



WESTFÄLISCHE
WILHELMS-UNIVERSITÄT
MÜNSTER

Optimale Steuerung chemischer Batch-Reaktoren

Praktikum “Nichtlineare Modellierung in den Naturwissenschaften” im WS 2012/13



Inhalt

Einführung

Modellierung

Ergebnisse



Inhalt

Einführung

Modellierung

Ergebnisse

Optimalsteuerungsproblem

$$\min_{x(t)} J = \varphi(x(t_0), x(t_f)) + \int_{t_0}^{t_f} f_0(t, x(t), u(t)) dt$$

Optimalsteuerungsproblem

$$\min_{x(t)} J = \varphi(x(t_0), x(t_f)) + \int_{t_0}^{t_f} f_0(t, x(t), u(t)) dt$$

- ▶ unter den Differentialgleichungsnebenbedingungen

$$\dot{x}(t) = f(t, x(t), u(t)), \quad t_0 \leq t \leq t_f,$$

Optimalsteuerungsproblem

$$\min_{x(t)} J = \varphi(x(t_0), x(t_f)) + \int_{t_0}^{t_f} f_0(t, x(t), u(t)) dt$$

- ▶ unter den Differentialgleichungsnebenbedingungen

$$\dot{x}(t) = f(t, x(t), u(t)), \quad t_0 \leq t \leq t_f,$$

- ▶ den Steuer- und Zustandsbeschränkungen

$$u(t) \in [u_a, u_b] \quad t_0 \leq t \leq t_f,$$

$$x(t) \in [x_a, x_b] \quad t_0 \leq t \leq t_f,$$

Optimalsteuerungsproblem

$$\min_{x(t)} J = \varphi(x(t_0), x(t_f)) + \int_{t_0}^{t_f} f_0(t, x(t), u(t)) dt$$

- ▶ unter den Differentialgleichungsnebenbedingungen

$$\dot{x}(t) = f(t, x(t), u(t)), \quad t_0 \leq t \leq t_f,$$

- ▶ den Steuer- und Zustandsbeschränkungen

$$u(t) \in [u_a, u_b] \quad t_0 \leq t \leq t_f,$$

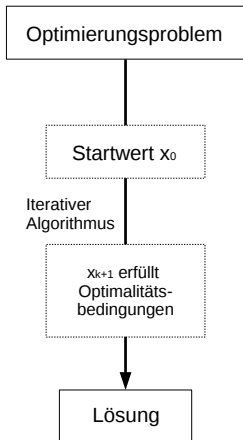
$$x(t) \in [x_a, x_b] \quad t_0 \leq t \leq t_f,$$

- ▶ den Randbedingungen

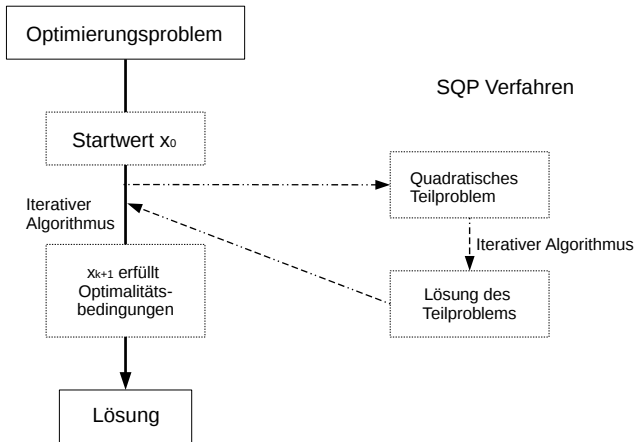
$$x(t_0) = x_0,$$

$$x(t_f) = x_e$$

Direktes Verfahren



Direktes Verfahren





Allgemeines Nichtlineares Problem

Für eine Funktion $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ betrachte folgendes Problem:

$$\min_x f(x)$$

Allgemeines Nichtlineares Problem

Für eine Funktion $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ betrachte folgendes Problem:

$$\min_x f(x)$$

unter den Nebenbedingungen

$$\begin{array}{lll} g(x) \leq 0 & g : & \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m \\ h(x) = 0 & h : & \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^p \end{array}$$

