

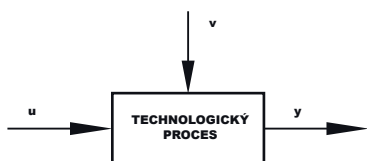
VLIV PŘESNOSTI DAT NA URČENÍ OPTIMÁLNÍCH PODMÍNEK PRŮBĚHU VRATNÉ REAKCE

JAVŮREK M., TAUFER I.

Univerzita Pardubice, Fakulta elektrotechniky a informatiky, Katedra řízení procesů, milan.javurek@upce.cz, ivan.taufer@upce.cz

Základním požadavkem na vedení každého technologického procesu je podmínka jeho efektivního provozu, což spočívá v zajištění minimálních nebo maximálních hodnot vybraných parametrů y , např. minimum provozních nákladů, maximum zisku, maximum výtěžnosti apod. Takový režim, který vykazuje extrémní hodnoty těchto parametrů, označujeme jako režim optimální a řídicí parametry u , který tento režim zajišťují, parametry optimální. Při tom však je třeba vzít v úvahu, že technologický proces je proces dynamický, kdy se po změně řídicího parametru příslušná veličina ustálí až po uplynutí určité doby. Dále mohou na proces působit vnější vlivy, resp. chyby měření, souhrnně označované jako poruchy v , které nastavení nebo vyhodnocení optimálního režimu zkreslují. Blokové schéma takového procesu je uvedeno na obr. 1.

Obr. 1 – Schéma technologického procesu



Optimalizace

Pod pojmem optimalizace resp. optimální řízení technologického procesu budeme chápat cílevědomou činnost člověka (obsluhy, technologa), která v daných provozních podmínkách (omezujících parametrech) zajišťuje co nejlepší výsledky provozu tohoto procesu [1].

Úloha optimalizace pak spočívá v tom, abychom při daných technologických parametrech (např. výkon zařízení, kvalita suroviny a pomocných materiálů aj.), poruchách v (změna okolního prostředí, změna kvality suroviny, chybách měření apod.) našli takové hodnoty řídicích veličin u (množství suroviny, teplota, tlak atd.), při nichž výstupní řízené veličiny y (kvalitativní ukazatele výrobku, výkonnost zařízení, spotřeba energie apod.) splňují požadovaná hlediska optimálnosti. Pro možnost posouzení tohoto hlediska je proto nutné definovat jednoznačné kritérium, kritérium optimalizace, které toto optimum kvantifikuje. Charakteristika příslušného optima spočívá ve volbě optimalizované veličiny – pokud je kritériem ekonomická rentabilita, hledáme minimum, pokud volíme koncentraci výsledného produktu, hledáme maximum.

Vzhledem k tomu, že v reálném technologickém procesu nemáme k dispozici matematický popis, který by charakterizoval vztah mezi kritériem optimalizace a jeho řídicími veličinami, je třeba k nastavení a vyhodnocení optimálního režimu přistoupit experimentálně. K tomu slouží celá řada metod a algoritmů.

Algoritmy experimentální optimalizace

Tyto algoritmy spadají do oblasti tzv. nelineárního programování [1,2]. Jde o numerické metody iteračního charakteru, kdy se nové hodnoty nezávisle proměnných u_k v daném iteračním kroku k počítají z hodnot kroku předcházejícího připočtením nějakého přírůstku Δu_k . Takže platí:

$$u_k = u_{k-1} + \Delta u_k \quad (1)$$

Je zřejmé, že pokud se hledá minimum dané funkce $y(u)$, potom úspěšný krok bude charakterizován nerovností

$$y(u_k) < y(u_{k-1}) \quad (2)$$

V opačném případě je přechod do stavu u_k nežádoucí a pro výpočet další hodnoty u_k je třeba určit novou hodnotu Δu_k a výpočet opakovat. A právě výpočet této hodnoty Δu_k charakterizuje příslušnou metodu řešení. Výpočet se ukončí, jestliže chyba řešení, vyjádřená jako norma rozdílu dvou po sobě jdoucích vektorů řídicích proměnných u_k a u_{k-1} , klesne pod určenou hodnotu. Pak platí:

