \xi_i$ och sätt $u_N(t) = u_K(t)$, $t \in [t_0, t_f]$, gå till 2)

Proceduren avbryts om numerisk instabilitet uppträder. Denna metod kom till användning vid undersökningen i [4], men anledningen var då inte att problemet var singulärt, utan att det var svårt att hitta en initialgissning, sådan att algoritmen konvergerade. I [4] kunde ξ sättas till 0 när lösningen närmade sig optimal bana. I singulära problem måste $\xi > 0$ gälla hela tiden.

$\xi - \alpha(\cdot)$ -algoritmen: Addera till $L(x,u,t)$ termen $\xi \cdot (u(t) - \alpha(t))^2$

- 1) Välj nominell styrslag $u_N(t)$, $t \in [t_0, t_f]$, välj ξ .
- 2) Sätt $\alpha(t) = u_N(t)$, $t \in [t_0, t_f]$.

Lös optimeringsproblemet med algoritmen i A1.3., så att en optimal styrslag $u_K(t)$, $t \in [t_0, t_f]$, erhålles.

- 3) Sätt $u_N(t) = u_K(t)$, $t \in [t_0, t_f]$, gå till 2)

Proceduren avbryts vid numerisk instabilitet. I denna metod behöver inte $\xi \rightarrow 0$ för att lösningen skall gå mot lösningen av det ursprungliga singulära problemet.

5.4. Minimeringen av Hamiltonfunktionen.

Med den nya problemformuleringen följde en avsevärd förenkling i den del av algoritmen, som utför minimeringen av Hamiltonfunktionen, $H(x, u, V_x, t)$ (se appendix A1.3.). I det nya problemet gick det att utföra denna minimering analytiskt, medan i det tidigare problemet en tidsödande numerisk metod fick tillgripas.

$$\begin{aligned} \text{I det nya problemet fås med } H(x, u, V_x, t) &= L(x, u, t) + \langle V_x, f(x, u, t) \rangle = \\ &= \xi_I (u_1(t) - u_{1med})^2 + \xi_{II} (u_2(t) - u_{2med})^2 + \sum_{i=1}^5 V_{x_i} \cdot f_i(x, u, t), \end{aligned}$$

att $H_{uu} = \begin{pmatrix} 2\xi_I & 0 \\ 0 & 2\xi_{II} \end{pmatrix}$, dvs. H strikt konvex för alla u . (Algoritmen kräver, att H är strikt konvex i närheten av optimal bana, se appendix A1.3.)

I algoritmen skall bestämmas u^* , som uppfyller $H_u(x, u^*, V_x, t) = 0$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial H}{\partial u_1} &= 2 \cdot \xi_I (u_1(t) - u_{1med}) + V_{x_4} \cdot \frac{\partial f_4}{\partial u_1} \\ \frac{\partial H}{\partial u_2} &= 2 \cdot \xi_{II} (u_2(t) - u_{2med}) + V_{x_5} \cdot \frac{\partial f_5}{\partial u_2} \end{aligned}$$

$$u_1^*(t) = -V_{x_4}(t) / (2 \xi_I) + u_{1med} \quad \checkmark$$

$$u_2^*(t) = -V_{x_5}(t) / (2 \xi_{II}) + u_{2med} \quad \checkmark$$

Tidsvinst med analytisk minimering:

Tid per iteration av A1.3.-algoritmen vid numerisk minimering

Problem i avd.6 ca. 80 sekunder

Problem i avd.7 ca. 800 sekunder (uppskattad)

Tid per iteration av A1.3.-algoritmen vid analytisk minimering

Problem i avd.6 ca. 15 sekunder

Problem i avd.7 ca. 25 sekunder

6. Numeriska resultat då totaltrycket konstant.

Genom att sätta totaltrycket konstant, så erhålls en betydligt förenklad problemställning med bara en styrsignal och utan aktiva villkor på tillståndsvariabler av typen $S(x,t) \leq 0$. Denna förenkling kan anses motiverad, då trycket kan förväntas gå upp till maximalt tryck så fort som möjligt. Med pumphastigheten 7bar/timme kan maximaltrycket uppnås på mindre än 1,5 timme av den totala koktiden på 10 timmar.

För att få konstant totaltryck $P = x_5 + k_I \cdot x_4^{k_{II}}$ (k_I, k_{II} se appendix A2.3.) sattes:

$$\dot{x}_5 = -k_I \cdot d(x_4^{k_{II}})/dt$$

$$x_5(t_0) = P - k_I \cdot x_4(t_0)^{k_{II}}$$

6.1. Införande av $\xi - \alpha(\cdot)$ - algoritmen.

En rimlig gissning på var en optimal bana kan tänkas ligga ser ut som I i fig.6.1.1., ty detta är ungefär vad som används i praktiken.

Vid försök med ξ -algoritmen och $u_{\text{med}} = 12,0$ erhöles följande:

Med start från I i fig.6.1.1. och med ξ_I , tillräckligt stort för konvergens, erhöles bana II efter ca. 15 iterationer av A1.3.-algoritmen. Med start från II och $\xi_{I2} = \frac{\xi_{I1}}{2}$ erhöles bana III, där $F(x(t_f), t_f)$ för både II och III var betydligt sämre än för I, efter ca. 10 it.

För att få känslighet för små variationer i slutet av u-trajektorian, måste ξ_I dras ner flera

tiopotenser från startvärdet ξ_I . Att fortsätta på den inslagna vägen, skulle därför kräva ett stort antal iterationer. Vid startär med olika initialgissningar erhöles resultat liknande fig.6.1.1. Initialgissningen I i fig.6.1.1. antogs därför ligga i närheten av globalt optimal lösning. Detta borde inte vara orimligt, eftersom den har visat sig vara lämplig att använda i praktiken. Därmed infördes nu $\xi - \alpha(\cdot)$ - algoritmen och I i fig.6.1.1. användes som startvärde på $u_N(t)$ och $\alpha(t)$. På så

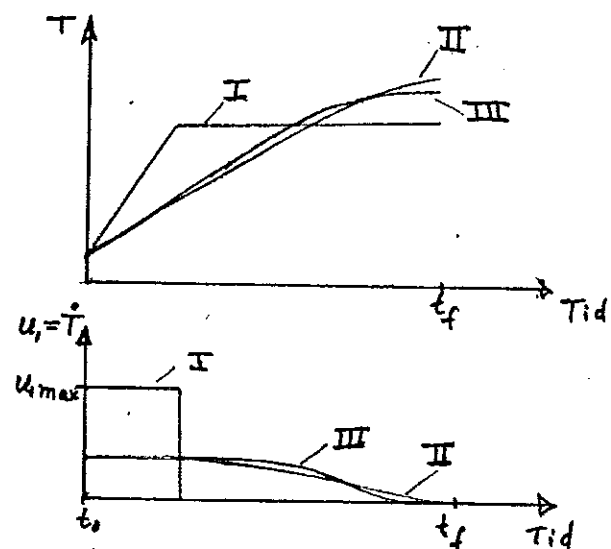


Fig.6.1.1.

Försök med ξ -algoritmen.

sätt fick $L(x,u,t)$ samma känslighet för relativa variationer längs hela banan.

6.2. Initialgissningens betydelse för konvergensen.

Då algoritmen skall söka en bättre styrstrategi med utgångspunkt från den nominella styrstrategin, så beräknas först de nominella x -banorna. Sedan startar algoritmen i slut-punkten t_f och söker en styrstrategi, som ger bättre (dvs. lägre) värde på förlustfunktionen. Detta sker genom att minimera Hamiltonfunktionen, $H(x,u,V_x,t) = L(x,u,t) + \left\langle \frac{\partial V}{\partial x}, f(x,u,t) \right\rangle$ för varje steg i negativ tid (se appendix A1.3.). För att algoritmens sökande efter en bättre bana inte skall "spåra ur", med "explosion" i multiplikatorerna $\frac{\partial V}{\partial x_i}$, som följd, så måste viss "balans" råda mellan de olika "viljor" i representerade av $\frac{\partial V}{\partial x_i}$, som verkar på algoritmen.

$$\begin{aligned} \text{Med } V(x_0, t_0) &= \int_{t_0}^{t_f} L(x,u,t) dt + F(x(t_f), t_f) + \langle b, \Psi(x(t_f), t_f) \rangle = \\ &= \int_{t_0}^{t_f} L(u) dt + k_b (x_1(t_f) - 2,0)^2 - k_a x_2(t_f) + b (x_1(t_f) - 2,0) \end{aligned}$$

erhålls $\frac{\partial V}{\partial x_1} = 2 \cdot k_b \cdot (x_1(t_f) - 2,0) + b$

$$\frac{\partial V}{\partial x_2} = -k_a, \quad \frac{\partial V}{\partial x_3} = \frac{\partial V}{\partial x_4} = \frac{\partial V}{\partial x_5} = 0$$

$\frac{\partial V}{\partial x_2} < 0 \Rightarrow V$ minskar med ökat x_2 . x_2 är monotont avtagande för processen, dvs. om processen "bromsas" fås större x_2 , dvs. x_2 ökar om u väljs mindre än nominellt u . $\frac{\partial V}{\partial x_2} < 0 \Rightarrow V$ minskar då u väljs mindre än nominellt u .

$\frac{\partial V}{\partial x_1} > 0 \Rightarrow V$ minskar med minskat x_1 . x_1 monotont avtagande, dvs. x_1 ökar om u väljs mindre än nominellt $u \Rightarrow V$ ökar då u väljs mindre än nominellt u .

"Balans" i punkten $t = t_f$ fås alltså om $\frac{\partial V}{\partial x_1} \approx -\frac{\partial V}{\partial x_2}$ ($\Delta x_1 \approx \Delta x_2$)

I fig.6.2.1. visas två försök med olika nominella banor: ($k_a = k_b = 10$, $b=0$)

$$\text{I: } x_1(t_f) = 2,14204 \Rightarrow \frac{\partial V}{\partial x_1} = 2,84, \quad \frac{\partial V}{\partial x_2} = -10$$

$$\text{II: } x_1(t_f) = 2,58188 \Rightarrow \frac{\partial V}{\partial x_1} = 11,64, \quad \frac{\partial V}{\partial x_2} = -10$$

Vid försök med I så "exploderar" multiplikatorerna $\frac{\partial V}{\partial x_i}$, medan med II algoritmen uppför sig välartat.

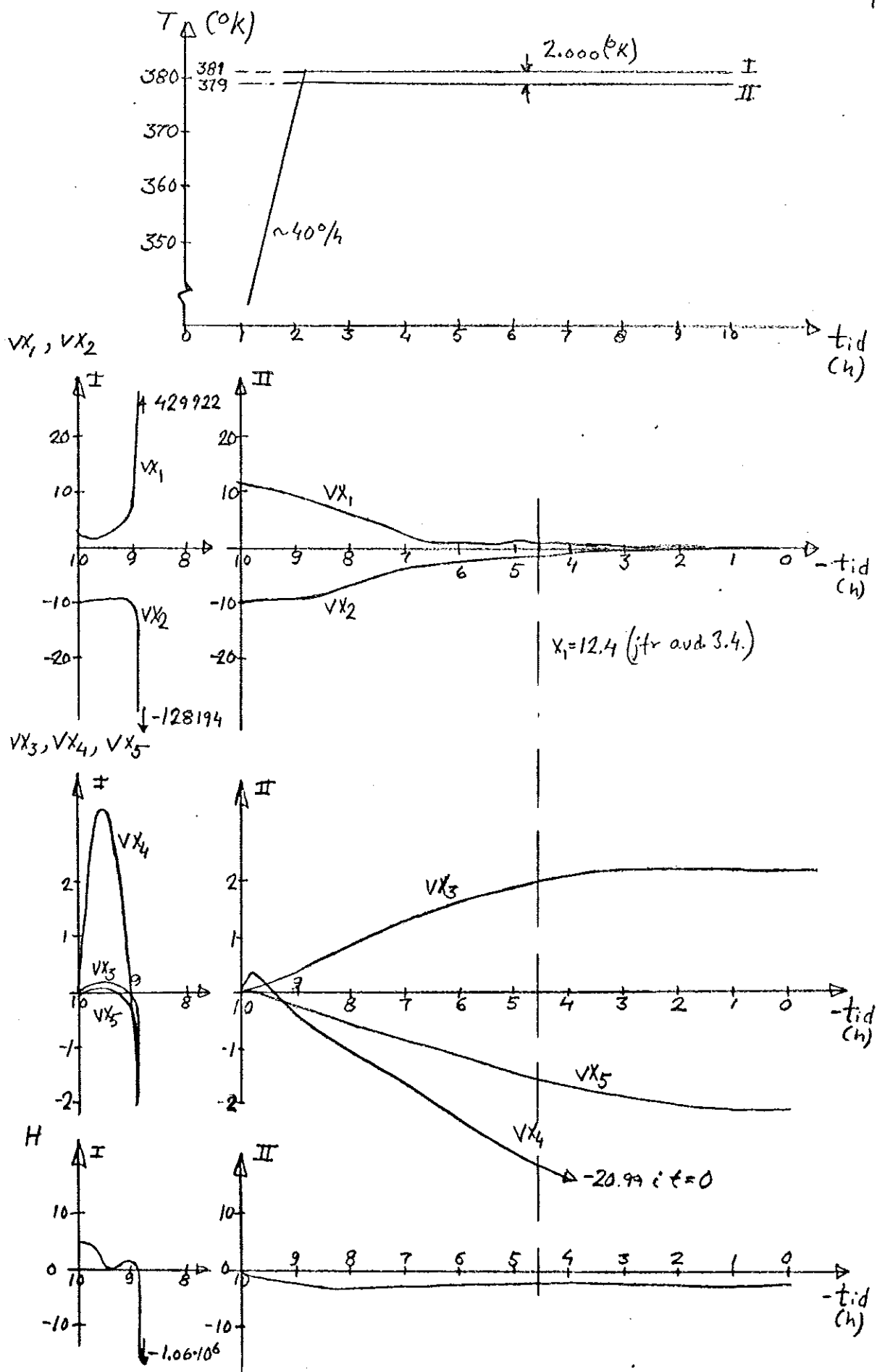


Fig.6.2.1. Initialgissningens betydelse för konvergensen: $\frac{\partial V}{\partial x_i}$; och H för initialgissningarna I och II överst i fig. Med I "spårar algoritmen ur" efter en timme i negativ tid, medan med II algoritmen konvergerar.

6.3. Karakteristiska kurvor, problemets flackhet, olika totaltryck.

Med start från initialgissning (II i fig.6.2.1.) erhöles med följande parametervärden: $\left\{ \begin{array}{l} P=10 \text{ bar} \quad t_f=10 \text{ timmar} \quad K_a=K_b=10 \\ \varepsilon_I=0.0001 \quad \varepsilon_{II}=0 \quad \eta_1=0.01 \quad \eta_2=0.005 \end{array} \right\}$ algoritmens uppförande enligt fig.6.3.1. Karakteristiska kurvor för den optimala lösningen finns i fig.6.3.2.-6.3.3. En jämförelse med lösningen till problemet i 4.1. görs i fig.6.3.4.

En kurvskara för olika totaltryck visas i fig.6.3.5., och motsvarande värden på $x_2(t_f)$ ges i fig.6.3.6.

Problemets grad av flackhet illustreras av fig.6.3.7.-6.3.8. Den del av banan, som ligger efter $x_1 = 12,42$ erbjuder vissa möjligheter till variationer utan att utbytet minskar väsentligt från det optimala. En undersökning med neddragning av sluttemperaturen utförs i avd.7.4.

Anm. Med hjälp av parametern η_2 bestäms hur mycket $x_1(t_f)$ får avvika från 2,0 för optimala lösningar. Detta sker genom att olikheten $|\Psi_1(x(t_f), t_f)| = |x_1(t_f) - 2,0| \leq \eta_2$ skall vara uppfylld.

Då både $x_1(t)$ och $x_2(t)$ är monotont avtagande och $\Delta x_1 / \Delta x_2 \approx 1$, så fås ett tillskott $\Delta x_2(t_f)$ från $x_1(t_f)$:s avvikelse från 2,0 enligt: $\Delta x_2(t_f) \approx (x_1(t_f) - 2,0)$.

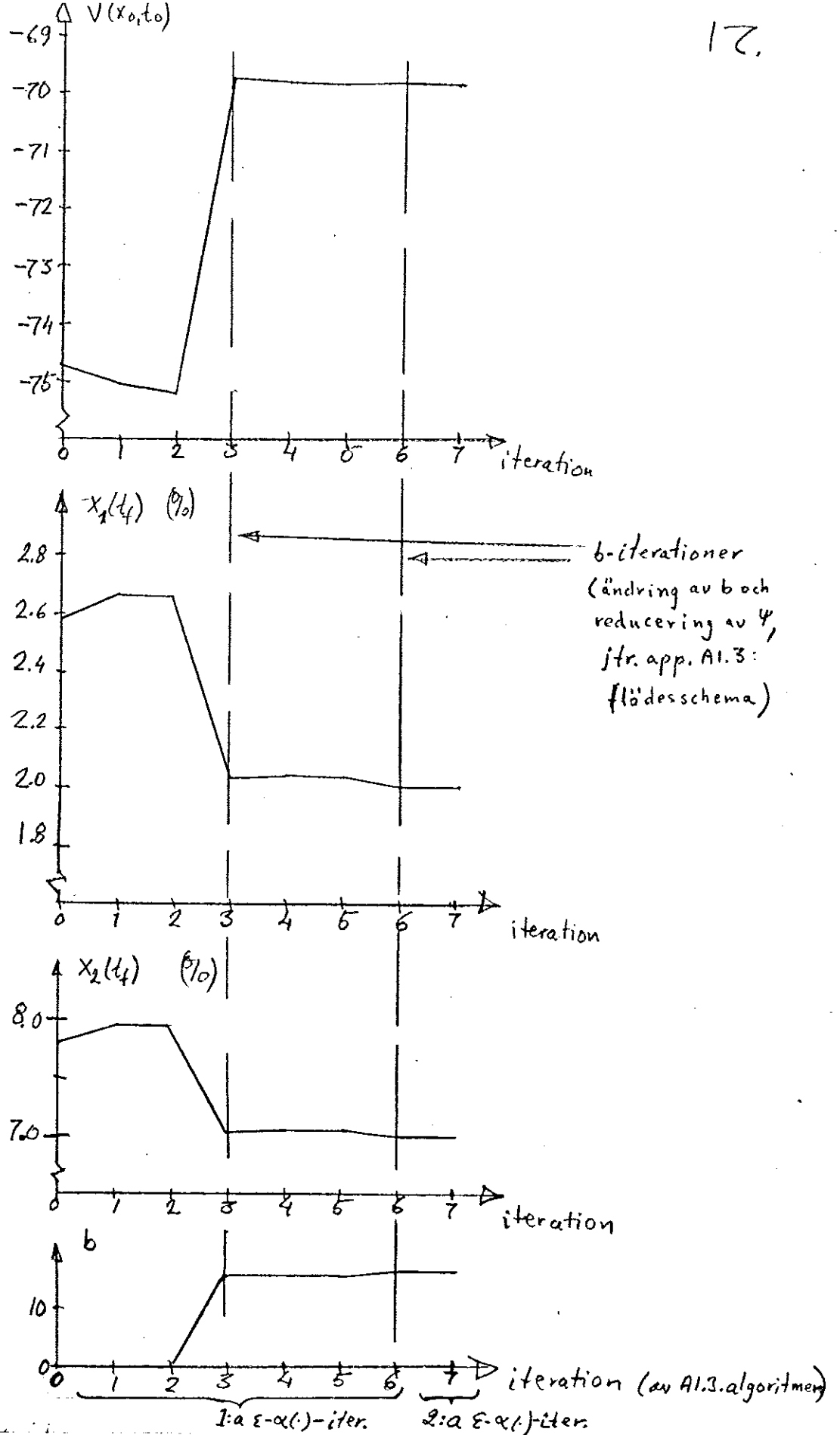


Fig.6.3.1. Algoritmens uppförande då kokartrycket är konstant: $V(x_0, t_0)$, $x_1(t_f)$, $x_2(t_f)$, b för varje iteration. Parametervärden : se sid.16.

Efter 1 iteration av ϵ - $\alpha(\cdot)$ -algoritmen innefattande 6 iterationer av DDP-algoritmen i A1.3. erhöles optimal lösning.(I i fig.6.3.2.-6.3.3.) Efter ytterligare 1 iteration av ϵ - $\alpha(\cdot)$ -algoritmen innefattande 1 iteration av algoritmen i A1.3. erhöles en optimal lösning (II i fig.6.3.2.-6.3.3.), som inte kunde förbättras med fler iterationer.

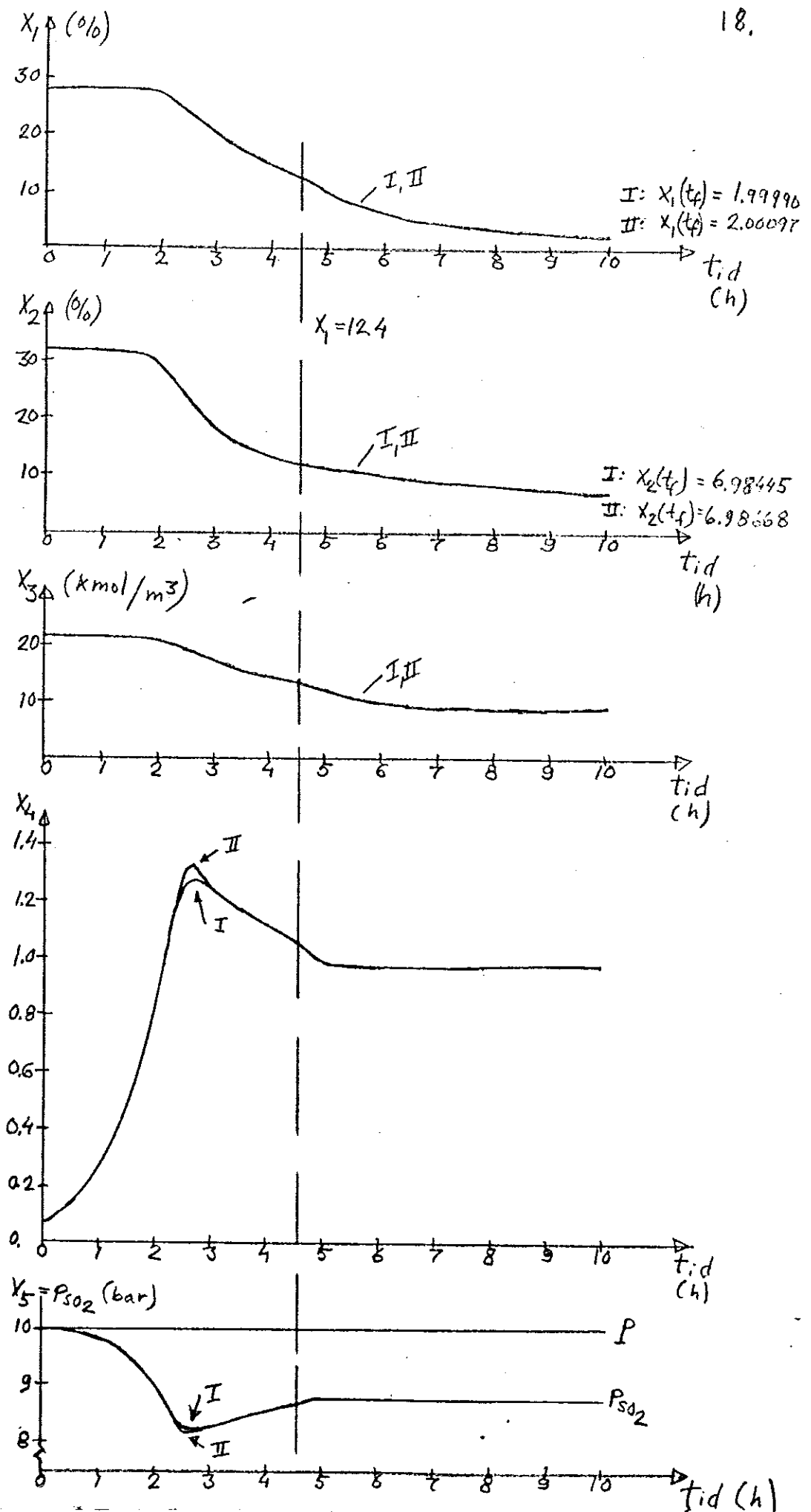


Fig.6.3.2. Optimal lösning då $P = 10$ bar: x_1, x_2, x_3 , läget av $x_1 = 12,4$, som är en diskontinuitetspunkt i systemet.