Allgemeines Nichtlineares Problem

Für eine Funktion $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ betrachte folgendes Problem:

$$\min_x f(x)$$

unter den Nebenbedingungen

$$g(x) \leq 0 \quad g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$$

$$h(x) = 0 \quad h : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^p$$

Definiere die Lagrange Funktion $\mathcal{L} : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^p \rightarrow \mathbb{R}$ als

$$\mathcal{L}(x, \lambda, \mu) = f(x) + \lambda^T g(x) + \mu^T h(x)$$



Optimalitätsbedingungen

Karush-Kuhn-Tucker Bedingungen: Sei $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$ eine lokale Lösung des obigen Problems. Dann gibt es $\bar{\lambda} \in \mathbb{R}^m, \bar{\mu} \in \mathbb{R}^p$, so dass

Optimalitätsbedingungen

Karush-Kuhn-Tucker Bedingungen: Sei $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$ eine lokale Lösung des obigen Problems. Dann gibt es $\bar{\lambda} \in \mathbb{R}^m$, $\bar{\mu} \in \mathbb{R}^p$, so dass

1. Multiplikatorenregel:

$$\nabla_x \mathcal{L}(\bar{x}, \bar{\lambda}, \bar{\mu}) = f(x) + \bar{\lambda}^T g(\bar{x}) + \bar{\mu}^T h(\bar{x}) = 0$$

Optimalitätsbedingungen

Karush-Kuhn-Tucker Bedingungen: Sei $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$ eine lokale Lösung des obigen Problems. Dann gibt es $\bar{\lambda} \in \mathbb{R}^m$, $\bar{\mu} \in \mathbb{R}^p$, so dass

1. Multiplikatorenregel:

$$\nabla_x \mathcal{L}(\bar{x}, \bar{\lambda}, \bar{\mu}) = f(x) + \bar{\lambda}^T g(\bar{x}) + \bar{\mu}^T h(\bar{x}) = 0$$

2. Gleichungsnebenbedingungen: $h(\bar{x}) = 0$

Optimalitätsbedingungen

Karush-Kuhn-Tucker Bedingungen: Sei $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$ eine lokale Lösung des obigen Problems. Dann gibt es $\bar{\lambda} \in \mathbb{R}^m$, $\bar{\mu} \in \mathbb{R}^p$, so dass

1. Multiplikatorenregel:

$$\nabla_x \mathcal{L}(\bar{x}, \bar{\lambda}, \bar{\mu}) = f(x) + \bar{\lambda}^T g(\bar{x}) + \bar{\mu}^T h(\bar{x}) = 0$$

2. Gleichungsnebenbedingungen: $h(\bar{x}) = 0$
3. Komplementaritätsbedingungen:

$$\bar{\lambda} \geq 0, g(\bar{x}) \leq 0, \bar{\lambda}^T g(\bar{x}) = 0$$

Optimalitätsbedingungen

Karush-Kuhn-Tucker Bedingungen: Sei $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$ eine lokale Lösung des obigen Problems. Dann gibt es $\bar{\lambda} \in \mathbb{R}^m$, $\bar{\mu} \in \mathbb{R}^p$, so dass

1. Multiplikatorenregel:

$$\nabla_x \mathcal{L}(\bar{x}, \bar{\lambda}, \bar{\mu}) = f(x) + \bar{\lambda}^T g(\bar{x}) + \bar{\mu}^T h(\bar{x}) = 0$$

2. Gleichungsnebenbedingungen: $h(\bar{x}) = 0$
3. Komplementaritätsbedingungen:

$$\bar{\lambda} \geq 0, g(\bar{x}) \leq 0, \bar{\lambda}^T g(\bar{x}) = 0$$

4. Für alle $d \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$ gilt $d^T \nabla_x^2 \mathcal{L}(\bar{x}, \bar{\lambda}, \bar{\mu}) d > 0$