$$\|u_k - u_{k-1}\| < \varepsilon \quad (3)$$

Technologický proces

Průběh optimalizace technologického procesu bude demonstrován na modelu průtočného, dokonale míchaného chemického reaktoru, ve kterém probíhá vratná chemická reakce $A \leftrightarrow B$ [9]. Tuto reakci lze popsat matematickým vztahem:

$$x_A = \frac{1 + \tau k_2}{1 + \tau k_1 + \tau k_2} x_{A0} \quad (4)$$

kde k_1 a k_2 jsou reakční rychlosti podle Arrheniova vztahu:

$$k = Ae^{-\frac{E}{RT}} \quad (5)$$

τ je doba zadržky reakční směsi v reaktoru

$$\tau = \frac{V}{Q} \quad (6)$$

x_{A0} – vstupní koncentrace látky A

A – frekvenční faktor

E – aktivační energie

R – plynová konstanta

T – reakční teplota

V – objem reaktoru

Q – průtok směsi reaktorem

Sledovanou veličinou je ekonomický ukazatel – náklady na výrobu jednotkového množství látky B:

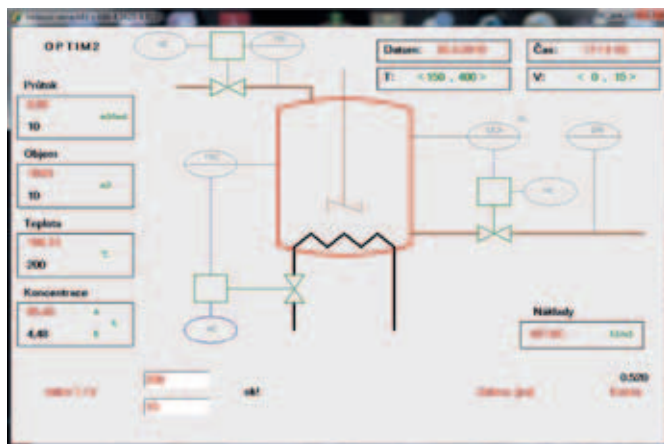
$$F = Q(x_A S_A + \tau S_R) \quad (7)$$

kde S_A je jednotková cena výchozí látky A,

S_R jsou náklady na jednotkový objem reaktoru.

Technologické schéma tohoto průtočného, dokonale míchaného chemického reaktoru je uvedeno na obr. 2. Do reaktoru vstupuje reakční směs o průtoku Q a dané koncentraci x_{A0} . V reaktoru je regulován objem V reakční směsi pomocí proměnlivé doby zadržky. Požadovaná teplota T reakční směsi v reaktoru se reguluje prů-

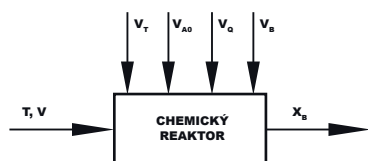
Obr. 2 – Technologické schéma reaktoru



tokem chladicího média v chladicím potrubí. Cílem optimálního řízení je zajistit změnou teploty a objemu reakční směsi minimální cenu výsledného produktu B. V rovnici (4) se vyčísluje výsledná koncentrace vstupní látky A, která by měla být co nejmenší, koncentrace produktu B je pak dána rozdílem do 100 %. Úkolem je tedy stanovit podmínky, kdy je rovnováha maximálně posunuta ve prospěch produktu B.

Výše uvedená rovnice (7) představuje dvouparametrickou nelineární závislost výrobní ceny komponenty B na teplotě T a objemu V reakční směsi v reaktoru. Pro přiblížení se k realitě jsou všechny parametry rovnice (7) (vstupní koncentrace složky A, průtok reakční směsi reaktorem, teplota reakční směsi a výstupní koncentrace složky A) zatíženy náhodnou chybou s normálním rozložením, čímž jsou vyjádřeny nestabilní hodnoty (poruchy) těchto parametrů a nejistoty jejich měření. Dále je simulována i dynamika procesu zavedením přenosu 1. řádu. Blokové schéma tohoto procesu je uvedeno na obr. 3.

Obr. 3 – Schéma chemického reaktoru



Pro demonstraci procesu optimalizace použijeme pro jednoduchost známou metodu dvouparametrického hledání – metodu totálního průzkumu.