I och II efter 1 respektive 2 iterationer av ξ - $\alpha(\cdot)$ -algoritmen.

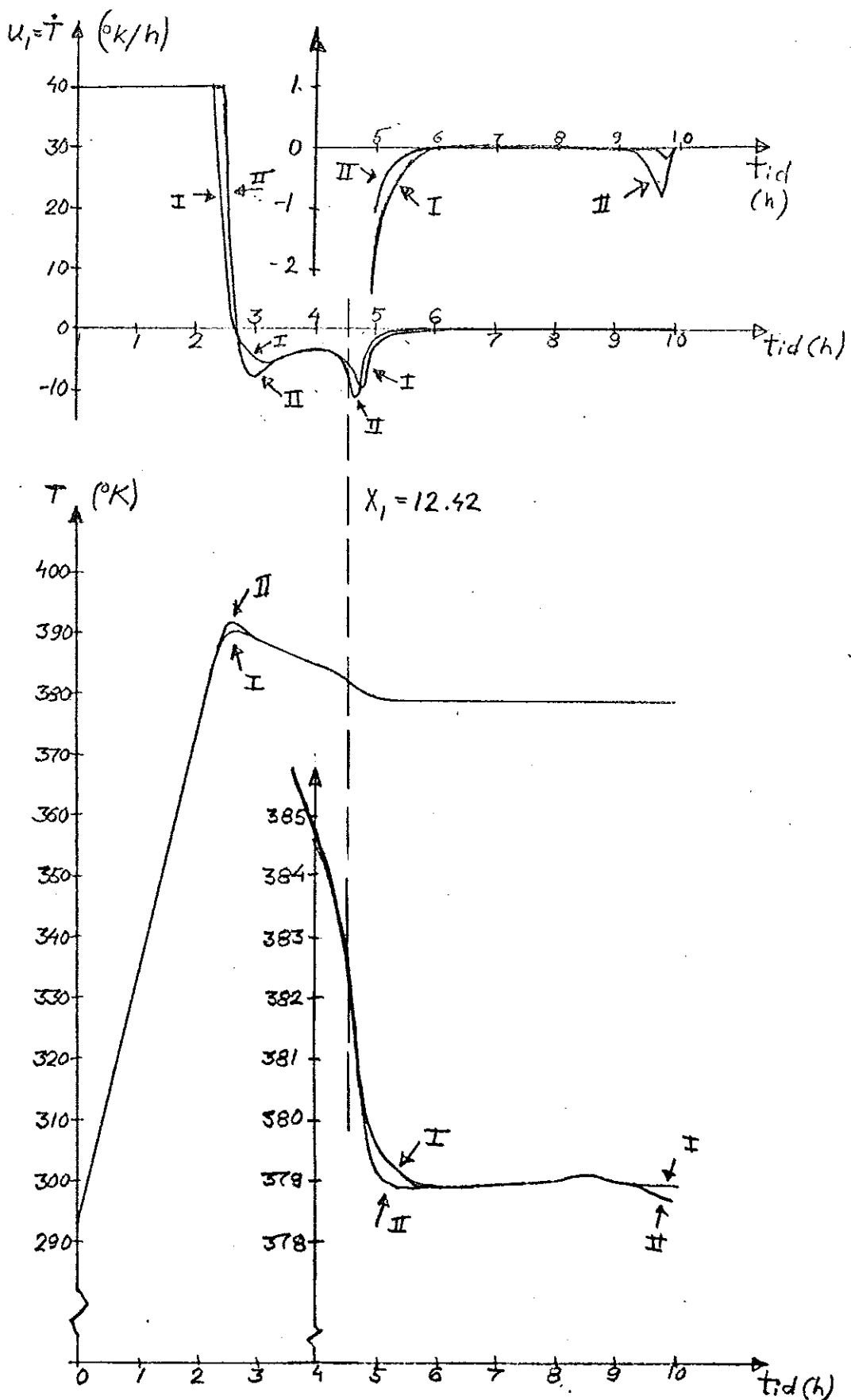


Fig. 6.3.3. Optimal lösning då $P = 10$ bar: $u_1 = \dot{T}$, T . Senare delen av kurvorna visas också förstörade.
 I och II efter 1 respektive 2 iterationer av ξ - $\alpha(\cdot)$ -algoritmen.

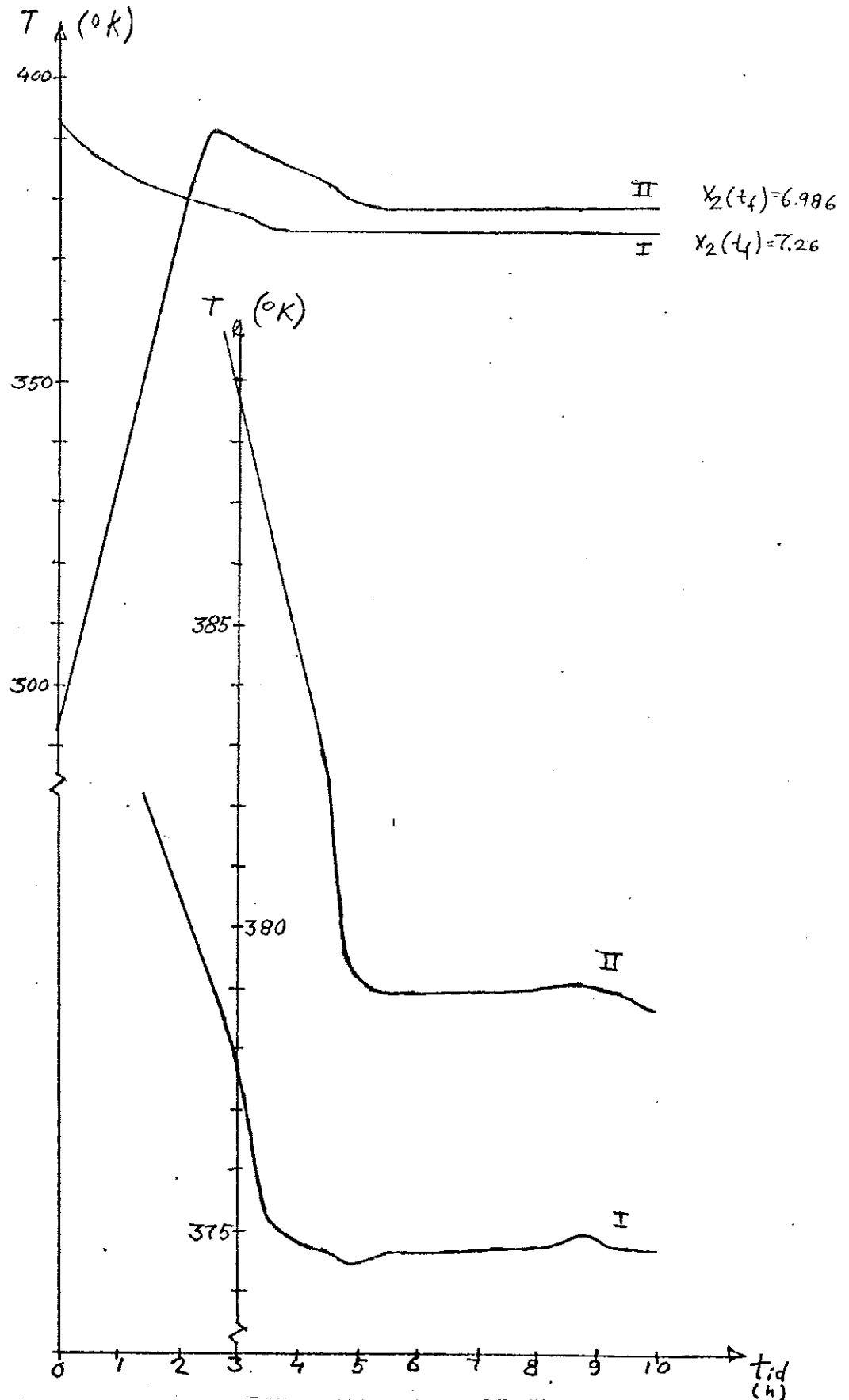


Fig.6.3.4. Jämförelse av optimala banor då $P = 10$ bar och $u_1 = T, (I)$ respektive $u_1 = \dot{T}, (II)$.

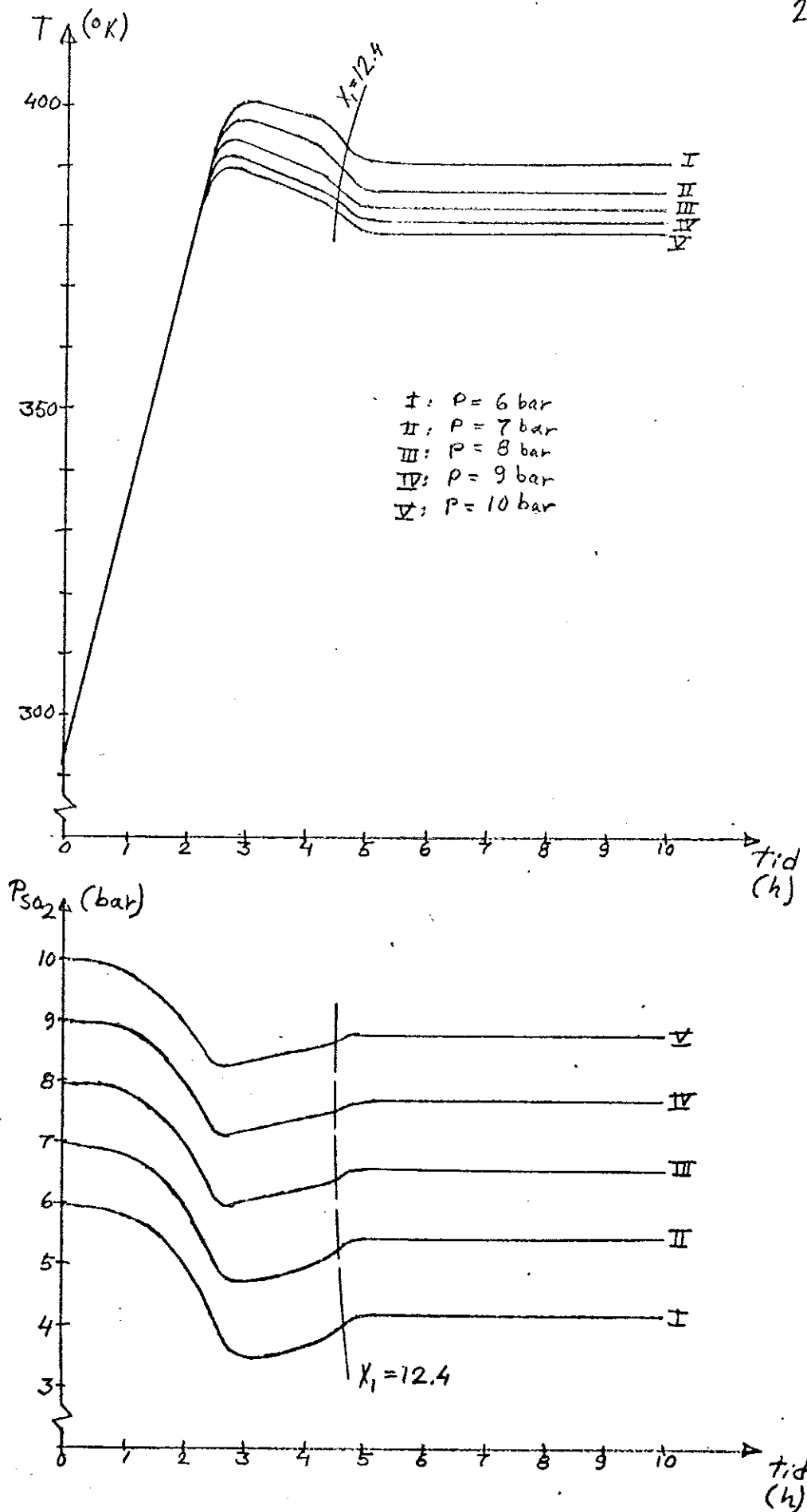


Fig.6.3.5. Optimala banor för olika kokartryck: T , p_{SO_2} , läget av $x_1 = 12,4$.

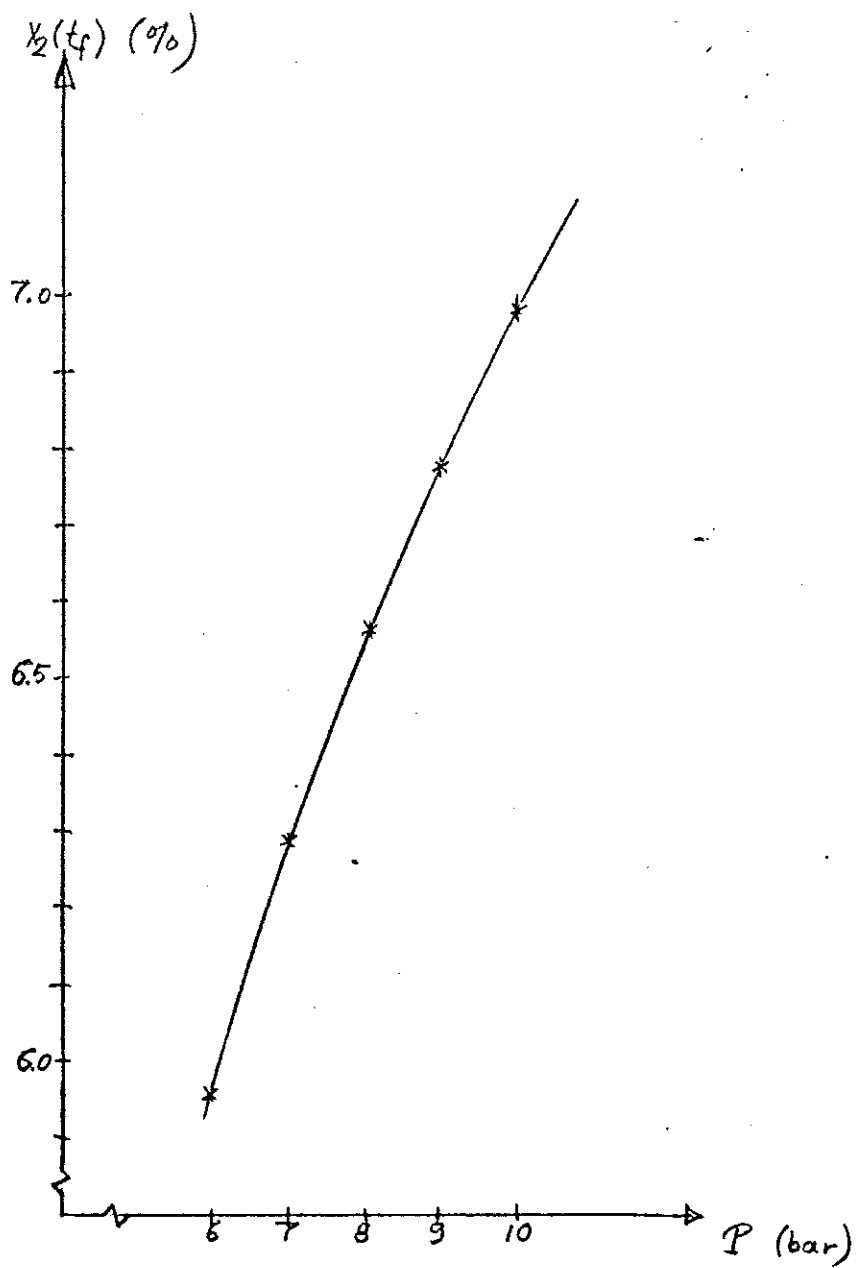


Fig.6.3.6. Utbyte $x_2(t_f)$ vid olika kokartryck P , för optimala banor.

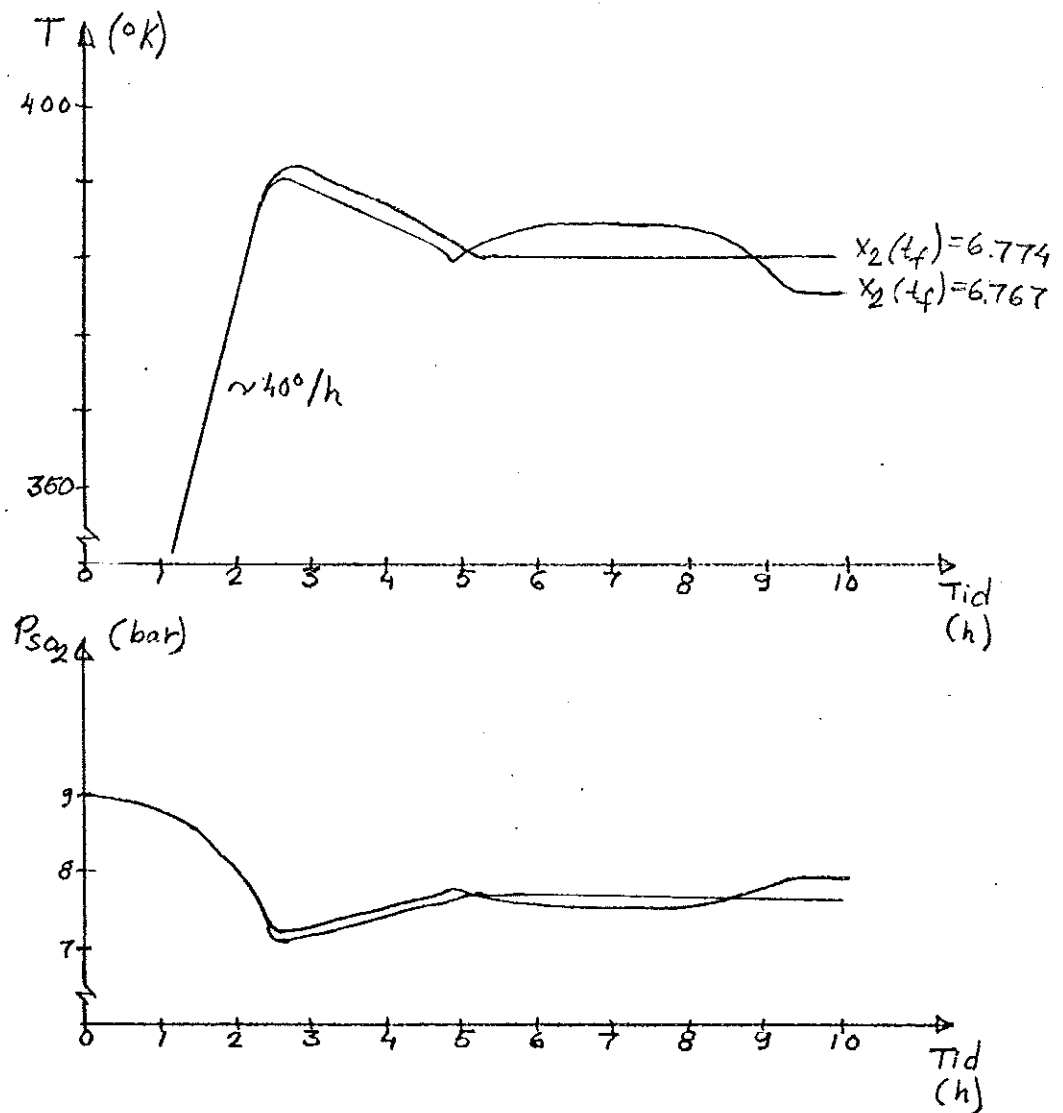


Fig.6.3.7. Problemets grad av flackhet, $P = 9$ bar: T , p_{SO_2} för två olika banor. Slutet av temperaturbanan erbjuder vissa variationsmöjligheter utan att utbytet $x_2(t_f)$ försämras väsentligt.
 (Kurvorna erhållna som olika iterationer.)