Optimalitätsbedingungen

Wir suchen also $\bar{x} \in \mathbb{R}$, so dass



Optimalitätsbedingungen

Wir suchen also $\bar{x} \in \mathbb{R}$, so dass

$$\nabla_x \mathcal{L}(x, \bar{\lambda}, \bar{\mu}) = 0$$

$$h(\bar{x}) = 0$$

$$\lambda^\top g(\bar{x}) = 0$$

Optimalitätsbedingungen

Wir suchen also $\bar{x} \in \mathbb{R}$, so dass

$$\nabla_x \mathcal{L}(x, \bar{\lambda}, \bar{\mu}) = 0$$

$$h(\bar{x}) = 0$$

$$\lambda^\top g(\bar{x}) = 0$$

- ▶ Nichtlineares Gleichungssystem
- ▶ Newton Verfahren

SQP-Verfahren

Sequential Quadratic Programming: Löse in jedem Iterationsschritt das Teilproblem

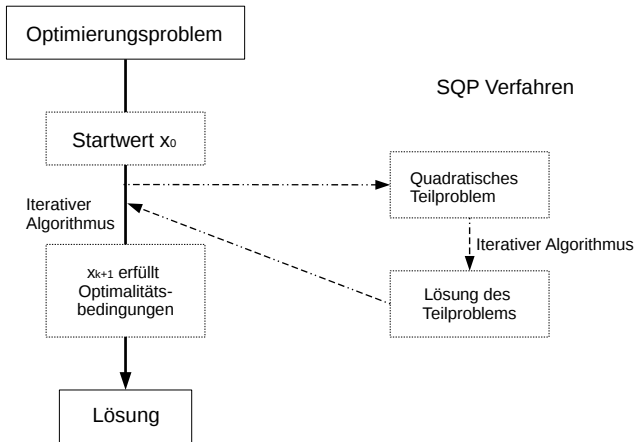
$$\min_d d^T \nabla_x^2 \mathcal{L}(x_k, \lambda_k, \lambda_k) d + \nabla f(x_k)^T d$$

unter den Nebenbedingungen

$$\nabla g(x_k)^T d \leq -g(x_k)$$

$$\nabla h(x_k)^T d = -h(x_k)$$

Direktes Verfahren





Inhalt

Einführung

Modellierung

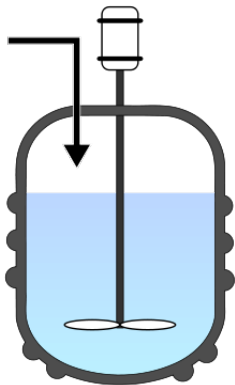
Ergebnisse



Betrieb eines Batchreaktors

Betrieb eines Batchreaktors

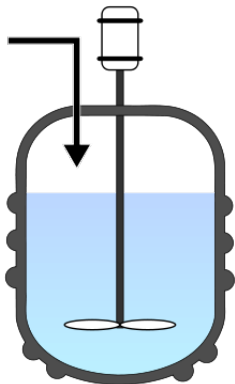
- ▶ Einsatzstoff zuführen
- ▶ Katalysator zudosieren
- ▶ Temperatur regulieren
- ▶ Reaktion findet statt
- ▶ Reaktor abfahren



Betrieb eines Batchreaktors

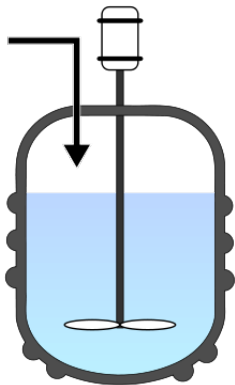
- ▶ Einsatzstoff zuführen
- ▶ Katalysator zudosieren
- ▶ Temperatur regulieren
- ▶ Reaktion findet statt
- ▶ Reaktor abfahren