Metoda totálního průzkumu

Základní princip metody [1,2,8] spočívá ve vymezení oblasti řídicích veličin, ve které se hledá extrém účelové funkce. Tato oblast se celá prozkoumá v řadě bodů (uzlů), vzniklých rozdělením pomocí sítě. Pro hodnoty řídicích veličin, které odpovídají souřadnicím uzlů vzniklé sítě, se stanoví hodnoty účelové funkce. Z takto vzniklého souboru hodnot účelové funkce se pak vybere vektor řídicích veličin (uzel sítě), kterému odpovídá nejnižší hodnota kritéria optimalizace. Celá procedura hledání se pak opakuje v užší oblasti kolem získaného optima s hustší sítí.

Vlastní algoritmus metody je pak následující.

Zajištění změny řídicí veličiny u_i s krokem Δu_i ve směru klesající hodnoty kritéria optimalizace (účelové funkce) $y(\mathbf{u})$ podle vztahu (k je index kroku)

$$u_{k,i} = u_{k-1,i} + \Delta u_{k,i} \quad (8)$$

Výchozí krok $\Delta u_{k,i}$ se volí jako určitý díl intervalu, ve kterém se má stanovit minimum funkce $y(\mathbf{u})$. Výchozí krok můžeme zvolit např. podle vztahu

$$\Delta u_{k,i} = h (u_{max,i} - u_{min,i}) \quad (9)$$

kde $h < 1$.

Tento krok je konstantní v celém intervalu. Vybere se uzel s nejmenší hodnotou účelové funkce a vymezí se nová oblast řídicích parametrů tak, že stávající uzly v okolí nalezeného minima se zvolí jako nové $u_{min,i}$ a $u_{max,i}$, podle rovnice (9) se provede nové dělení intervalu s menším dělicím faktorem z a proces se opakuje.

Výpočet se ukončí, když absolutní hodnota kroku klesne pod přípustnou chybu řešení

$$|\Delta u_{k,i}| \leq \varepsilon \quad (10)$$

Metoda je vzhledem množství iteračních kroků vhodná pouze k nalezení globálního minima a jeho přesnou lokalizaci provést jinou metodou.

Experiment

Pro realizaci experimentu byly zvoleny:

$$\begin{aligned} \text{a) rozsah experimentu:} \quad & u_{min,i} = (T_{min} = 200 \text{ }^\circ\text{C}; V_{min} = 10 \text{ m}^3) \\ & u_{max,i} = (T_{max} = 250 \text{ }^\circ\text{C}; V_{max} = 15 \text{ m}^3) \end{aligned}$$

b) počáteční dělicí poměr $h = 1/5$;

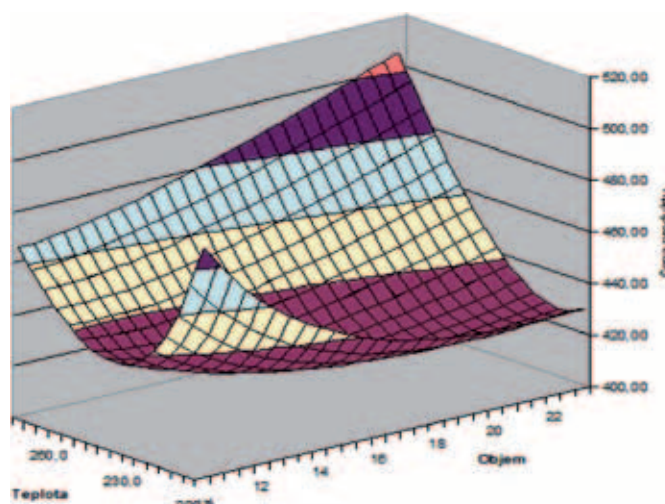
c) průběžný dělicí faktor $z = 3$;

d) chyba řešení $\varepsilon = 0,5 \text{ }^\circ\text{C}$.

Ještě před vlastním experimentem byla provedena simulace tvaru účelové funkce v okolí předpokládaného minima ($V = 10\text{--}23 \text{ m}^3$, $T = 200\text{--}270 \text{ }^\circ\text{C}$), aby bylo možno predikovat průběh optimalizačního procesu. Výsledný tvar účelové funkce ukazuje obr. 4. Lze vytvořit tyto závěry:

- Globální minimum funkce se nachází mimo reálné možnosti experimentu, tj. odhadnutý minimální objem okolo 17 m^3 přesahuje maximální objem reaktoru, nebude tedy možné ho nalézt z experimentálních dat.
- Podmíněnost obou hledaných parametrů je rozdílná, zakřivení účelové funkce pro parametr T je větší než pro parametr V , bude tedy hledání optimálního objemu obtížnější.
- Účelová funkce není v okolí minima symetrická, proto také nebudou určované intervaly spolehlivosti parametrů v okolí optima symetrické.