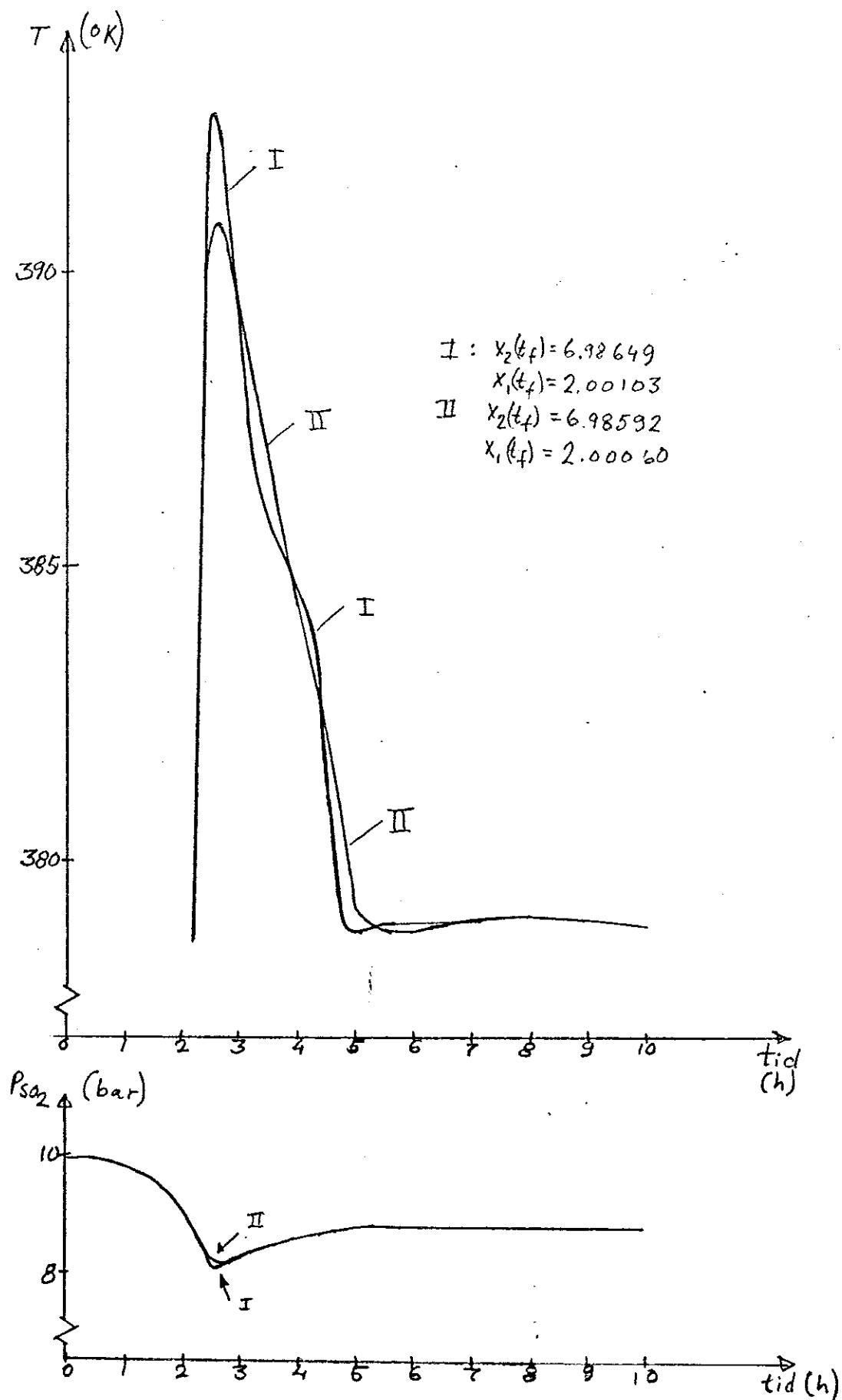


Fig.6.3.8. Problemets grad av fläckhet, $P = 10$ bar: T , p_{SO_2} för två banor med samma utbyte $x_2(t_f) = 6,986$.

7. Numeriska resultat av det fullständiga problemet.

7.1. Begränsningar på tillståndsvariablerna.

Då trycket skall styras med hjälp av styrvariabeln $u_2 = dp_{SO_2}/dt$ behövs en begränsning på tillståndsvariablerna, som enligt avd. 5.2 blir:

$$S(x,t) = x_5 + k_I \cdot x_4^{k_{II}} - P_{\max} \leq 0$$

I appendix A1.3. beskrivs hur en sådan begränsning införs: Derivera S tills u uppträder explicit:

$$\frac{dS(x,t)}{dt} = \dot{x}_5 + k_I \cdot k_{II} \cdot x_4^{k_{II}-1} \cdot \dot{x}_4 = u_2 + k_I \cdot k_{II} \cdot x_4^{k_{II}-1} \cdot \dot{x}_4 = \frac{dS}{dt}(x,u,t)$$

Bilda $\tilde{g}(x,u,t) = \frac{dS}{dt}(x,u,t) + A_1 \cdot S(x,t) \leq 0$, där A_1 väljs så att lämplig hänsyn tas till att $S(x,t) \leq 0$ skall vara uppfyllt. Om $\tilde{g}(x,u,t) \leq 0$ inte är uppfyllt så sätts u_2 så, att $\tilde{g}(x,u,t) = 0$. På så sätt återverkar $P = x_5 + k_I \cdot x_4^{k_{II}}$ på u_2 så att $P \leq P_{\max}$ uppfylls. I samtliga körningar på datamaskin användes $A_1 = 10$, som gav $P \leq P_{\max} + 0,0001$ för optimala banor. Felmarginalen 0,0001 beror på numerisk onoggrannhet.

7.2. Modifierad form av $\xi-\alpha(\cdot)$ -algoritm.

På försök har följande förändringar införts i $\xi-\alpha(\cdot)$ -algoritmen: Vid starten av varje iteration av A1.3.-algoritmen sätts $\alpha(t) = u_N(t)$ och $V_N(x,t) = V_N(x(t_f), t_f)$, $t \in [t_0, t_f]$.

Modifierad $\xi-\alpha(\cdot)$ -algoritm: Addera till $L(x,u,t)$ termen $\xi(u(t) - \alpha(t))^2$

- 1) Välj ξ och nominell styrslag $u_N(t)$, $t \in [t_0, t_f]$.
- 2) Sätt $\alpha(t) = u_N(t)$ och $V_N(x,t) = F_N(x(t_f), t_f) + \langle b_N, \Psi_N(x(t_f), t_f) \rangle$, utför en iteration av A1.3.-algoritmen så att en förbättrad styrstrategi $u_K(t)$, $t \in [t_0, t_f]$ erhålls.
- 3) Sätt $u_N(t) = u_K(t)$, $t \in [t_0, t_f]$, gå till 2)

Denna metod har visat sig ge snabbare konvergens än den ursprungliga ε - $\alpha(\cdot)$ -algoritmen om initialgissningen är tillräckligt nära den optimala lösningen. Ett sådant exempel visas i fig.7.2.1. Där har samma $F(x(t_f), t_f)$ som i avd. 7.4. använts, samt följande parametrar:

$$\left. \begin{array}{lll} \varepsilon_I = 0.001 & P_{max} = 10 \text{ bar} & \eta_1 = 0.1 \\ \varepsilon_{II} = 0.01 & t_f = 10 \text{ timmar} & \eta_2 = 0.005 \\ A_1 = 10 & K_a = K_b = 10 & K_c = 30 \text{ (se avd. 7.4.)} \end{array} \right\}$$

I fig.7.2.2. ges karakteristiska storheters värden för varje iteration. Som jämförelse visas också resultat med den ursprungliga ε - $\alpha(\cdot)$ -algoritmen då k_0 har ändrats till 50.

Den modifierade ε - $\alpha(\cdot)$ -algoritmen kan lämpligen användas som avslutning efter en iteration av den ursprungliga ε - $\alpha(\cdot)$ -algoritmen (till punkt 3. sid.11). Man får då två banor, varav en är bunden i viss mån till initialgissningen, medan den andra är betydligt mer fri i förhållande till initialbanan. På detta sätt har bana II och I i fig.7.3. 5. erhållits.

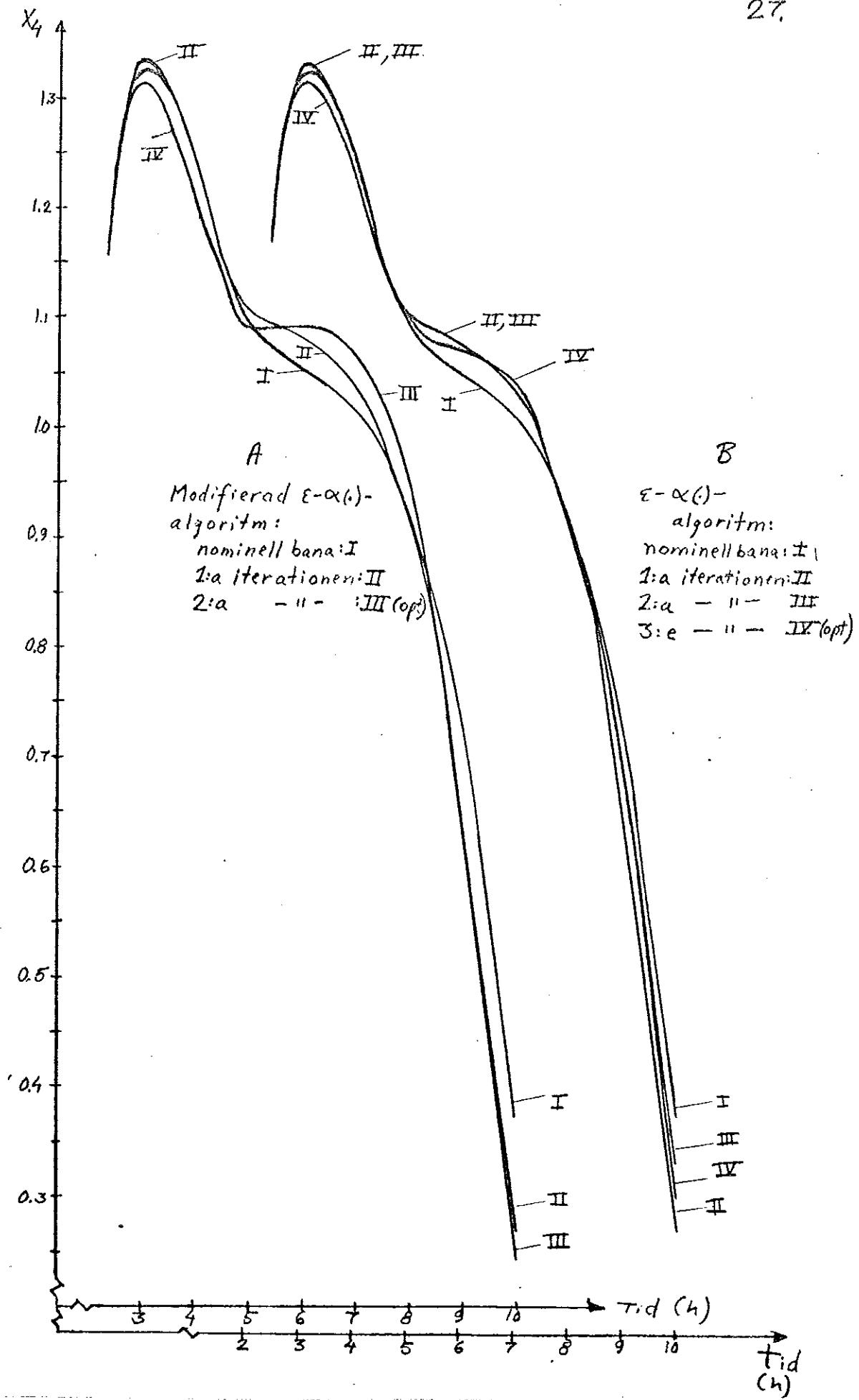


Fig. 7.2.1. Jämförelse av $\varepsilon-\alpha(\cdot)$ -algoritm och modifierad $\varepsilon-\alpha(\cdot)$ -algoritm. Parametervärden se sid.26. Karakteristiska storheter för varje iteration ges i fig.7.2.2.

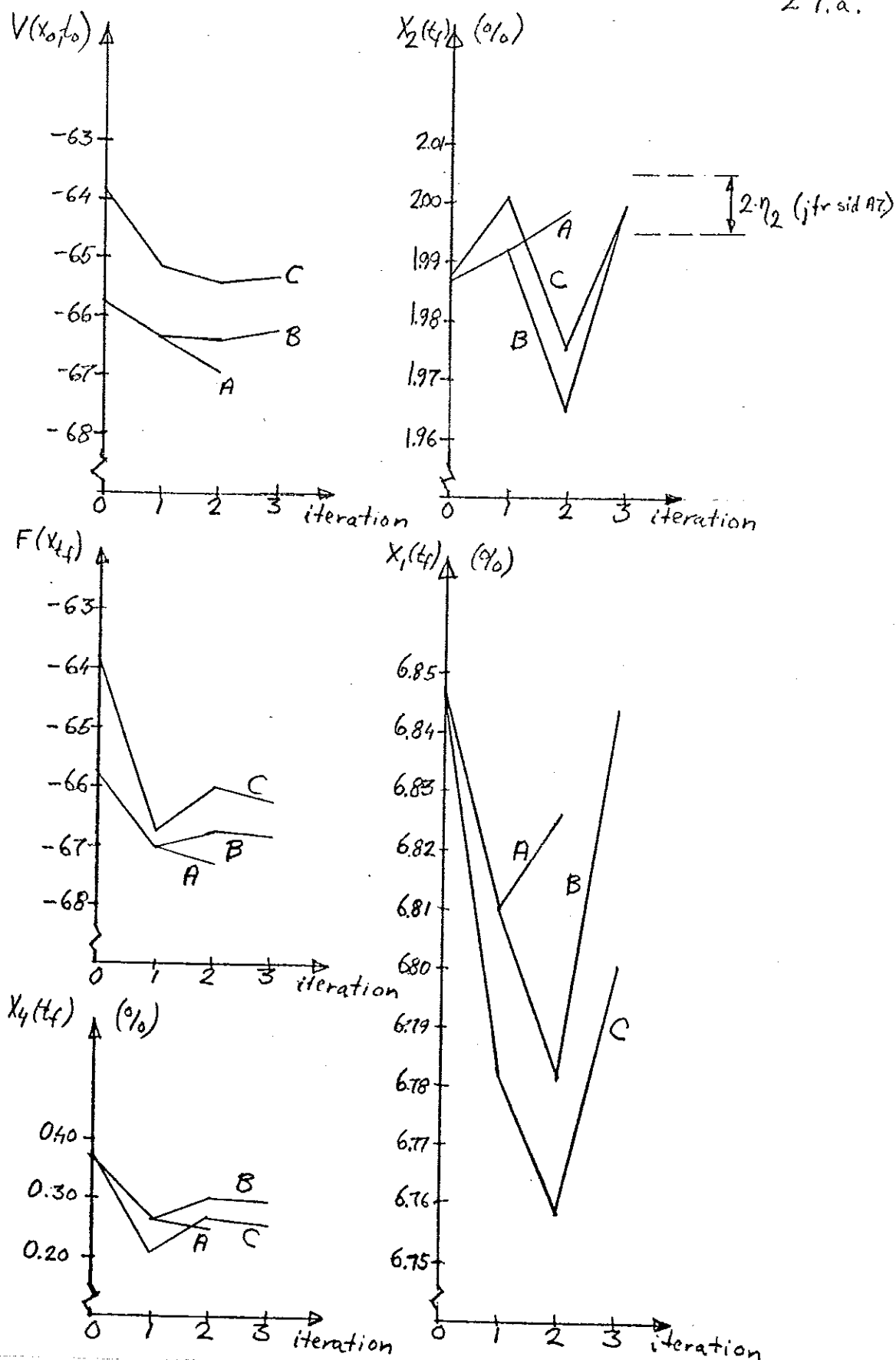


Fig. 7.2.2. Jämförelse av ε - $\alpha(\cdot)$ -algoritm (B) och modifierad ε - $\alpha(\cdot)$ -algoritm (A): $V(x_0, t_0)$, $F(x_f, t_f)$, $x_1(t_f)$, $x_2(t_f)$, $x_4(t_f)$ för varje iteration. Parametervärden se sid.26. Som jämförelse visas också (C) ε - $\alpha(\cdot)$ -algoritmen då k_c har ändrats till 50 (jfr. parametervärden sid.26). För A är 2:a iterationen b-iteration, för B och C är 3:e iterationen b-iteration.

7.3. Karakteristiska kurvor, synpunkter på olika styrstrategier ur kostnadssynpunkt.

Med start från initialgissning och följande parametervärden:

$$\left\{ \begin{array}{l} \varepsilon_I = 0,001 \quad \eta_1 = 0,05 \quad A_1 = 10 \quad P_{\max} = 10 \text{ bar} \\ \varepsilon_{II} = 0,01 \quad \eta_2 = 0,005 \quad K_a = K_b = 10 \quad t_f = 10 \text{ timmar} \end{array} \right\}$$

erhölls med den ursprungliga $\varepsilon-\alpha(\cdot)$ -algoritmen utvecklingen enligt fig. 7.3.1. Efter fortsättning med den modifierade $\varepsilon-\alpha(\cdot)$ -algoritmen kunde $x_2(t_f) = 6,981$ uppnås, dvs. praktiskt taget samma utbyte som i det förenklade problemet i avd. 6. Utbytet för olika totaltryck ges alltså fortfarande av fig.6.3.6.

Karakteristiska kurvor för $P \leq 10$ bar finns i fig.7.3.2.-7.3.4.

Då styrlagen, som ger $x_2(t_f) = 6,981$, har betydligt större styrsignaler än den, som ger $x_2(t_f) = 6,970$, så kan den förra ur realiserings-synpunkt vara mindre ekonomiskt lönsam än den senare. I fig.7.3.5. visas optimala styrstrategier framtagna med olika grad av bestraffning på styrsignalernas storlek. (Olika storlek på ξ -straffet.)

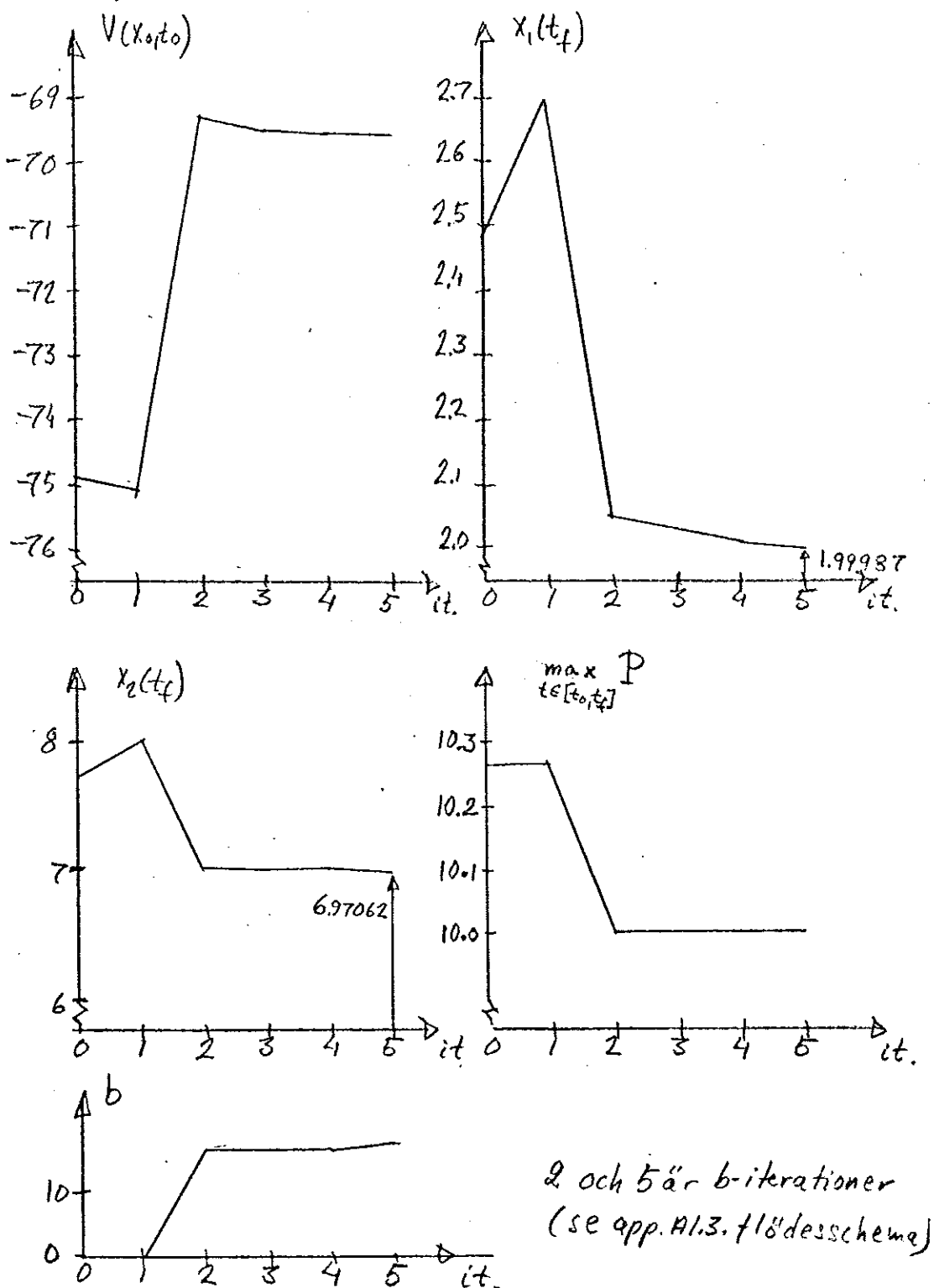


Fig.7.3.1. Algoritmens uppförande då kokartrycket $P \leq P_{\max}$: $V(x_0, t_0)$, $x_1(t_f)$, $x_2(t_f)$, b , $\max_{t \in [t_0, t_f]} P$ för varje iteration. Parametervärden se sid. 28. Efter en iteration av ϵ - $\alpha(\cdot)$ -algoritmen innefattande 5 iterationer av DDP-algoritmen i A1.3. erhöles en optimal lösning (II i fig.7.3.5). Denna användes sedan som startvärde för den modifierade ϵ - $\alpha(\cdot)$ -algoritmen (enligt metodiken beskriven i avd. 7.2.), varvid en optimal lösning (I i fig. 7.3.5., fig.7.3.2.-7.3.4.) erhöles efter 3 iterationer av algoritmen i A1.3.