⇒ **Diskontinuierlicher Betrieb**



Betrieb eines Batchreaktors

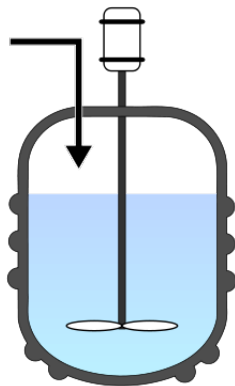
Ideale Durchmischung



Betrieb eines Batchreaktors

Ideale Durchmischung

⇒ räumlich gradientenfreier Zustand



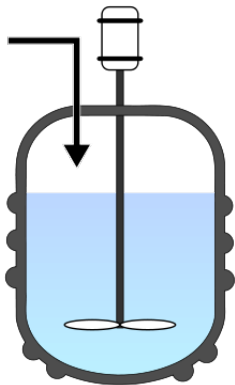
Betrieb eines Batchreaktors

Ideale Durchmischung

⇒ räumlich gradientenfreier Zustand

$$\frac{\partial c}{\partial x} = 0$$

$$\frac{\partial T}{\partial x} = 0$$





Chemische Reaktion



Chemische Reaktion



Zeitabhängigkeit der Reaktionsgeschwindigkeit

Abhängigkeit der Reaktionsgeschwindigkeit von der Konzentration des Reaktanden A:

$$v(A) = -\frac{dc(A)}{dt} = k \cdot c(A)^n$$

Chemische Reaktion



Zeitabhängigkeit der Reaktionsgeschwindigkeit

Abhängigkeit der Reaktionsgeschwindigkeit von der Konzentration des Reaktanden A:

$$v(A) = -\frac{dc(A)}{dt} = k \cdot c(A)^n$$

Dies ist eine Differentialgleichung für die Konzentration!



Chemische Reaktion



Chemische Reaktion



Konkret ergibt sich das folgende System:

$$\dot{C}_A = -k_1 C_A^2$$

$$\dot{C}_B = k_1 C_A^2 - k_2 C_B$$

$$\dot{C}_C = k_2 C_B$$

$$C_A(0) = 1 \frac{\text{mol}}{\text{l}}, \quad C_B(0) = 0 \frac{\text{mol}}{\text{l}}, \quad C_C(0) = 0 \frac{\text{mol}}{\text{l}}$$

Chemische Reaktion

$$\dot{C}_A = -k_1(T) C_A^2$$

$$\dot{C}_B = k_1(T) C_A^2 - k_2(T) C_B$$

$$\dot{C}_C = k_2(T) C_B$$

Die Geschwindigkeitskonstanten k_i ändern sich mit der Temperatur gemäß der Arrhenius-Gleichung:

$$k_i(T) = k_{i,0} \exp\left(-\frac{E_i}{RT}\right)$$

Problemformulierung

Ziel der Optimierung:

$$\max_{T(t)} C_B(t_f)$$

Modellgleichungen:

$$\dot{C}_A = -k_1(T) C_A^2$$

$$\dot{C}_B = k_1(T) C_A^2 - k_2(T) C_B$$

$$\dot{C}_C = k_2(T) C_B$$

$$k_i(T) = k_{i,0} \exp\left(-\frac{E_i}{RT}\right)$$

Prozessbeschränkungen:

$$T_{min} \leq T \leq T_{max}, \left| \frac{dT}{dt} \right| \leq 1 \frac{\text{K}}{\text{min}}$$

Anfangsbedingung:

$$C_A(0) = 1 \frac{\text{mol}}{\text{l}}, C_B(0) = C_C(0) = 0 \frac{\text{mol}}{\text{l}}$$