Obr. 4 – Prostorové zobrazení tvaru účelové funkce v okolí optima



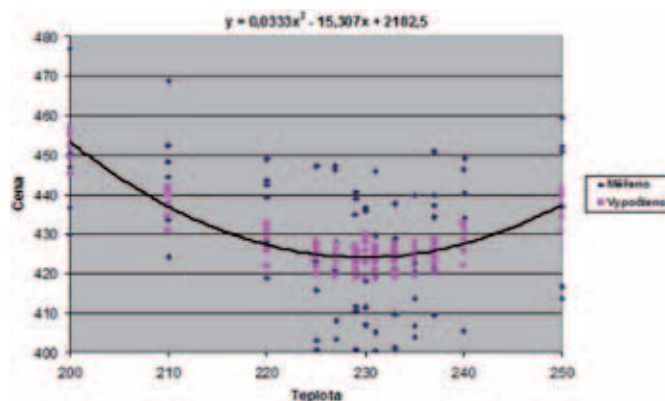
Výsledky experimentu – první část hledání přibližné polohy optima metodou totálního průzkumu jsou uvedeny v tab. 1. Proces optimalizace pokračoval prohledáváním okolí 22. kroku experimentu, dokud absolutní hodnota rozdílu dvou následných hodnot teploty neklesla pod hodnotu chyby řešení ε .

Závislosti ceny produktu na jednotlivých veličinách jsou ukázány na obr. 5 a 6. Závislost na teplotě vykazuje jednoznačné minimum, závislost na objemu pouze trend k minimu, které se nalézá mimo fyzikální možnosti experimentu. Tyto závislosti byly aproximovány polynomem druhého řádu, rovněž tak celá závislost:

$$y = 1946,41 - 13,53T + 8,25V - 0,42V^2 + 0,03T^2 \quad (11)$$

Nalezené souřadnice minima této závislosti jsou $T = 230,1 \text{ }^\circ\text{C}$ a $V = 15 \text{ m}^3$.

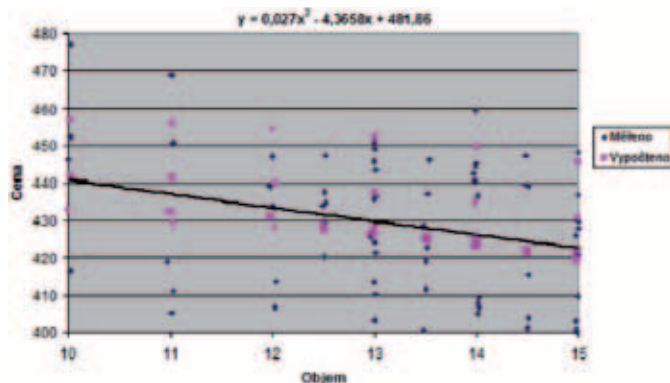
Obr. 5 – Regresní závislost teploty a ceny produktu reakce



Tab. 1 – Výsledky experimentu

k	T [°C]	V [m ³]	Cena [Kč]
1	199,98	10,02	477,00
2	200,00	11,02	450,43
3	200,02	12,00	447,09
4	200,02	13,01	436,65
5	199,98	14,00	445,35
6	200,01	15,00	429,66
7	209,97	14,99	448,27
8	209,98	13,99	444,52
9	210,01	13,00	424,20
10	209,99	12,02	433,49
11	210,02	11,01	468,81
12	209,99	10,02	452,44
13	219,95	9,98	448,85
14	220,01	10,97	418,68
15	220,01	11,97	439,32
16	219,99	13,01	443,57
17	220,01	13,97	442,57
18	220,02	15,00	427,86
19	229,92	15,01	422,80
20	230,00	14,01	436,76
21	229,99	12,99	435,70
22	230,00	12,02	406,81
23	230,00	11,03	411,34
24	230,02	9,99	418,02
25	239,98	10,00	446,32
26	239,98	11,01	405,29
27	240,02	12,00	434,00
28	240,01	13,00	449,21
29	240,02	13,99	440,42
30	240,00	14,97	425,98
31	249,99	14,99	437,01