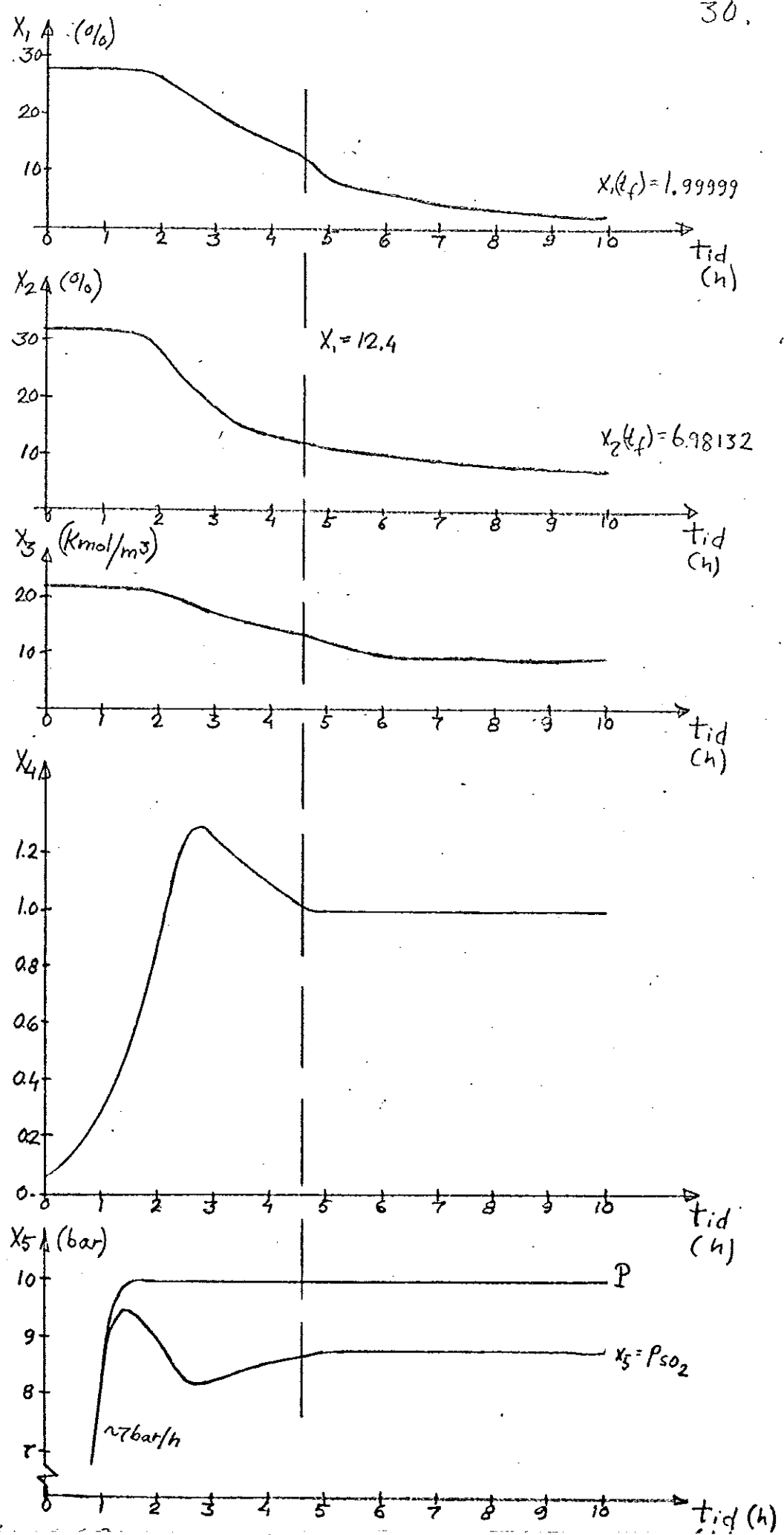


Fig.7.3.2. Optimal lösning då $P \leq P_{max} = 10$ bar: x_1, x_2, x_3, x_4, x_5 .

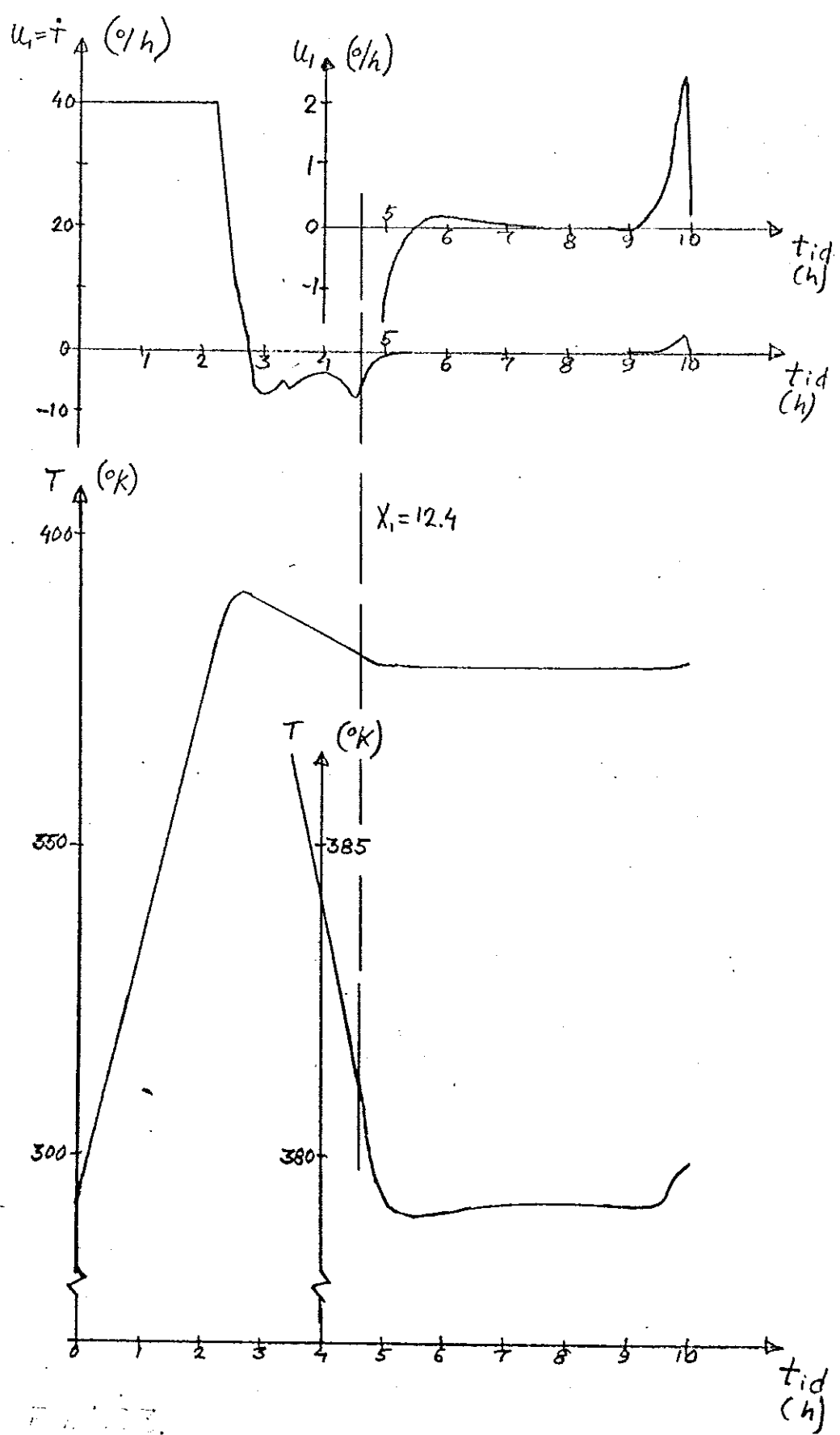


Fig. 7.3.3. Optimal lösning då $P \leq P_{\max} = 10$ bar: $u_1 = \dot{T}, T$

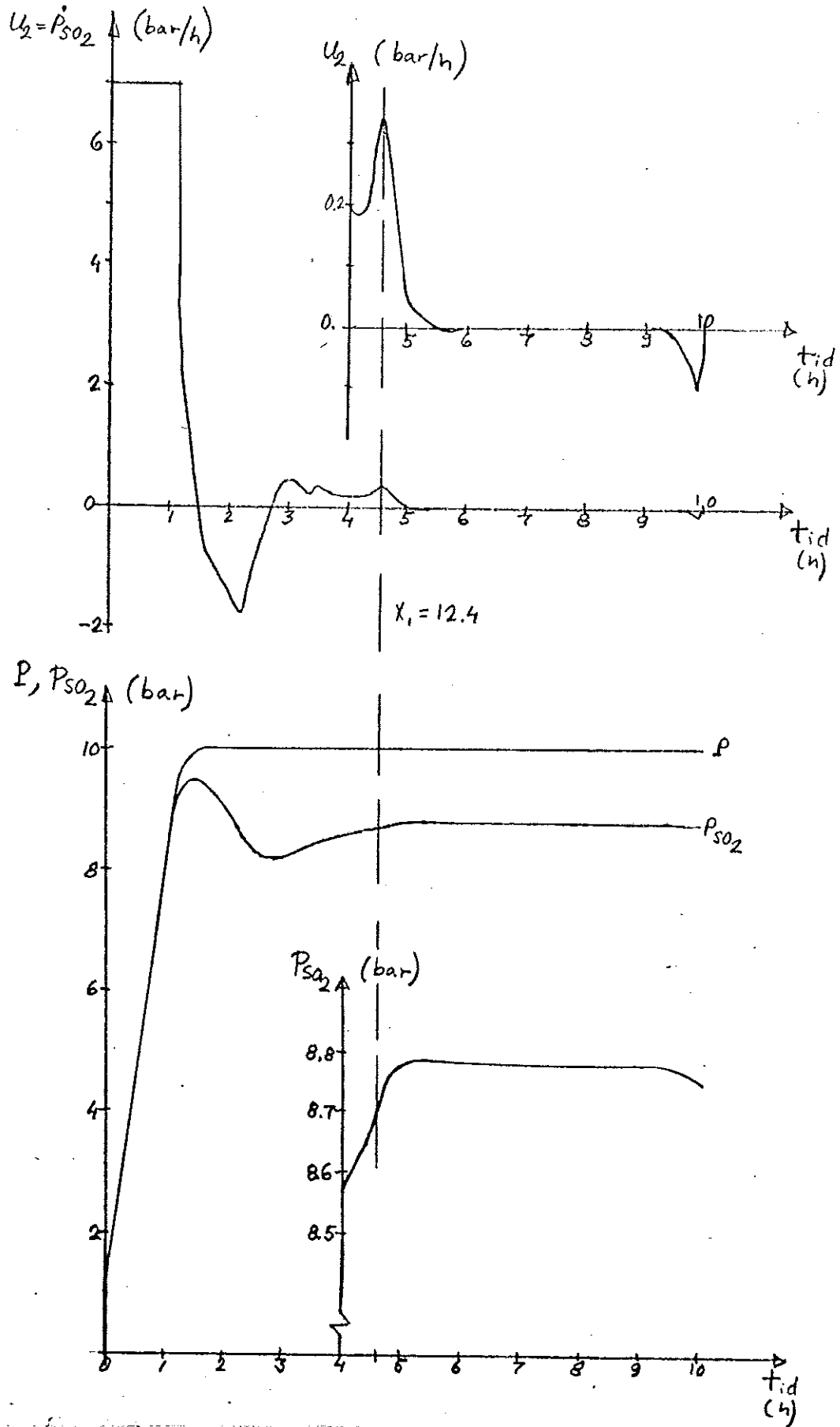


Fig.7.3.4. Optimal lösning då $P \leq P_{max} = 10$ bar: $u_2 = \dot{P}_{SO_2}, P_{SO_2}, P$.

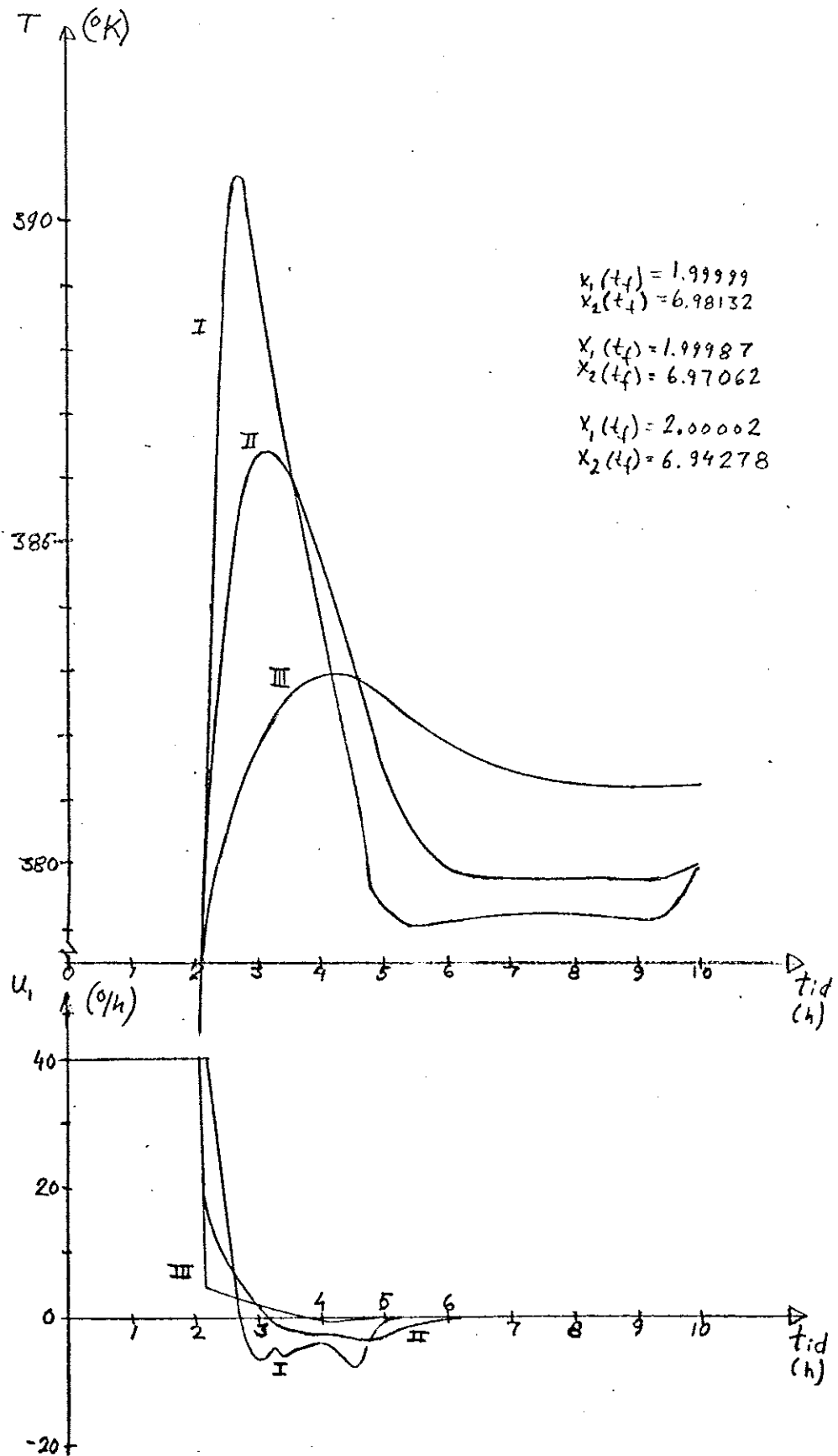


Fig.7.3.5. Optimala lösningar ur realiseringsynpunkt. Styrsignalernas storlek har bestraffats i olika hög grad.

7.4. Neddragning av sluttemperaturen.

I kap 6.3. påpekades att möjligheter finns till ändring av slutet av temperaturbanan utan att utbytet väsentligt försämras.

Det kan vara en fördel i den verkliga processen att dra ner sluttemperaturen. Därför infördes ett straff på $x_4(t_f)$ i $F(x(t_f), t_f)$:

$$F(x(t_f), t_f) = -k_a \cdot x_2(t_f) + k_b (x_1(t_f) - 2,0)^2 + \\ + k_c (x_4(t_f) - 0,06)^2$$

Om man vill dra ner temperaturen till ett visst värde , så införs dessutom ett villkor av typen $\Psi(x_4(t_f)) = 0$. Här var kravet på sluttemperatur inte fixerat, därför skulle det vara onödigt att använda exekveringstid för att uppfylla $\Psi(x_4(t_f)) < \eta_2$ (se A1.3.). På grund av det tidigare kravet på $x_1(t_f)$ har η_2 fått sättas på det låga värdet 0,005. ($|\Psi_1| < 0,005$ krävs för att $x_2(t_f)$ inte skall bero av $|\Psi_1|$.)

Med olika värden på k_c erhöles kurvskaran med motsvarande utbyte i fig.7.4.1.

Karakteristiska kurvor för en styrlag som drar ner sluttemperaturen visas i fig.7.4.2.-7.4.4.

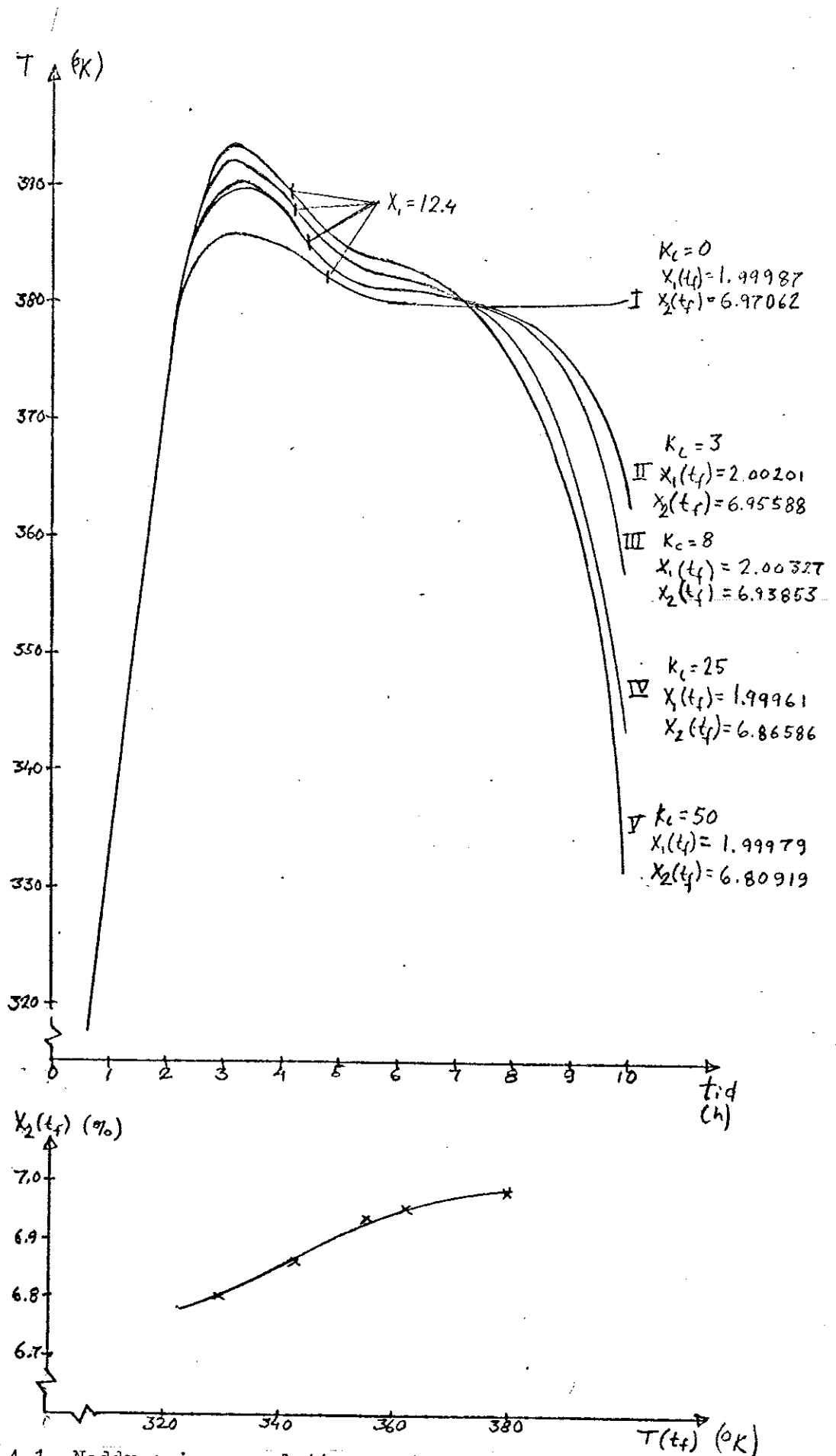


Fig.7.4.1. Neddragning av sluttemperaturen. Optimala banor då olika vikt her lagts på att sluttemperaturen skall dras ner: $P \leq 10$ bar
 $k_a = k_b = 10$, k_c se fig. (beteckningar k_a , k_b , k_c se sid. 34.)

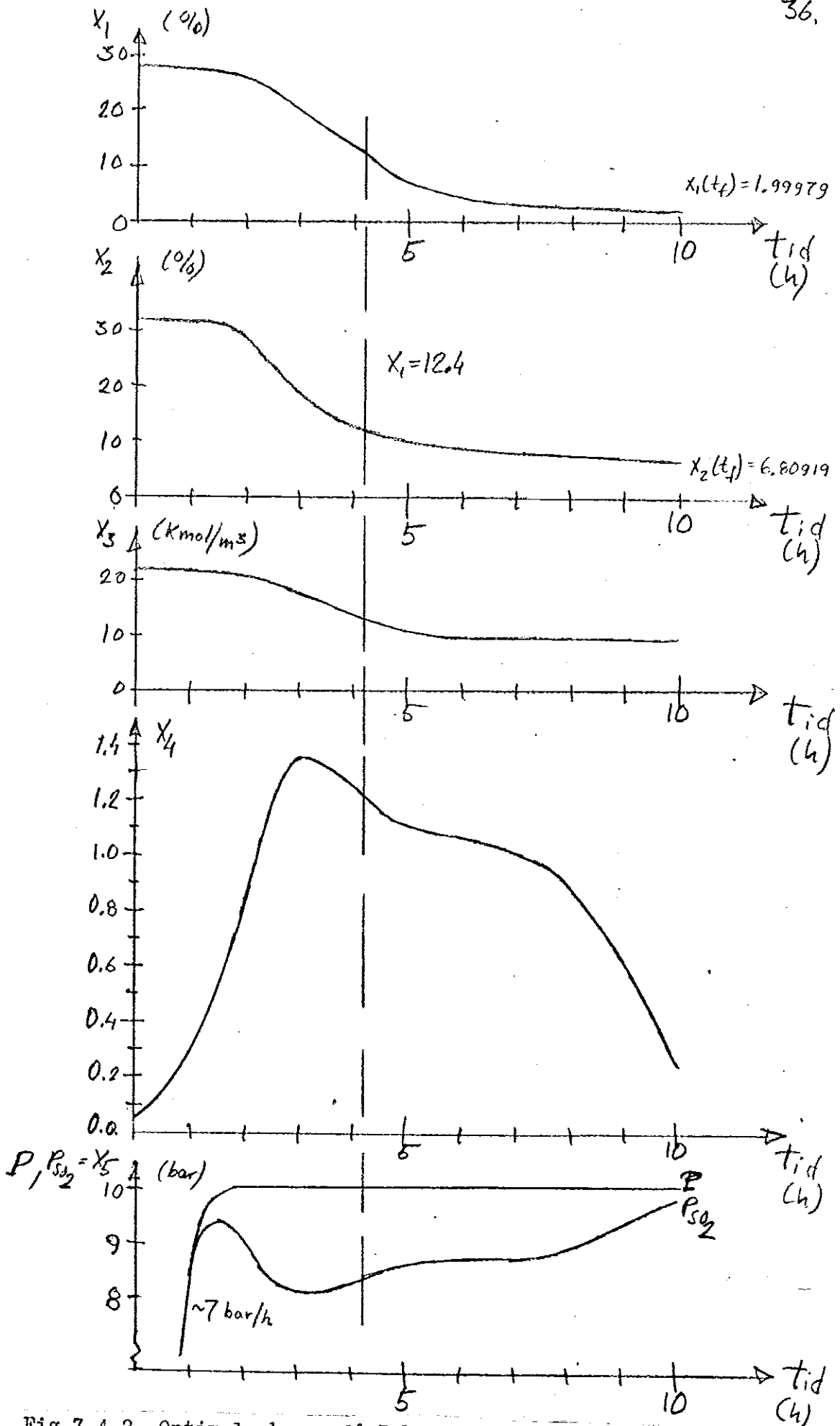


Fig.7.4.2. Optimala banor då $P \leq 10$ bar och sluttemperaturen dras ner: ($k_a = k_b = 10, k_c = 50$). x_1, x_2, x_3, x_4, x_5 .