Zeitbereich:

$$0 \leq t \leq t_f$$



Inhalt

Einführung

Modellierung

Ergebnisse

Parameter und Zielfunktional

Konstanten:

$$k_{10} = 2,2 \cdot 10^9 / \text{min}$$

$$k_{20} = 1,2 \cdot 10^9 / \text{min}$$

$$E_1/R = 8750 \text{ K}$$

$$E_2/R = 9750 \text{ K}$$

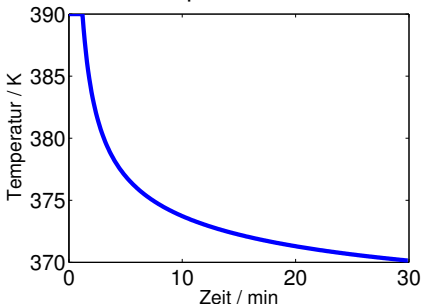
Zielfunktional ohne Berücksichtigung der Heizkosten:

$$J(T(t)) = -C_B(t_f)$$

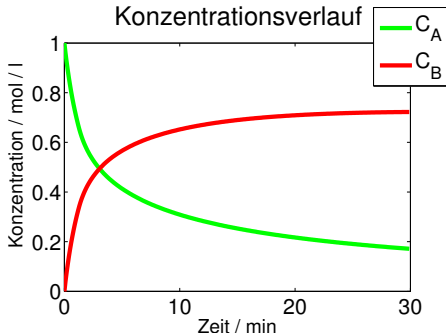
Heizen über Raumtemperatur verursacht Kosten:

$$J(T(t)) = -C_B(t_f) + \lambda \int_0^{t_f} T(t) - 300 \text{ K} dt$$

Temperaturverlauf

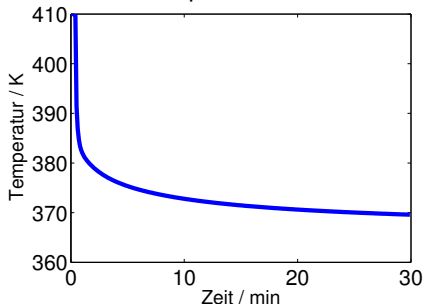


Konzentrationsverlauf

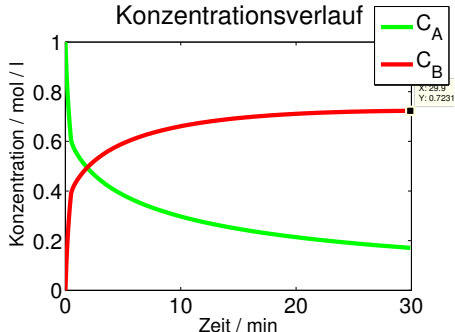


- ▶ Endkonzentration: 0,7223 mol/l
- ▶ Integrationszeit 30 min
- ▶ $200 \text{ K} \leq T(t) \leq 390 \text{ K}$

Temperaturverlauf

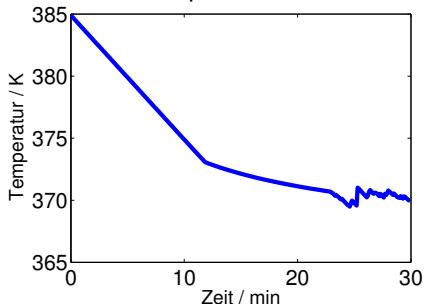


Konzentrationsverlauf

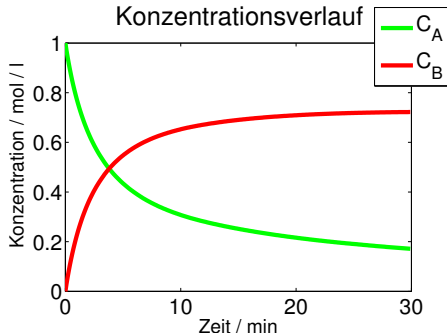


- ▶ Endkonzentration: 0,7231 mol/l
- ▶ $200 \text{ K} \leq T(t) \leq 410 \text{ K}$

Temperaturverlauf

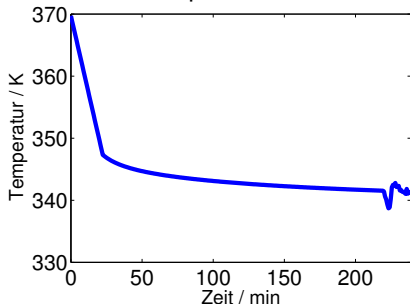


Konzentrationsverlauf

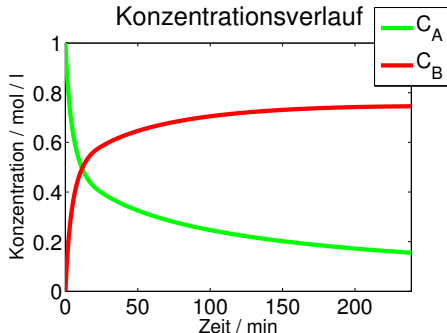


- ▶ Beschränkte Temperaturänderung
- ▶ Temperaturgrenzen werden nicht mehr erreicht
- ▶ Endkonzentration: 0.7221 mol/l

Temperaturverlauf

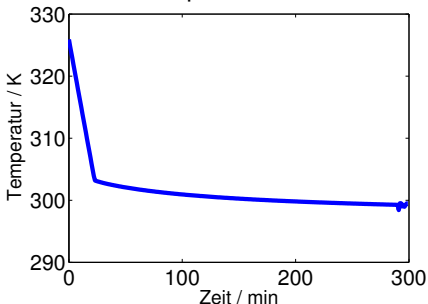


Konzentrationsverlauf

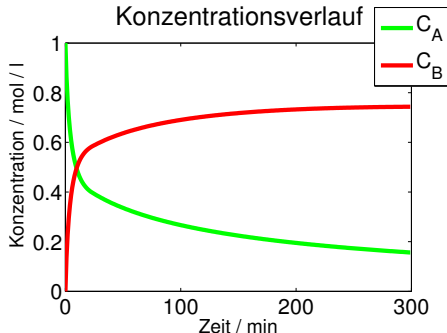


- ▶ Endkonzentration: 0,7454 mol/l
- ▶ Niedrigere Temperatur

Temperaturverlauf

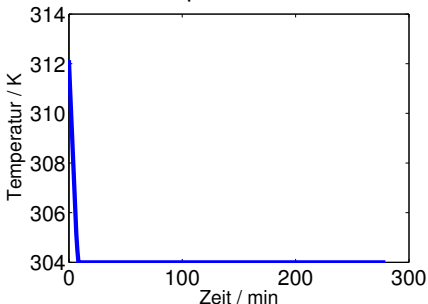


Konzentrationsverlauf

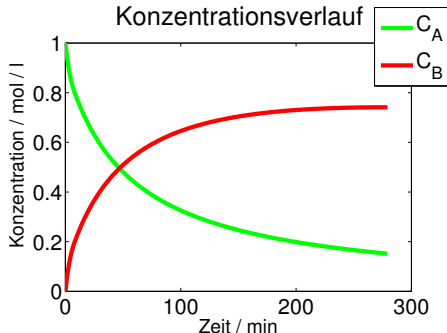


- ▶ Variable Reaktionszeit bis 300 min wird ausgeschöpft
- ▶ Endkonzentration 0,7434 mol/l
- ▶ Noch niedrigere Temperatur

Temperaturverlauf

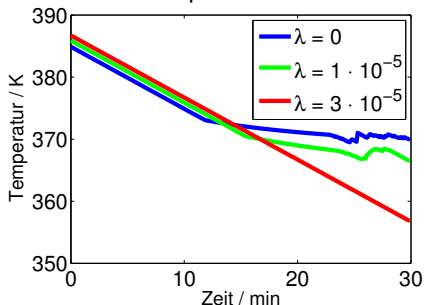


Konzentrationsverlauf

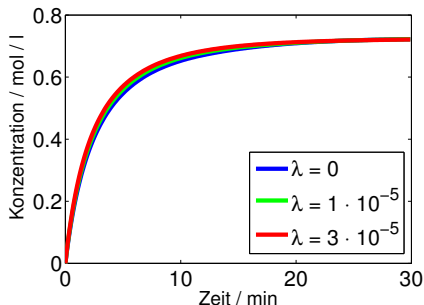


- ▶ Temperatur nach unten begrenzt.
- ▶ Optimale Reaktionszeit 279 min
- ▶ Endkonzentration 0,7434 mol/l