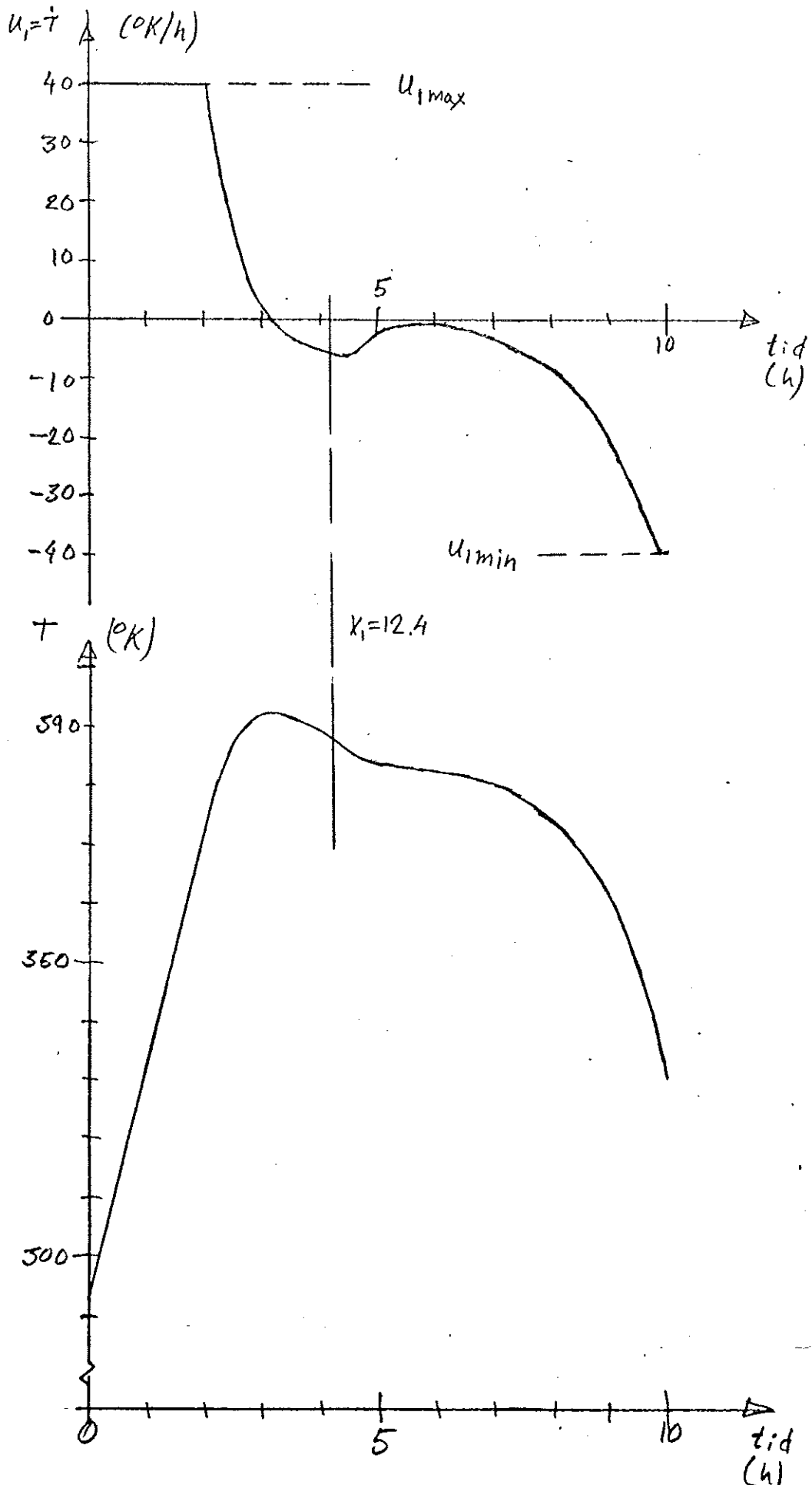


Fig.7.4.3. Optimala banor då $P \leq 10$ bar och sluttemperaturen dras ner:
($k_a = k_b = 10, k_c = 50$) $u_1 = \dot{T}, T$

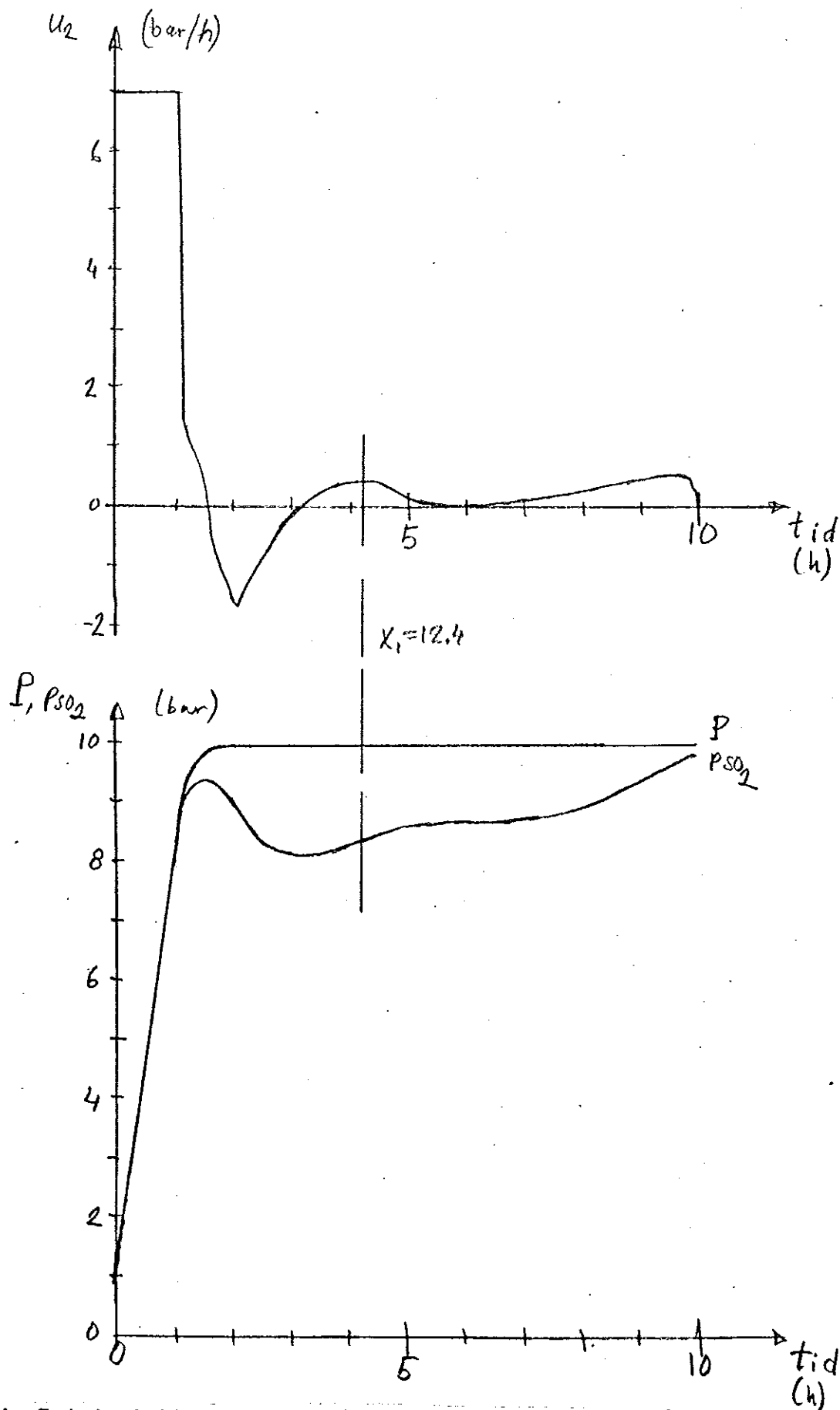


Fig.7.4.4. Optimala banor då $P \leq 10$ bar och sluttemperaturen dras ner:
 $(k_a = k_b = 10, k_c = 50)$ $u_2 = \dot{p}_{SO_2}, p_{SO_2}, P$

8. Metodens användbarhet.

Optimering kan ses som ett hjälpmedel att uppskatta vad som överhuvudtaget kan uppnås i en process. Detta kan vara till stor hjälp vid bedömning av lönsamheten av förändringar i processen.

Genom att karaktärisera systemets syfte med en skalär förlustfunktion och utföra optimering med hjälp av algoritmen i appendix A1.3., så erhålls en mycket allmän metod. Förlustfunktionen kan lätt ändras och andra begränsningar och randvillkor kan införas. På så sätt kan olika aspekter på processen undersökas.

Det krävs dock en hel del manipulerande med olika initialgissningar och parametervärden i algoritmen för att uppnå resultat.

9. Referenser.

- [1] Jacobson, D, H, Mayne, D, Q, "Differential Dynamic Programming", Elsevier Publishing Company, New York, 1970.
- [2] Mårtensson, K, " A constraining hyperplane technique for state variable constrained optimal control problems", Research report, institutionen för Reglerteknik, Lunds Tekniska Högskola, Lund 1972.
- [3] Schön, N, H, Hagberg, B, "Matematisk modell för sulfitecellulosaprocessen", personal communication, institutionen för Kemisk reaktionsteknik, Chalmers Tekniska Högskola, Göteborg.
- [4] Mårtensson, K, Ljung, L, "Optimal temperature and pressure control of the acid sulfite cooking process", Research report, institutionen för Reglerteknik, Lunds Tekniska Högskola, Lund 1972.
- [5] Jacobson, D, H, Gerschwin, S, B, Lele, M, M, "Computation of Optimal Singular Controls", IEEE Transactions on Automatic Control, vol. AC - 15, No 1, February 1970.
- [6] Bryson, A, E, Ho, Y, C, "Applied Optimal Control", kap. 8, Blaisdell, Waltham 1969.

Appendix 1.: Metoder för optimering på datamaskin.

I detta appendix beskrivs principerna för dynamisk programmering och differentiell dynamisk programmering. Sedan ges en kort beskrivning av en algoritm för differentiell dynamisk programmering

A1.1. Dynamisk programmering (DP).

Förutsättning: Man har ett dynamiskt system, som beskrivs med ett system av differentialekvationer $\dot{x} = f(x, u, t)$ med randvärden $x(t_0) = x_0$ och $x(t_f) = x_{t_f}$. Systemets syfte definieras av en given förlustfunktion.

Problem: Sök styrstrategi för $t \in [t_0, t_f]$, som minimerar förlustfunktionen då randvillkoren är uppfyllda. (Tvåpunkts randvärdesproblem)

Algoritm: 1) Antag att systemet befinner sig i tillståndet x_{t_f} vid tidpunkten t_f .

2) Tag ett steg i negativ tid. Beräkna för varje möjligt tillstånd, som systemet kan inta vid denna tidpunkt, den optimala banan till slutpunkten $x(t_f) = x_{t_f}$.

3) Proceduren 2) upprepas tills $t = t_0$, då man har den sökta styrstrategien.

Detta tillvägagångssätt kräver mycket stort minnesutrymme, då antalet möjliga tillstånd blir stort. ("Möjliga tillstånd" bestäms av att definitionsområdena för systemets variabler kvantiseras.)

DP är därför endast användbar på system av högst ordning 2.

Bellman, som introducerade DP, har visat följande partiella differentialekvation, där V betyder optimal förlustfunktion:

$$-\frac{\partial V}{\partial t}(x,t) = \min_u H(x,u,V_x,t), \text{ där Hamiltonfunktionen, } H \text{ definieras: } H(x,u,V_x,t) = L(x,u,t) + \left\langle V_x(x,t), f(x,u,t) \right\rangle. \left(\langle, \rangle \text{ betyder skalärprodukt, } V_x = \partial V / \partial x, \text{ definition av } L \text{ och } V \text{ se avd. 2.2.} \right)$$

A1.2. Differentiell dynamisk programmering (DDP).

DDP är en metod, som liknar DP. Men vid DDP undersöks för varje steg i negativ tid bara eventuella förbättringar av förlustfunktionen i närheten av den nominella banan. DDP är alltså en metod, som söker lokalt efter bättre styrstrategier, medan DP hela tiden söker globalt optimal styrstrategi. Därmed är behovet av minnesutrymme betydligt mindre vid DDP än vid DP.

DDP: Förlustfunktionen serieutvecklas runt den nominella banan till ett kvadratisk differentialuttryck. Ett nytt system av differentialekvationer härleds, ur vilket koefficienterna till det kvadratiske uttrycket kan bestämmas. Problemet i A1.1. kan nu lösas med :

- Algoritm: 1) Den nominella styrstrategien appliceras och systemekvationerna integreras i positiv tid, så att nominella x-banor erhålls.
- 2) Det andra systemet av differentialekvationer integreras i negativ tid, så att en förbättrad styrstrategi kan erhållas.
- 3) Sätt den nya styrstrategien till nominell styrstrategi. Gå till 1).

Proceduren avbryts när förbättringen av förlustfunktionen är liten.

A1.3. DDP-algoritmen.

Utförligare beskrivningar finns i [1] och [2].

Definitioner:

System: $\dot{x} = f(x, u, t)$, $x(t_0) = x_0$

Begränsningar: $g(u, t) \leq 0$, $S(x, t) \leq 0$

Randvillkor: $\Psi(x(t_f), t_f) = 0$

Förlustfunktion: $V(x_0, t_0) = \int_{t_0}^{t_f} L(x, u, t) dt + F(x(t_f), t_f)$

Estimerad förbättring av förlustfunktionen:

$$a(\bar{x}, t) = V(\bar{x}, t) - \bar{V}(\bar{x}, t)$$

Beteckningar:

Nominella storheter: \bar{x} , \bar{u} , \bar{V} , o.s.v.

Derivator: $V_{x_1} = \frac{\partial V}{\partial x_1}$, $H_u = \begin{pmatrix} \frac{\partial H}{\partial u_1} \\ \frac{\partial H}{\partial u_2} \\ \vdots \end{pmatrix}$, $H_{uu} = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 H}{\partial u_1^2} & \frac{\partial^2 H}{\partial u_1 \partial u_2} & \dots \\ \frac{\partial^2 H}{\partial u_2 \partial u_1} & \frac{\partial^2 H}{\partial u_2^2} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$ o.s.v.

Bortse till en början från begränsningarna g, S och villkoret Ψ .

V och V_x serieutvecklas i δx omkring \bar{x} och insättes i Bellmans partiella differential ekvation:

$$-\frac{\partial \bar{V}}{\partial t} - \frac{\partial a}{\partial t} - \left\langle \frac{\partial V_x}{\partial t}, \delta x \right\rangle - \frac{1}{2} \left\langle \delta x, \frac{\partial V_{xx}}{\partial t} \delta x \right\rangle = \min_{\delta u} H(\bar{x} + \delta x, \bar{u} + \delta u, V_x + V_{xx} \delta x + \frac{1}{2} V_{xxx} \delta x \delta x) \quad (A1.3.1.)$$

Sätt $\delta x = 0$. Minimeringen av högerledet i (A1.3.1.) innebär då: Bestäm

$u^* = \bar{u} + \delta u^*$ som satisfierar $H_u(\bar{x}, u^*, V_x, t) = 0$. Men om $\delta u^* \neq 0$, så fås

som verkan att $\delta x \neq 0$. För att uppfylla minimeringsvillkoret krävs en

modifiering δu , så att $u = u^* + \delta u$. Inför därför lokal linjär återkoppling

β , så att $\delta u = \beta \delta x$. I [1] härleds uttrycket för β , vilket inne-

håller H_{uu}^{-1} . Algoritmen kräver alltså att H_{uu} är inverterbar (jfr. [6]).

För konvergens kräver algoritmen att H är strikt konvex i närheten av u^*

Genom insättning av uttrycket för β i (A1.3.1) och i serieutvecklingar av V_x och V_{xx} , erhålls ett ekvationssystem för \dot{a} , \dot{V}_x och \dot{V}_{xx} .

Randvärden erhålls ur $F_x(t_f)$, $F_{xx}(t_f)$ och $a(t_f)$. Med hjälp av detta ekvationssystem, som integreras i negativ tid, kan algoritmen räkna fram den förbättrade styrlagen $u = u^* + \beta \delta x$.

Men den nya styrstrategien kan inte appliceras direkt över hela intervallet $[t_0, t_f]$. För att den verkliga förbättringen ΔV av förlustfunktionen skall vara i närheten av den predikterade förbättringen a , krävs att δx är så litet, att de använda serieutvecklingarna är goda approximationer. Serieutvecklingarna är ju av andra ordningen, medan problemet inte behöver vara linjärkvadratisk.

Om $\Delta V/a(\bar{x}, t_0) > C$ (C väljs till 0,5 eller 0,0), så anses ΔV vara "nära" $a(\bar{x}, t_0)$ och hela banan accepteras. I annat fall sätts $t_1 = t_0 + (t_f - t_0)/2$ och t_1 undersöks o.s.v. I stället för t_f används t_{eff} , som är den tidpunkt då a överstiger ett förutbestämt värde η_1 . På så sätt går t_{eff} alltmer mot t_0 för varje iteration. Detta förfaringsätt kallas i [1] "step size adjustment".

$$\Psi(x(t_f), t_f) = 0 :$$

Inför villkoret $\Psi(x(t_f), t_f) = 0$. $\Psi(x(t_f), t_f)$ adjungeras till förlustfunktionen med en Lagrangemultiplikator b :

$$V(x_0, b, t_0) = \int_{t_0}^{t_f} L(x, u, t) dt + F(x(t_f), t_f) + \langle b, \Psi(x(t_f), t_f) \rangle$$

Nu får V serie utvecklas i δx och δb runt \bar{x} och \bar{b} . Som tidigare bestäms u^* ur $H_u(\bar{x}, u^*, V_x, t) = 0$. Nu krävs lokal återkoppling från både δx och δb : $u = u^* + \delta u = u^* + \beta_1 \delta x + \beta_2 \delta b$. Genom insättning i (A1.3.1) och i serieutvecklingar av $V_x, V_{xb}, V_{bb}, V_{xx}$ så fås ett ekvationssystem för

\dot{a}, \dot{V}_x och \dot{V}_{xx} , och ett ekvationssystem för \dot{V}_{xb} och \dot{V}_{bb} . Det första ekvationssystemet används som tidigare. När en optimal styrstrategi har beräknats på samma sätt som tidigare, så integreras \dot{V}_{xb} och \dot{V}_{bb} i negativ tid från t_f till t_0 , för att $\Psi(x(t_f), t_f)$ skall reduceras och ett nytt b beräknas.

Genom att Ψ adjungeras till V , så kan problemet lösas som ett fri-ändpunkts-problem mellan varje bestämning av nytt b .

$g(u, t) \leq 0$:

Beakta nu även $g(u, t) \leq 0 \Leftrightarrow \begin{cases} g_1(u, t) \leq 0 \\ \vdots \\ g_p(u, t) \leq 0 \end{cases}$, minimeringen av H måste nu utföras med hänsyn till att $g(u, t) \leq 0$ skall vara uppfyllt. När \hat{p} ($0 \leq \hat{p} \leq p$) av villkoren g_i blir aktiva, sätts motsvarande $g_i(u, t) = 0$ (Se fig.A.1.)

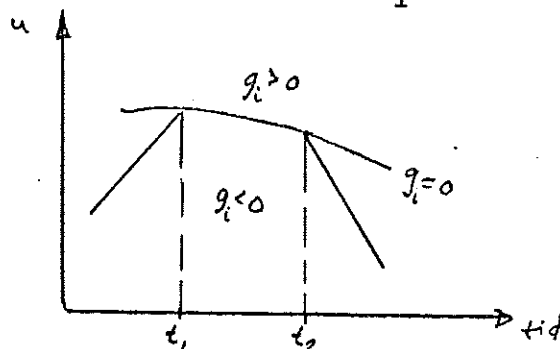


Fig.A.1. Begränsning $g_i(u, t) \leq 0$, aktiv i $[t_1, t_2]$.

Bilda $J(\bar{x}, \hat{u}, \lambda, V_x, t) = H(\bar{x}, \hat{u}, V_x, t) + \langle \lambda, \hat{g}(\hat{u}, t) \rangle$. Minimera nu J med avseende på u , d.v.s. sätt $\partial J / \partial u = 0$ varur u^* erhålls. λ erhålls ur

$$\partial J / \partial \lambda = \hat{g}(\hat{u}, t)$$

$S(x, t) \leq 0$:

Modifieringar, för att även klara begränsningar av typen $S(x, t) \leq 0$, har införts i [2]:

Derivera S tills u uppträder explicit. Om p derivationer krävs, så är begränsningen S av ordningen p .

$$\frac{d^p S}{dt^p} = \frac{d^p S}{dt^p}(x, u, t)$$

Bilda $\tilde{g}(x,u,t) = \frac{d^p S}{dt^p} + A_1 \frac{d^{p-1} S}{dt^{p-1}} + A_2 \frac{d^{p-2} S}{dt^{p-2}} + \dots + A_p S \leq 0$, där A_1, A_2, \dots

\dots, A_p väljs, så att lämplig hänsyn tas till att $S(x,t) \leq 0$ skall vara uppfyllt.

När $\tilde{g}(x,u,t)$ blir aktivt så adjungeras $\tilde{g}(x,u,t)$ till H:

$$H(x,u,V_x,t,q) = L(x,u,t) + \left\langle V_x(x,b,t), f(x,u,t) \right\rangle + \left\langle q, \tilde{g}(x,u,t) \right\rangle$$

där $q > 0$ endast då S aktivt.

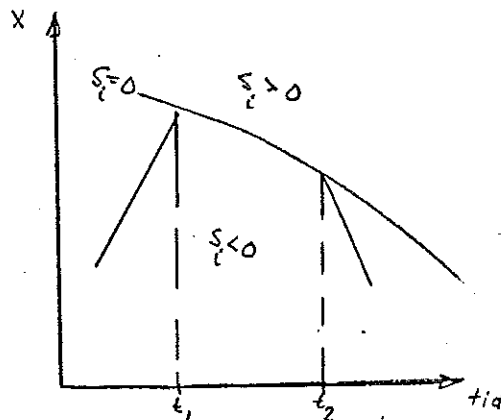
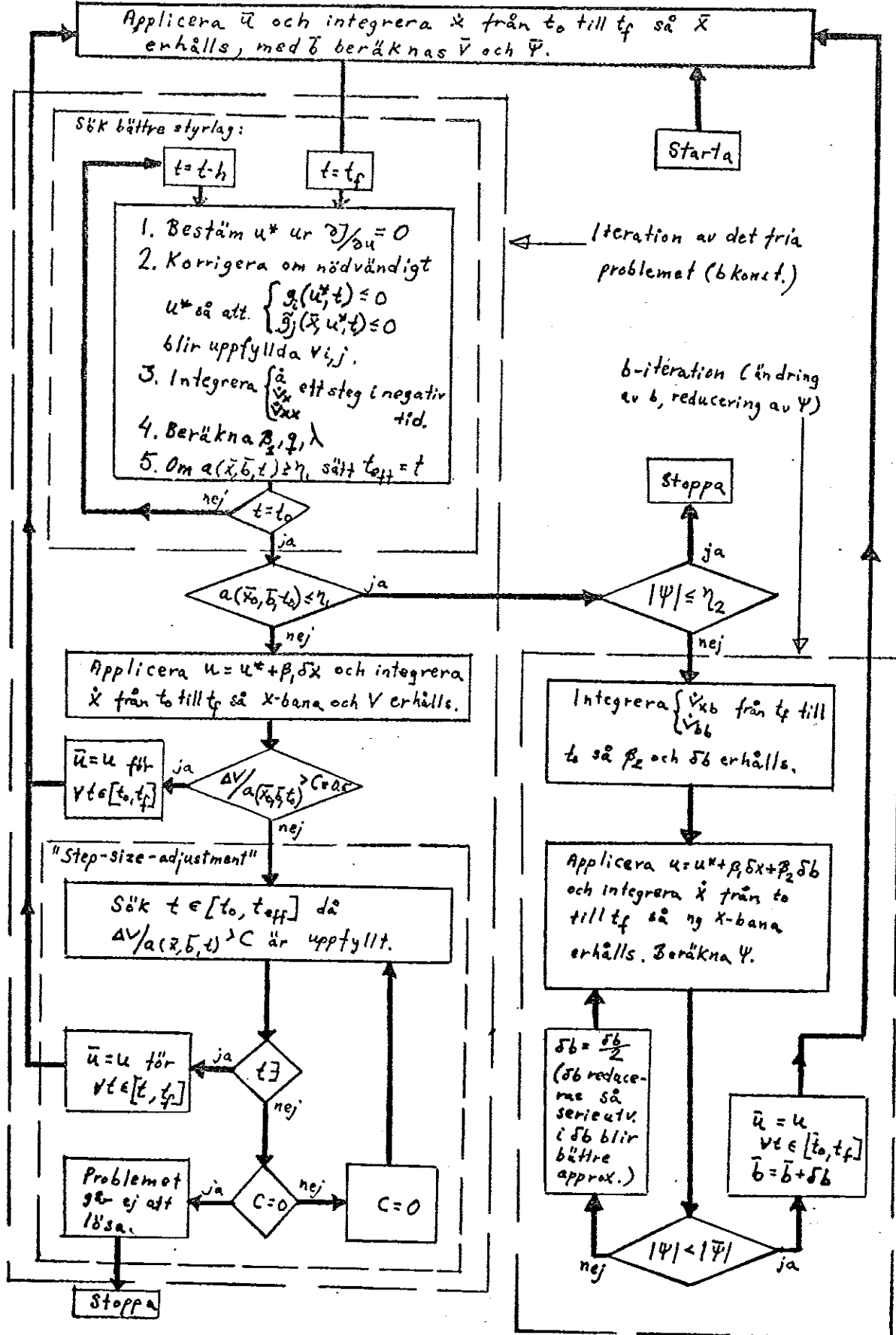


Fig A.1.2. Begränsning $S(x,t) \leq 0$, aktiv i $[t_1, t_2]$

På sid. A7. ges ett flödesschema för algoritmen.

Flödesschema för DDP-algoritmen

System: $\dot{x} = f(x, u, t), x(t_0) = x_0, \psi(x_{t_f}, t_f) = 0, g(u, t) \leq 0, \delta(x, t) \leq 0 \Rightarrow \tilde{g}(x, u, t) = 0$
 Förlostfunktion: $V(x_0, t_0) = \int_{t_0}^{t_f} L(x, u, t) dt + F(x_{t_f}, t_f) + \langle b, \psi(x_{t_f}, t_f) \rangle$
 $H(x, u, \lambda, V_x, g, t) = L(x, u, t) + \langle V_x, f(x, u, t) \rangle + \langle g, \frac{d^p S}{dt^p}(x, u, t) \rangle$
 $J(x, \bar{u}, \lambda, V_x, g, t) = H(x, \bar{u}, V_x, g, t) + \langle \lambda, \tilde{g}(\bar{u}, t) \rangle$



Appendix 2. Beteckningar och parametervärden för sulfitcellulosaprocessen.

A2.1. Beteckningar.

- L = ligninhalt, % av ved
- C = hemicellulosahalt, % av ved
- t = tid, timmar
- T = absolut temperatur, °K
- $[\text{HSO}_3^-]$ = vätesulfitjonkonc., kmol/m³
- $[\text{H}^+]$ = vätejonkonc., kmol/m³
- $[\text{S}^-]$ = konc. av anjoner till starka syror, kmol/m³
- v = vätska/ved-förhållande, dm³/kg
- $[\text{Na}^+]$ = bashalt, kmol/m³
- P_{SO_2} = partialtryck av svaveldioxid, bar
- $P_{\text{H}_2\text{O}}$ = partialtryck av vatten, bar
- P = kokartryck, bar
- k_L^0, k_C^0, k_S^0 = hastighetskonstanter
- E_L, E_C, E_S = temperaturfaktorer, 1/°K
- m, $\alpha, \beta, n, \nu, s, \delta, \epsilon$ = reaktionsordning
- g, h = konstanter
- $K_{\text{SO}_2}, K_{\text{H}_2\text{O}}$ = jämviktskonstanter
- index o gäller för t = 0
- f " " kokets slut

A2.2. Nya beteckningar.

$$N = [\text{Na}^+]$$

$$k_1 = k_L^0$$

$$k_2 = k_C^0$$

$$k_3 = k_S^0/v$$

$$k_4 = h/v$$

$$k_5 = g/v$$

$$l_1 = E_L$$

$$l_2 = E_C$$

$$l_3 = E_S$$

$$l_4 = m$$

$$l_5 = \alpha$$

$$l_6 = \beta$$

$$l_7 = n$$

$$l_8 = \nu$$

$$l_9 = s+1$$

$$l_{10} = \delta$$

$$l_{11} = \epsilon$$

$$l_{12} = K_{\text{pSO}_2}$$

A2.3. Parametervärden.Delignifiering:

	$L \geq 12,42$	$L < 12,42$
k_L^0	$0,4845 \cdot 10^{16}$	$0,1464 \cdot 10^{16}$
E_L	12495	12506
m	0,6463	1,6212
α	0,8186	0,7646
β	0,7053	0,7794

(Standardavv. $\sigma = 0,445$) $[Na^+] = 0,375$ Hemicellulosautlösning:

$$k_C^0 = 0,4541 \cdot 10^{15}$$

$$n = 2,542$$

$$E_C = 14031$$

$$\nu = 0,7069$$

($\sigma = 0,78$)Bildning av anjoner till starka syror:

$$g = 0,09703$$

$$s = 1,3991$$

$$h = -0,002584$$

$$\delta = 1,5287$$

$$k_S^0 = 0,2824 \cdot 10^{16}$$

$$\epsilon = 0,6903$$

$$E_S = 15715$$

$$(\sigma = 0,0075 \text{ av } [S^-]_v / (I_0 - L))$$

$$\nu = 4,5$$

Svaveldioxidens prototypjämvikt:

$$\text{I} \quad \log K_{P_{SO_2}} = 2392/T - 9,430 \quad \text{för} \quad 293 < T < 353$$

$$\text{II} \quad \log K_{P_{SO_2}} = 2665/T - 10,208 \quad \text{för} \quad 353 \leq T < 393$$

$$\text{III} \quad \log K_{P_{SO_2}} = 2960/T - 10,948 \quad \text{för} \quad 393 \leq T \leq 423$$

I undersökningen används II för hela intervallet $293 \leq T \leq 423$

Vattenångans partialtryck.

$$\log p_{\text{H}_2\text{O}} = 5,882 - 2198/T \quad \text{d.v.s.}$$

$$p_{\text{H}_2\text{O}} = k_{\text{I}} \cdot (10^4 e^{-3500/T})^{k_{\text{II}}} \quad \text{för } 293 \leq T \leq 423$$

$$\text{där } k_{\text{I}} = 10^{(5,882 - 4 \cdot k_{\text{II}})}$$

$$k_{\text{II}} = 2198 \cdot \log 10 / 3500$$

$$p_{\text{H}_2\text{O}} = f(T), \text{ se fig. A.2.3.}$$

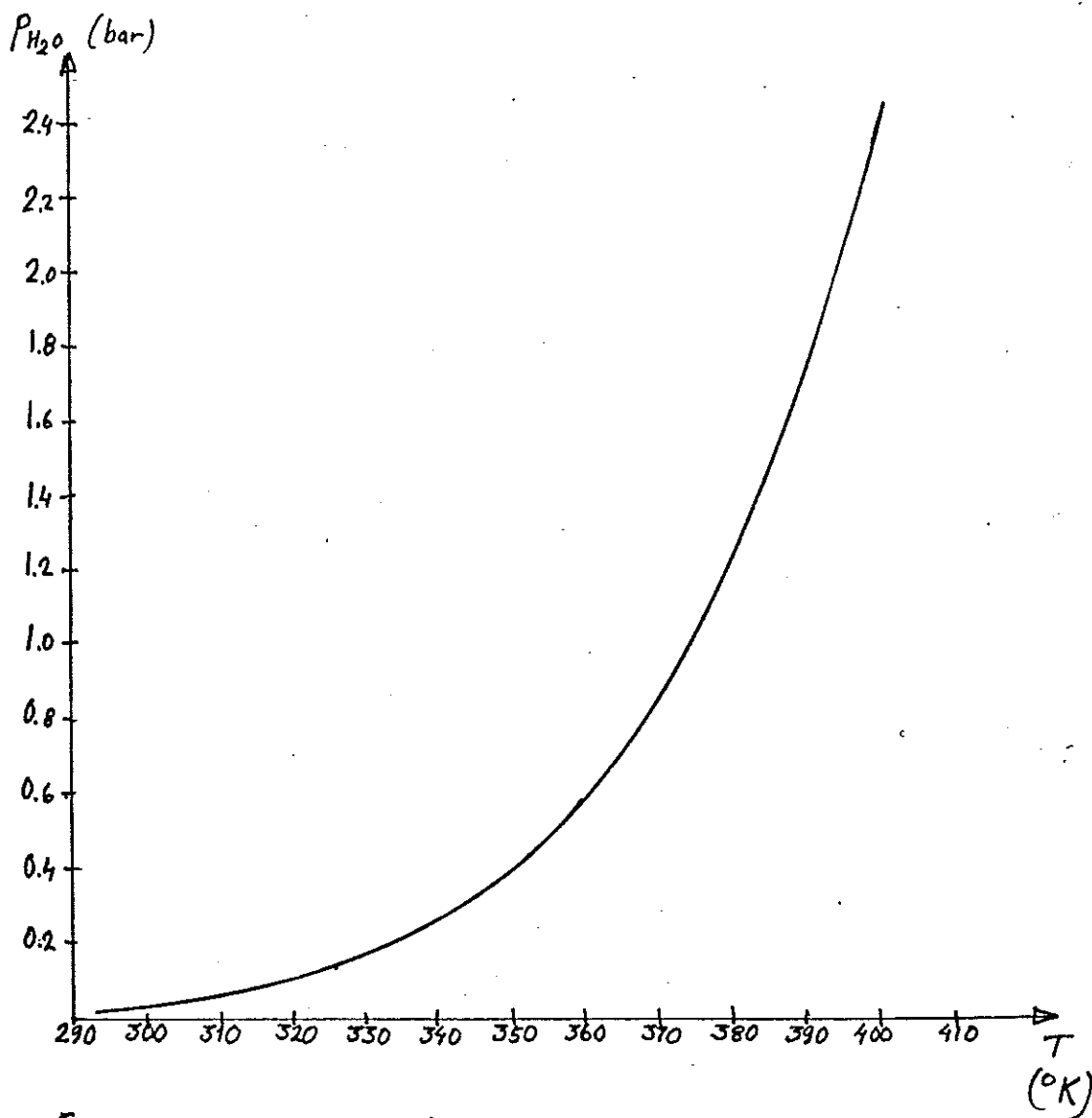
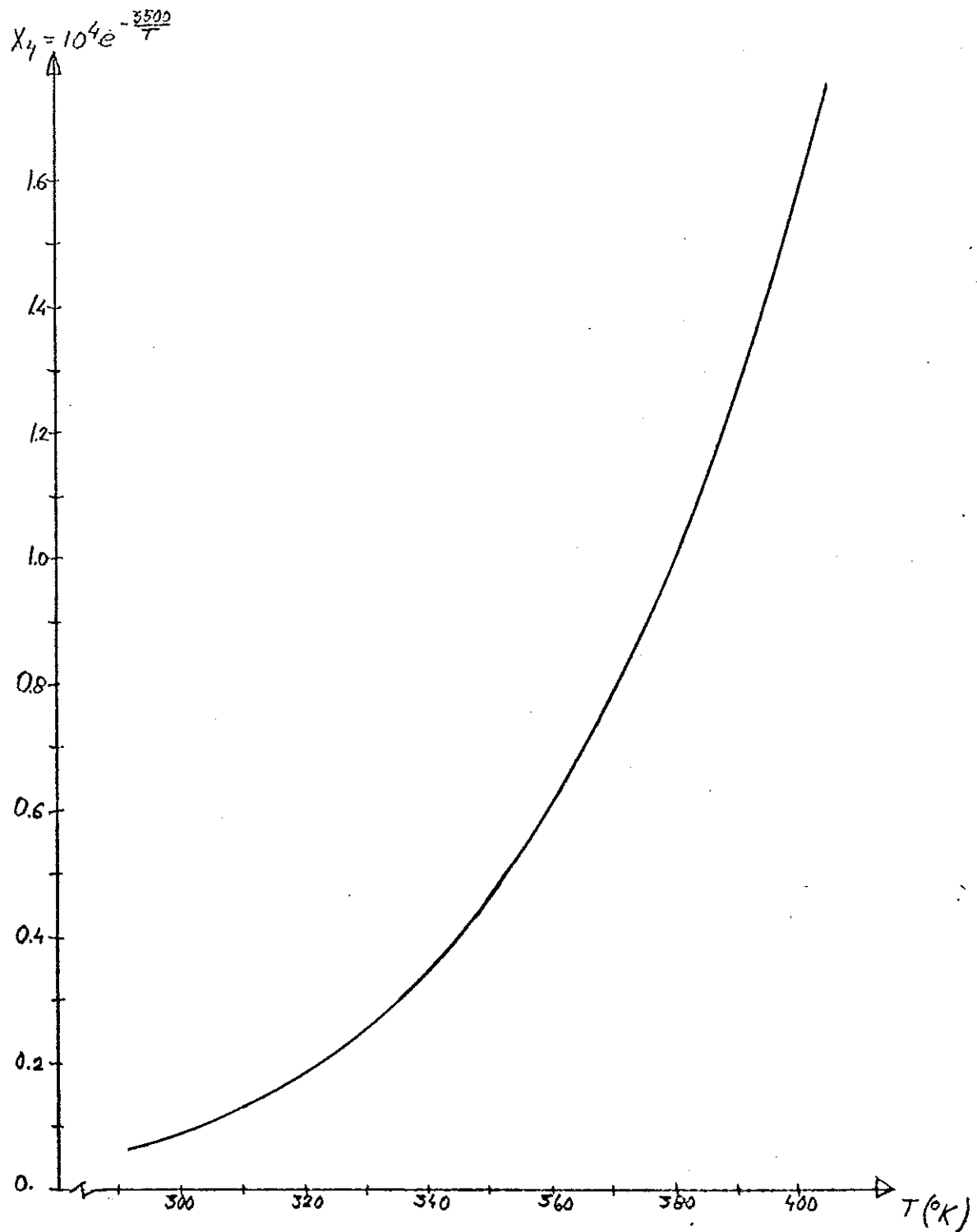


Fig. A.2.3. $p_{\text{H}_2\text{O}} = f(T)$

A2.4. Kemisk temperaturvariabel.

$$x_4 = 10^4 \cdot e^{-3500/T}$$

Fig. A2.4. $x_4 = F(T)$

Appendix 3. Kompletterande figurer.

sid.

Fig.A3.1.-A3.2. Tillstånds- och styrvariabler motsvarande fig.6.3.5.

AAA2

Fig.A3.3.-A3.4. Optimal lösning då p_{SO_2} = konstant = 10 bar

AAA4

Fig.A3.5.-A3.10. Fullständiga kurvor för fall II och III i fig.7.3.5.

AAA6

Fig.A3.11.-A3.13. Fullständiga kurvor för fall II - IV i fig.7.4.1.

AAA9

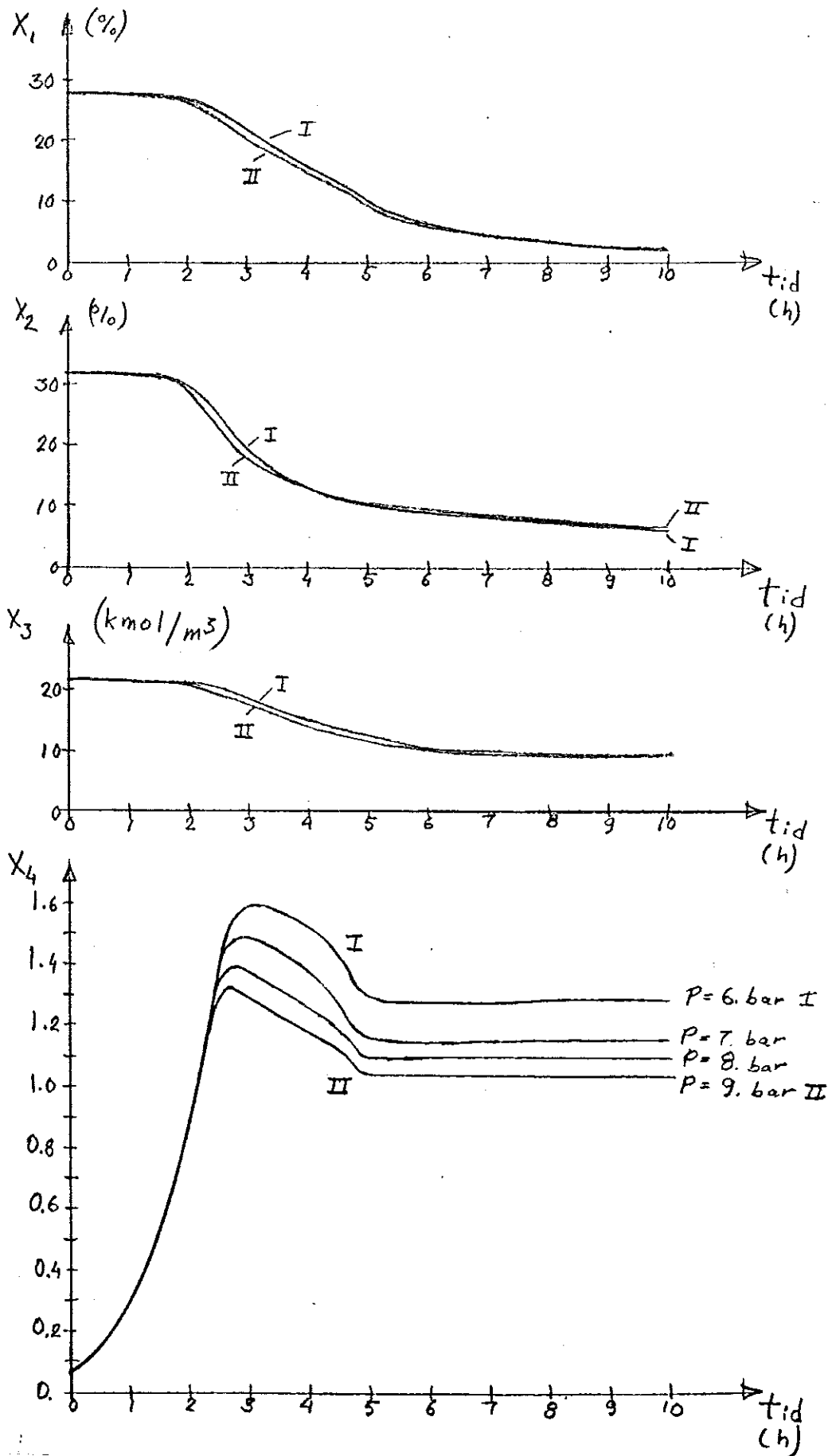


Fig.A3.1. x_1, x_2, x_3, x_4, x_5 motsvarande kurvor i fig.6.3.5.

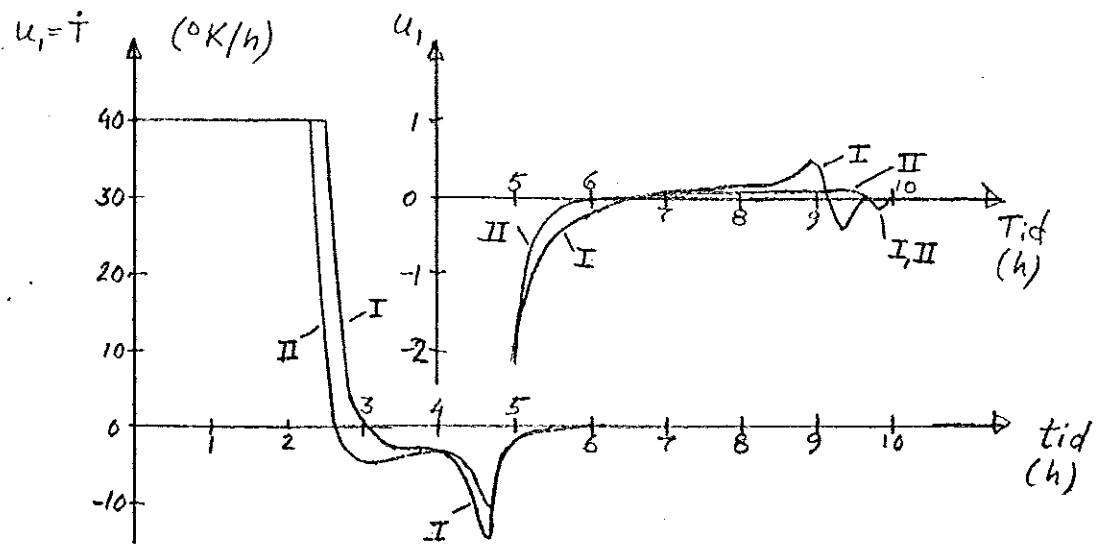


Fig.A3.2. $u_1 = \dot{T}$ motsvarande kurvor i fig.6.3.5.