Temperaturverlauf



Konzentrationsverlauf



- unterschiedliche Gewichtung des Heizaufwandes

λ	0	10^{-5}	$3 \cdot 10^{-5}$
$C_B/\text{mol/l}$	0,7221	0,7220	0,7212



Zusammenfassung

- ▶ Optimierung des Betriebs eines Batchreaktors



Zusammenfassung

- ▶ Optimierung des Betriebs eines Batchreaktors
 - ▶ Reaktionskinetik \Rightarrow DGL's

Zusammenfassung

- ▶ Optimierung des Betriebs eines Batchreaktors
 - ▶ Reaktionskinetik \Rightarrow DGL's
 - \Rightarrow Problemformulierung

Zusammenfassung

- ▶ Optimierung des Betriebs eines Batchreaktors
 - ▶ Reaktionskinetik \Rightarrow DGL's
 - \Rightarrow Problemformulierung
- ▶ Direkter Zugang (Diskretisierung)

Zusammenfassung

- ▶ Optimierung des Betriebs eines Batchreaktors
 - ▶ Reaktionskinetik \Rightarrow DGL's
 - \Rightarrow Problemformulierung
- ▶ Direkter Zugang (Diskretisierung)
 - ▶ Komplementaritätsproblem (Fixpunktproblem)

Zusammenfassung

- ▶ Optimierung des Betriebs eines Batchreaktors
 - ▶ Reaktionskinetik \Rightarrow DGL's
 - \Rightarrow Problemformulierung
- ▶ Direkter Zugang (Diskretisierung)
 - ▶ Komplementaritätsproblem (Fixpunktproblem)
 - \Rightarrow SQP Algorithmus

Zusammenfassung

- ▶ Optimierung des Betriebs eines Batchreaktors
 - ▶ Reaktionskinetik \Rightarrow DGL's
 - \Rightarrow Problemformulierung
- ▶ Direkter Zugang (Diskretisierung)
 - ▶ Komplementaritätsproblem (Fixpunktproblem)
 - \Rightarrow SQP Algorithmus
- ▶ Numerische Optimierung unter Beachtung Realistischer Nebenbedingungen

Zusammenfassung

- ▶ Optimierung des Betriebs eines Batchreaktors
 - ▶ Reaktionskinetik \Rightarrow DGL's
 - \Rightarrow Problemformulierung
- ▶ Direkter Zugang (Diskretisierung)
 - ▶ Komplementaritätsproblem (Fixpunktproblem)
 - \Rightarrow SQP Algorithmus
- ▶ Numerische Optimierung unter Beachtung Realistischer Nebenbedingungen
 - ▶ Maximale Temperatursteigerung pro Zeiteinheit

Zusammenfassung

- ▶ Optimierung des Betriebs eines Batchreaktors
 - ▶ Reaktionskinetik \Rightarrow DGL's
 - \Rightarrow Problemformulierung
- ▶ Direkter Zugang (Diskretisierung)
 - ▶ Komplementaritätsproblem (Fixpunktproblem)
 - \Rightarrow SQP Algorithmus
- ▶ Numerische Optimierung unter Beachtung Realistischer Nebenbedingungen
 - ▶ Maximale Temperatursteigerung pro Zeiteinheit
 - ▶ Kosten des Heizaufwands

Zusammenfassung

- ▶ Optimierung des Betriebs eines Batchreaktors
 - ▶ Reaktionskinetik \Rightarrow DGL's
 - \Rightarrow Problemformulierung
- ▶ Direkter Zugang (Diskretisierung)
 - ▶ Komplementaritätsproblem (Fixpunktproblem)
 - \Rightarrow SQP Algorithmus
- ▶ Numerische Optimierung unter Beachtung Realistischer Nebenbedingungen
 - ▶ Maximale Temperatursteigerung pro Zeiteinheit
 - ▶ Kosten des Heizaufwands
 - ▶ Optimierung der Reaktionsdauer



Vielen Dank für die
Aufmerksamkeit!