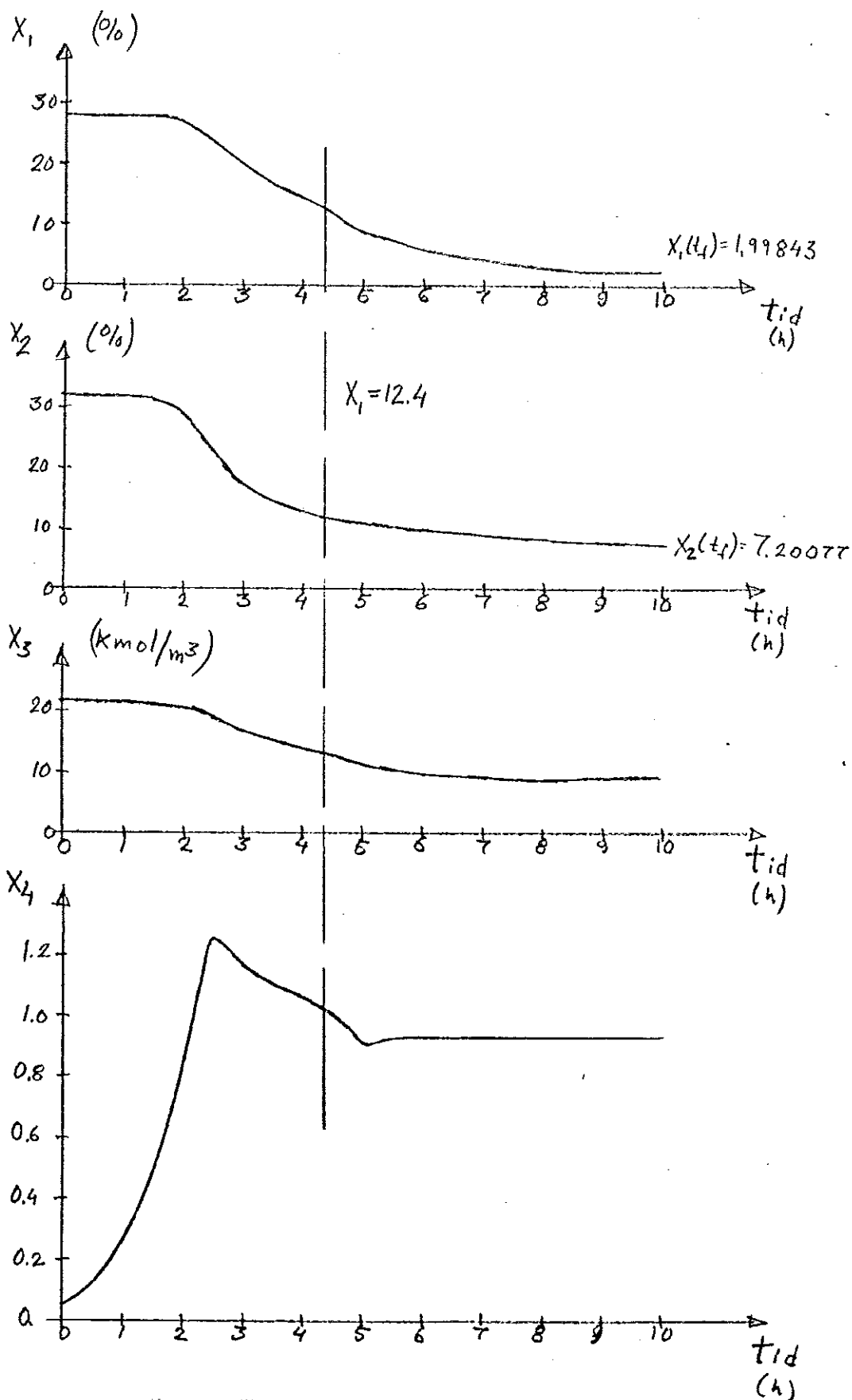


Fig.A3.3. Optimal lösning då $p_{\text{SO}_2} = \text{konst.} = 10 \text{ bar}$: x_1, x_2, x_3, x_4

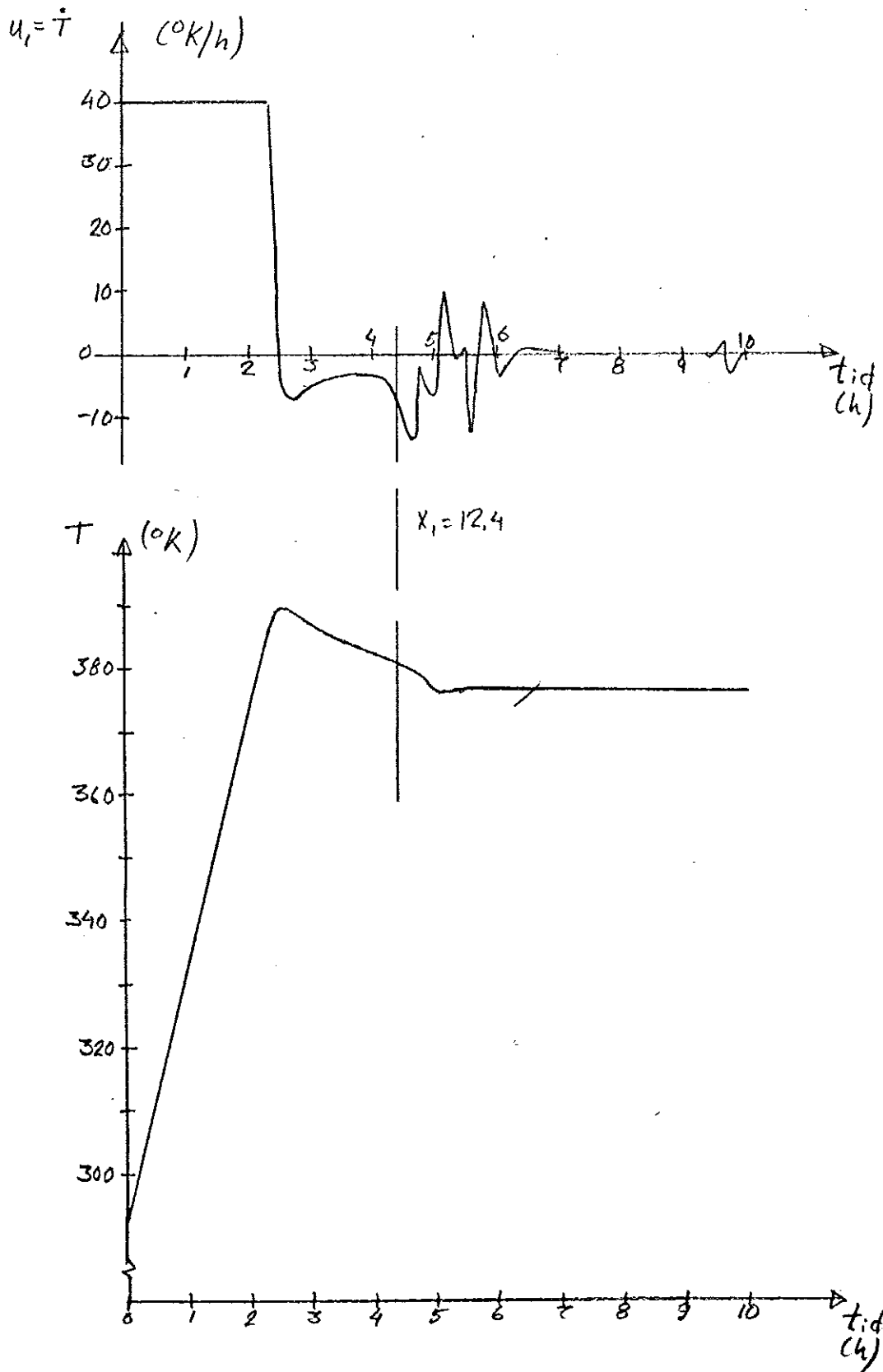


Fig.A3.4. Optimal lösning då $p_{\text{SO}_2} = \text{konst.} = 10 \text{ bar}$: $u_1 = \dot{T}$, T

AAA6.

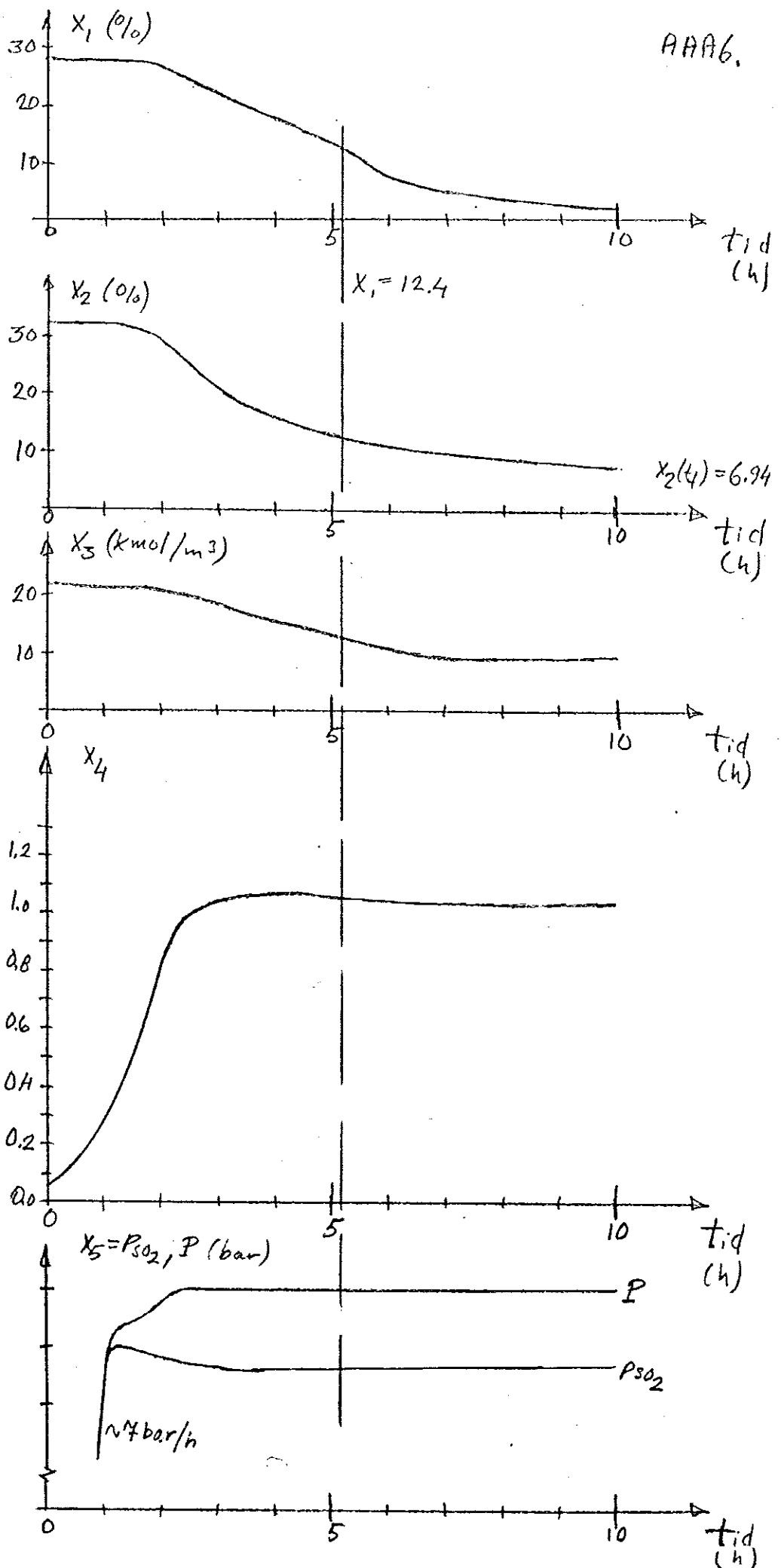


Fig.A3.5. Optimal lösning III i fig.7.3.5. : x_1, x_2, x_3, x_4, x_5 .

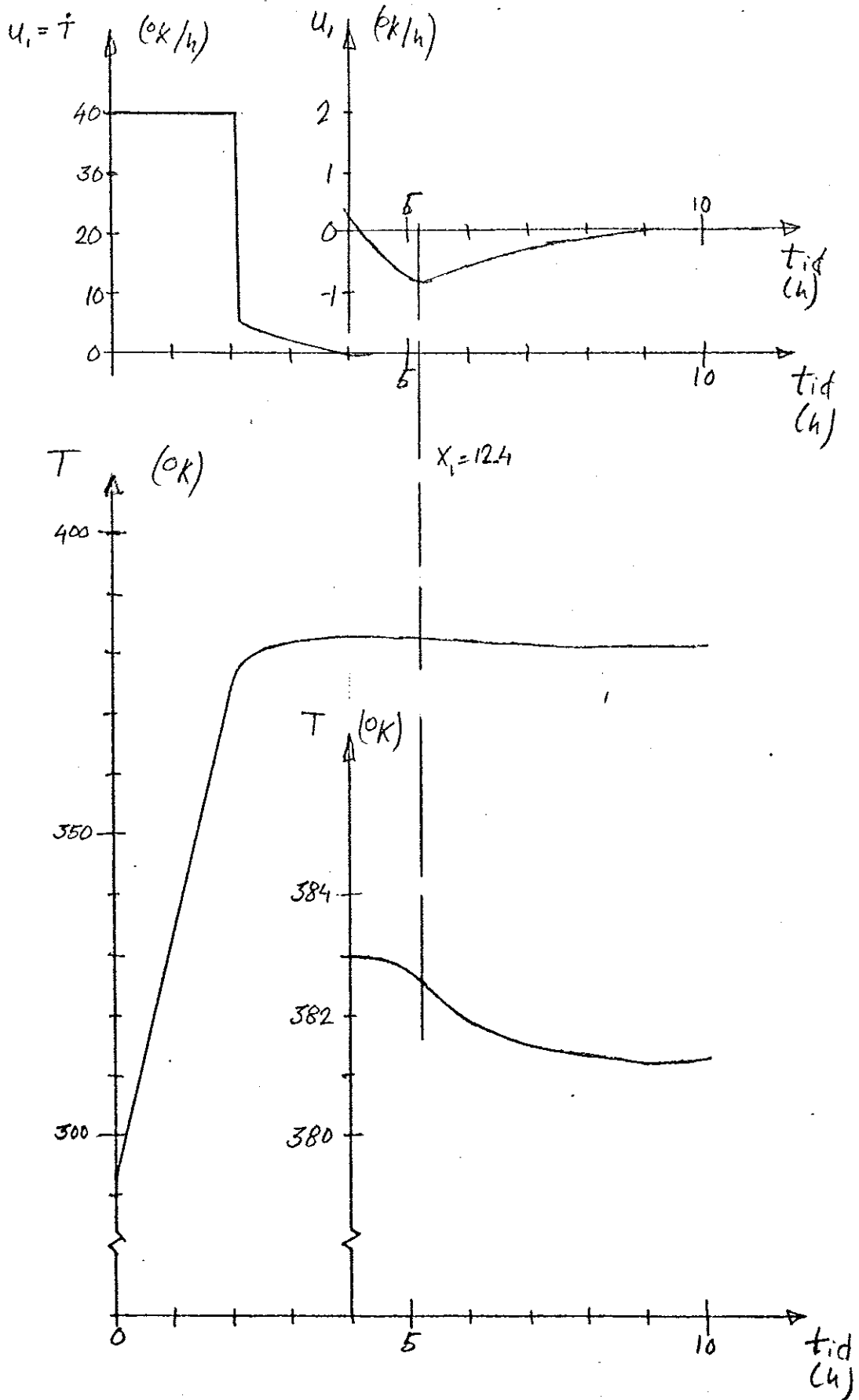
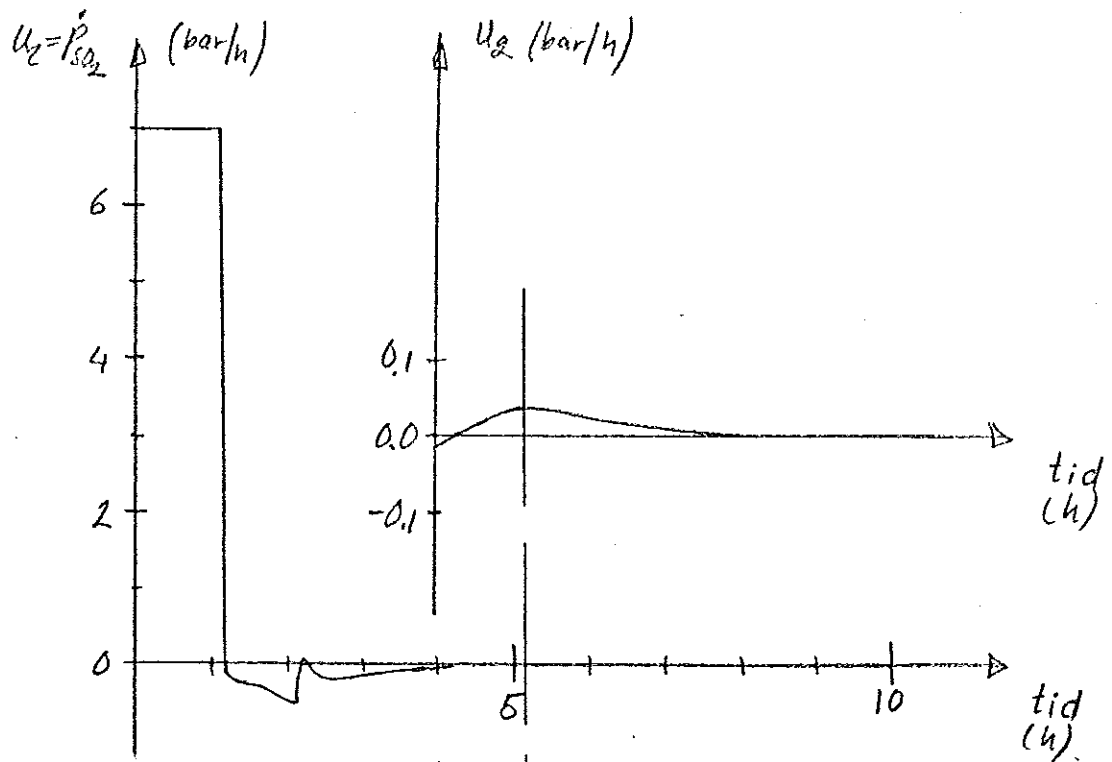


Fig.A3.6. Optimal lösning III i fig.7.3.5. : $u_1 = \dot{T}$, T



$X_1 = 12.4$

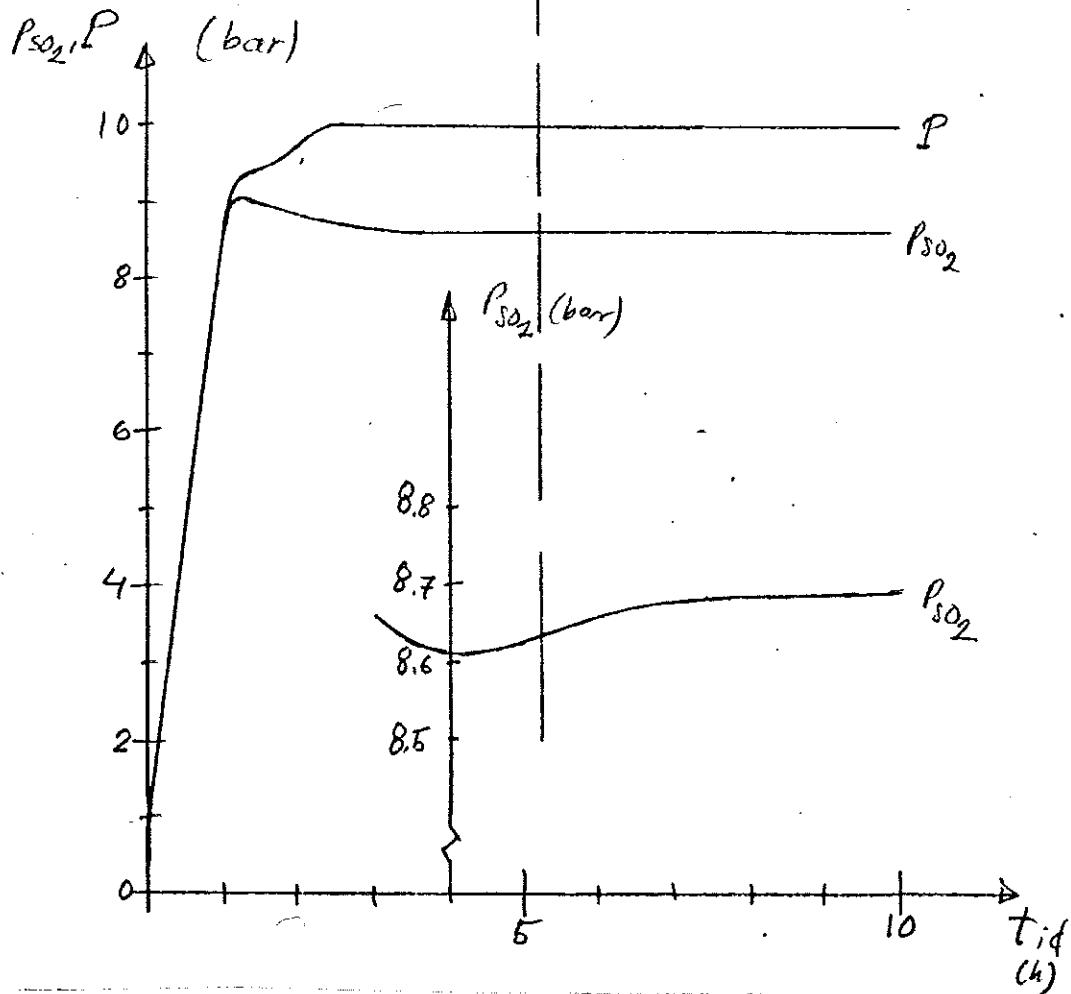


Fig.A3.7. Optimal lösning III i fig.7.3.5. : $u_2 = \dot{P}_{SO_2}, P_{SO_2}, P$

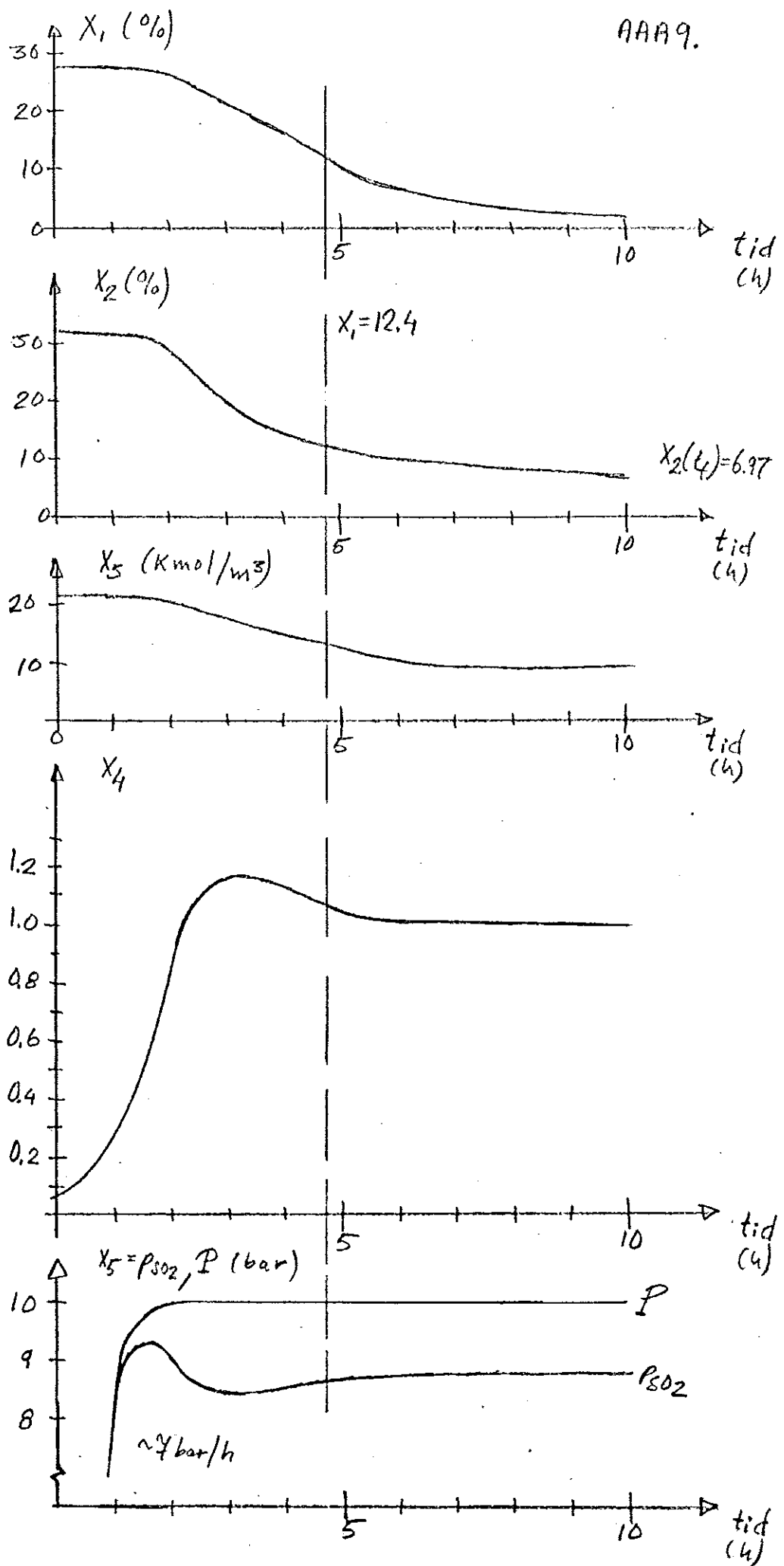


Fig.A3.8. Optimal lösning II i fig.7.3.5. : x_1, x_2, x_3, x_4, x_5 .

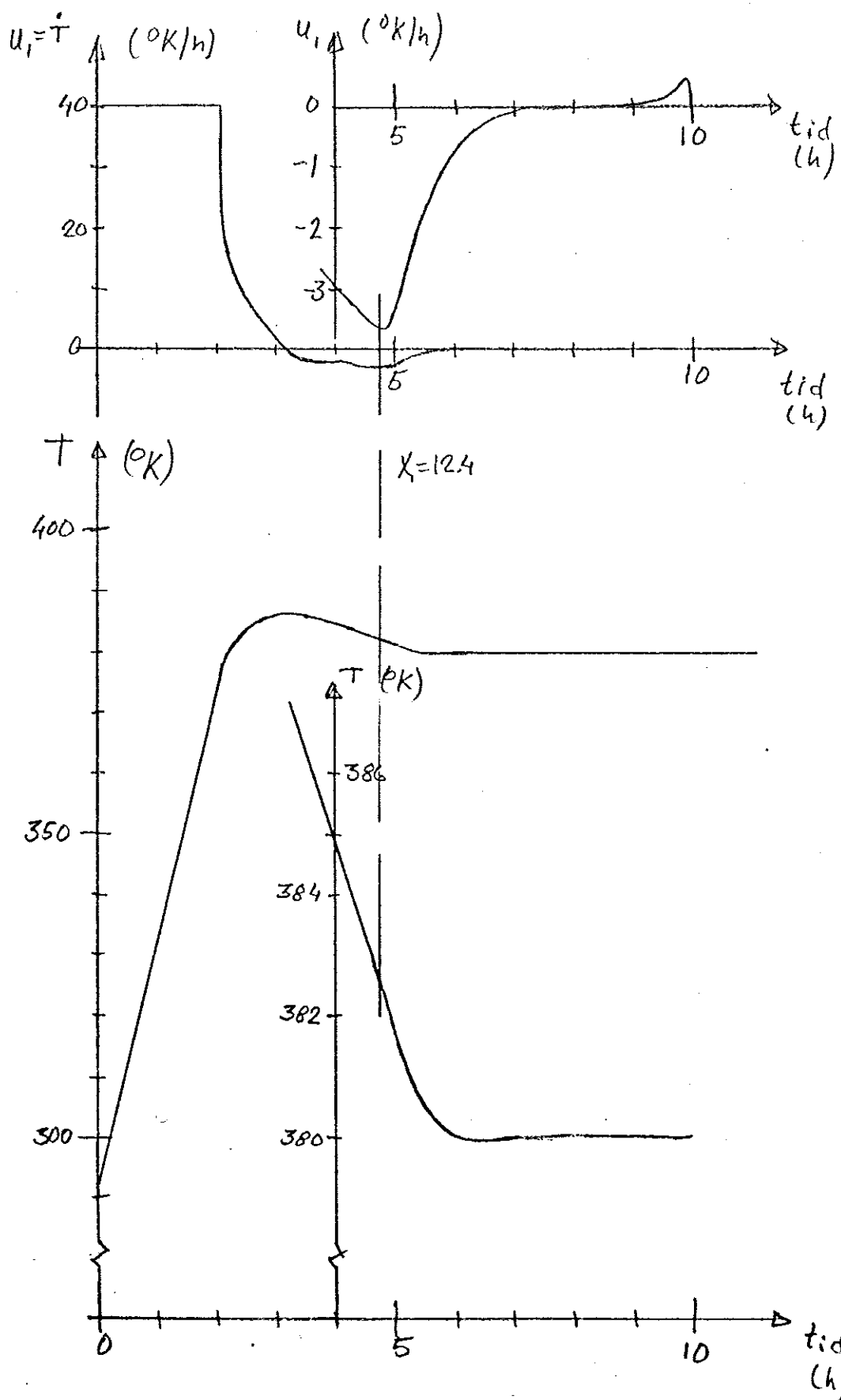


Fig.A3.9. Optimal lösning II i fig.7.3.5. : $u_1 = \dot{T}$, T .

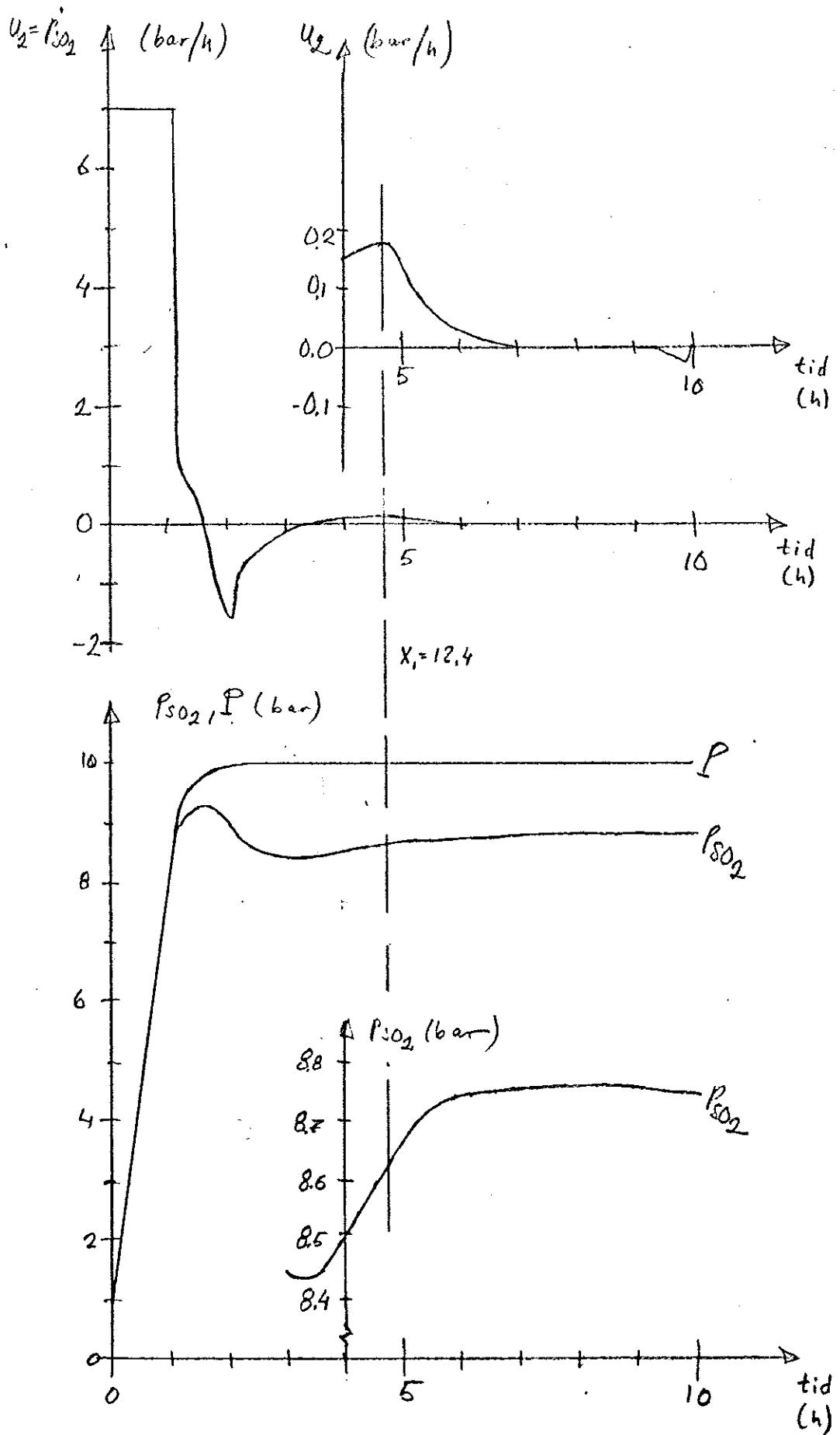


Fig.A3.10. Optimal lösning II i fig.7.3.5. : $u_2 = \dot{p}_{SO_2}$, p_{SO_2} , P .

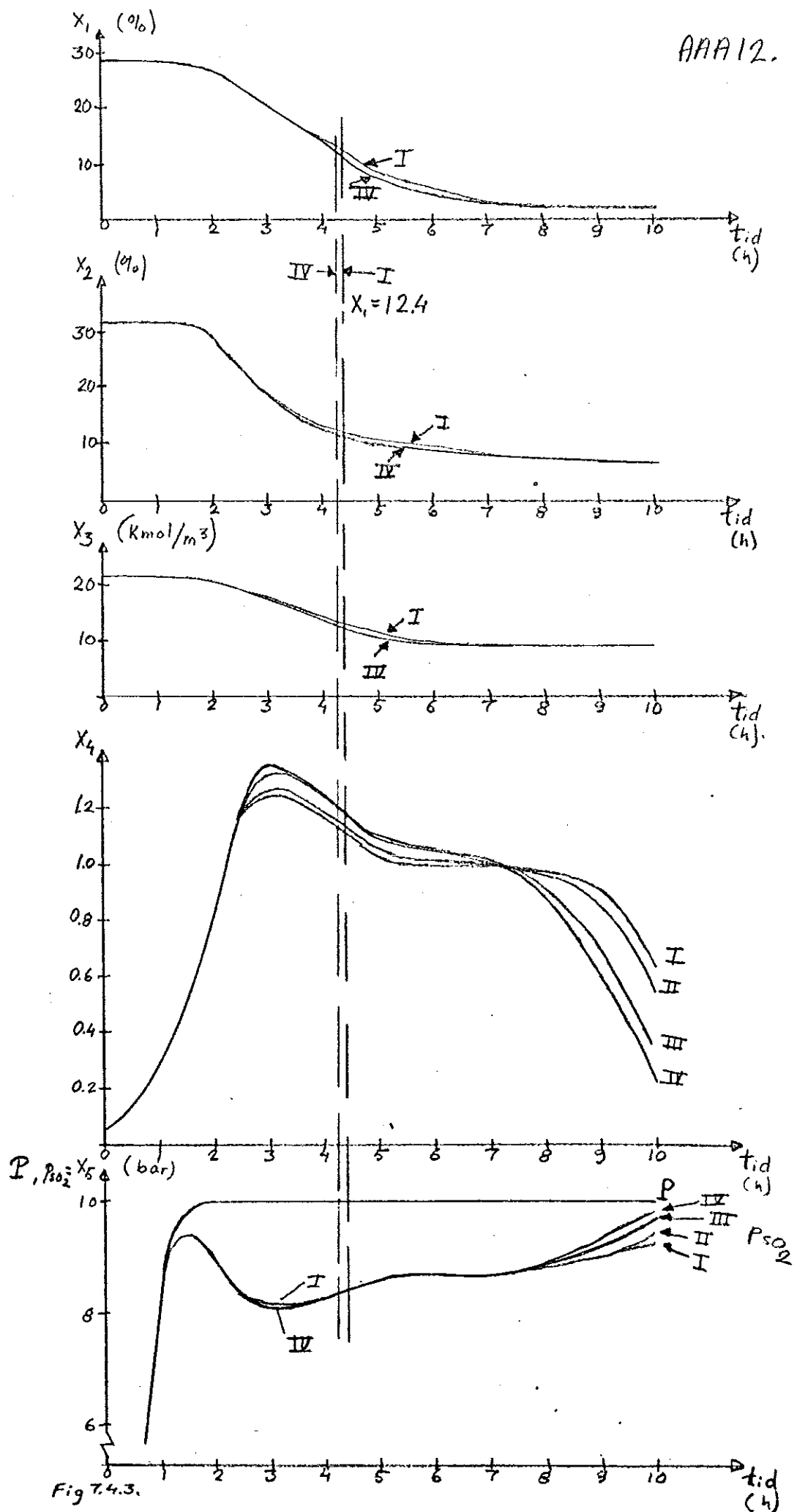


Fig 7.4.3.

Fig.A3.11. x_1, x_2, x_3, x_4, x_5 motsvarande optimala banor i fig.7.4.1.

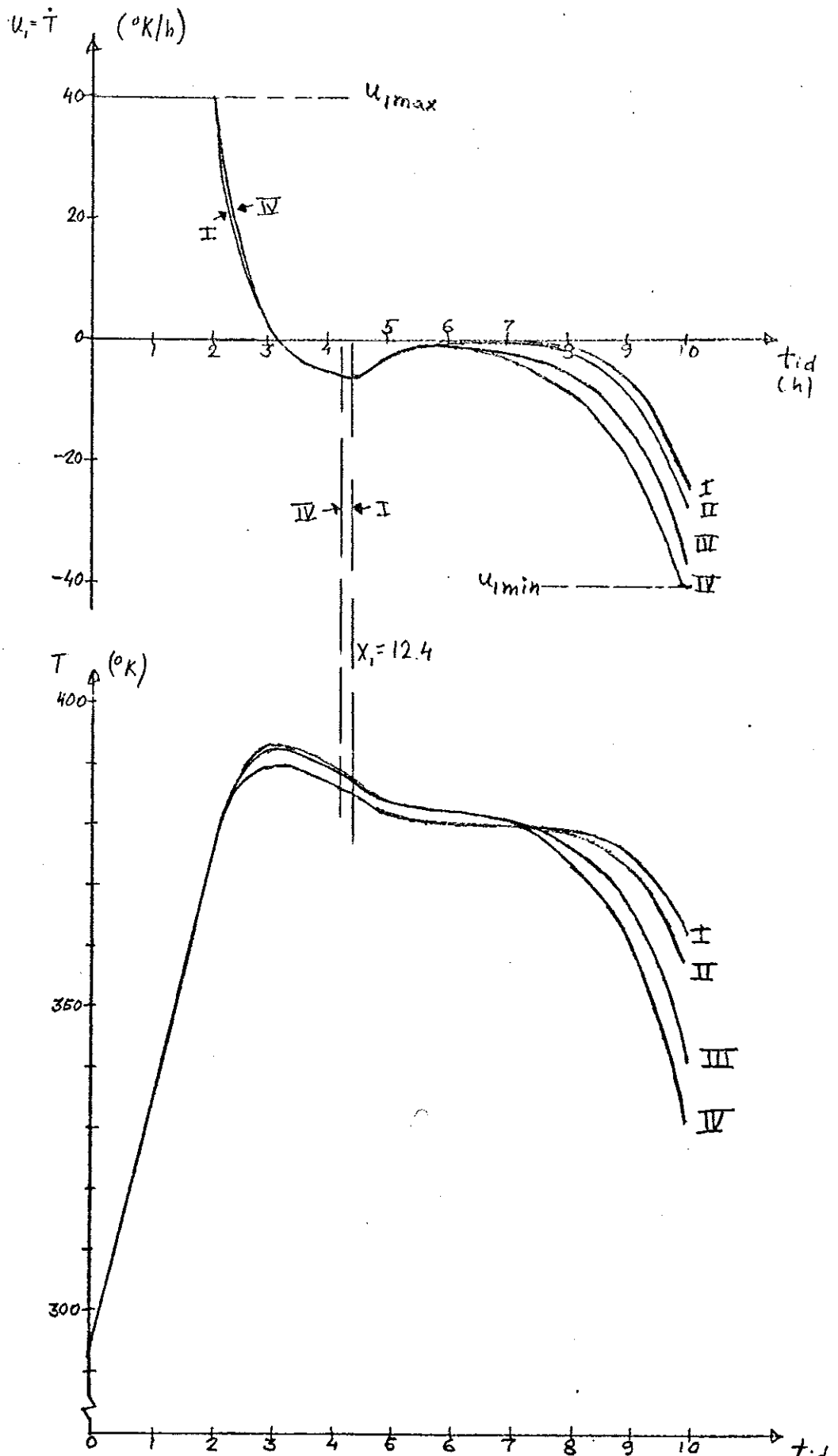


Fig.A3.12. $u_1 = \dot{T}$, T motsvarande optimala banor i fig.7.4.1. (h)

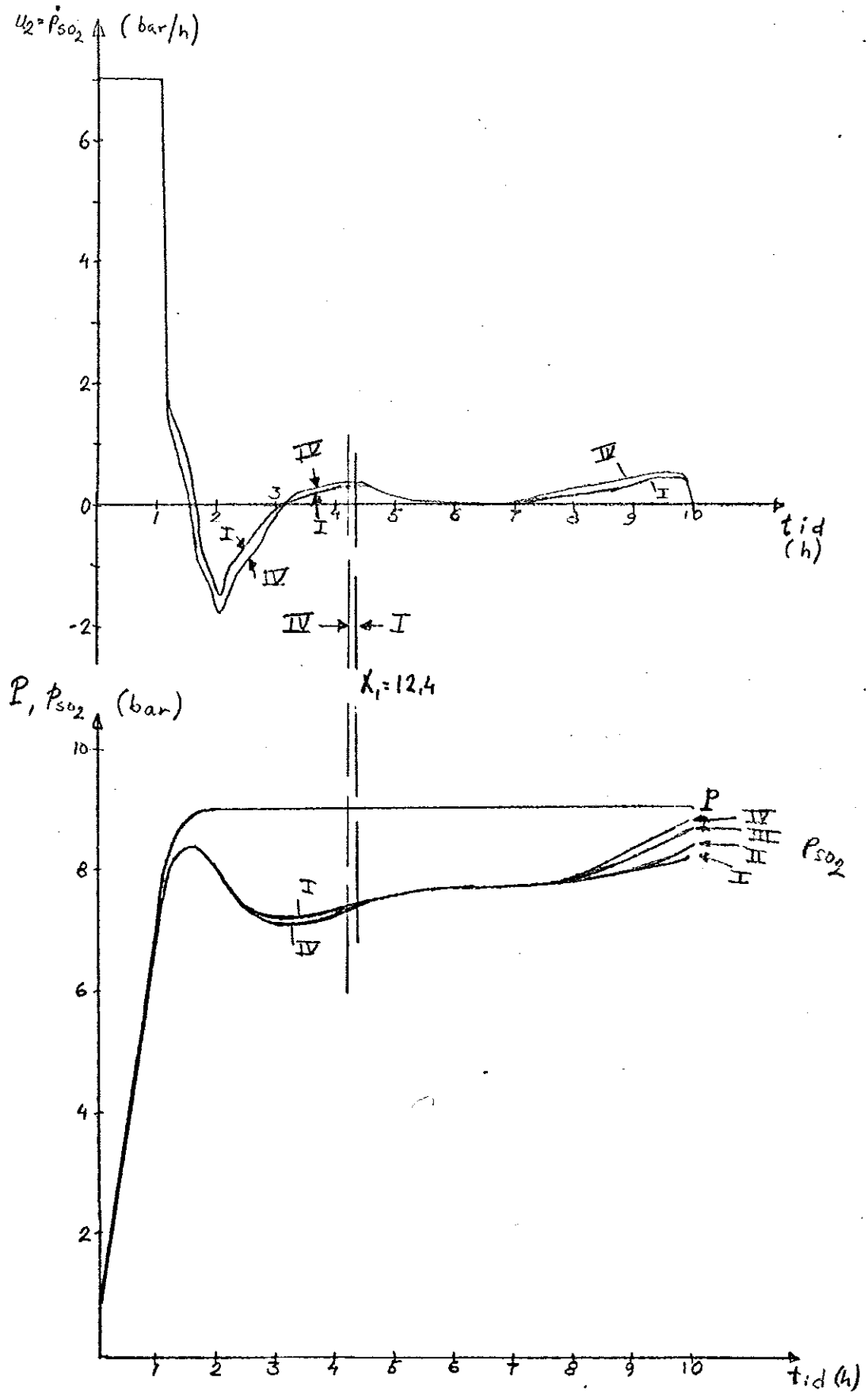


Fig.A3.13. $u_2 = \dot{p}_{SO_2}$, p_{SO_2} , P motsvarande optimala banor i fig.7.4.1.