Obr. 6 – Regresní závislost ceny produktu reakce na objemu reakční směsi



Vyhodnocení experimentu

Předpokládané nejistoty výsledků měření

Jak bylo výše uvedeno, na výstupní sledovaný parametr technologického procesu působí řada vnějších vlivů daných nestabilitou tohoto procesu (náhodné změny parametrů surovin a energií) a chybami měření. Je proto třeba vymezit interval pravděpodobných hodnot, které by „změřené“ veličiny, teplota T a objem V reakční směsi mohly vlivem poruch vstupních veličin získat. Tuto standardní nejistotu, vyjádřenou jako směrodatnou odchylku [3],

lze odhadnout použitím metody dvoubodové aproximace [5], pro kterou platí vztah (po úpravě)

$$s(F_B) = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^m \{G[z_{i,opt} + s(z_i)] + G[z_{i,opt} - s(z_i)]\}^2}{4m}} \quad (12)$$

kde $G[z_{i,opt} \pm s(z_i)]$ je funkční závislost (4), jejíž hodnoty jsou počítány postupně pro jednotlivé mezní hodnoty sledovaných vstupních veličin, které jsou dány připočtením nebo odečtením jejich standardních nejistot k optimální hodnotě,

m – počet sledovaných poruchových veličin.

Dále lze vypočítat rozšířenou nejistotu jako interval spolehlivosti pro danou hladinu významnosti [3], která bude vyjadřovat celkový možný rozsah pravděpodobných hodnot výstupní veličiny ceny produktu F_B :

$$s_e(F_B) = t_{1-\alpha, \nu} s(F_B) \quad (13)$$

kde $t_{1-\alpha, \nu}$ je kritická hodnota Studentova rozdělení na hladině významnosti α a se stupněm volnosti ν .

V daném modelu reaktoru byly tyto poruchy simulovány jako náhodné veličiny s normálním rozložením a definovaným rozsahem, působící na vybrané parametry. Aby bylo možno sledovat trend změn šíře intervalů spolehlivosti jednotlivých veličin, byly simulovány poruchy s rozsahem nejistot:

- teploty směsi v reaktoru $s_T = 0,01 - 0,025 - 0,05 - 0,10 - 0,25$ °C,
- průtoku reakční směsi $s_Q = 0,01 - 0,025 - 0,05 - 0,1 - 0,25$ m³·h⁻¹,
- vstupní koncentrace $s_{x_{A0}}$ a výstupní koncentrace $s_{x_A} = 0,1 - 0,25 - 0,50 - 1,0 - 2,50$ %.

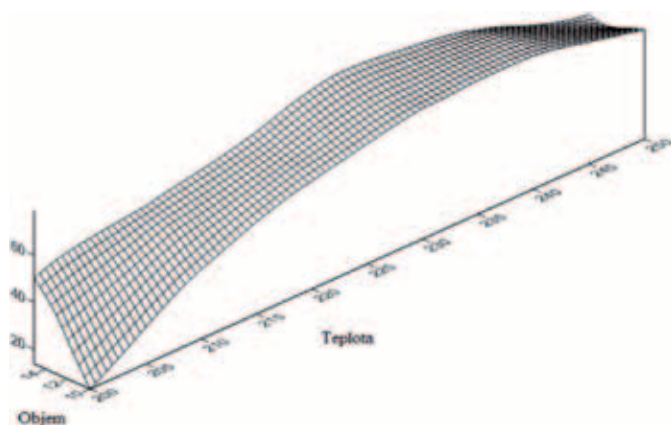
Pro tyto rozsahy nejistot byly pak vypočítány: standardní nejistota $s(x_B)$, rozšířená nejistota na 5% hladině významnosti $s_e(x_B)$ a interval spolehlivosti F_{Bmin} a F_{Bmax} . Tomu pak podle vztahu (4) odpovídá interval spolehlivosti pro teplotu T_{min} a T_{max} a pro objem V_{min} a V_{max} . Pro nalezené optimum aproximační závislosti (11) byl pro upravené hodnoty parametrů podle rovnice (12) vždy vypočten odpovídající rozsah hodnot účelové funkce, z jejichž okrajových hodnot byly zpětně dopočteny odpovídající hodnoty „měřených“ veličin. Výsledky pro jednotlivé volby nejistot vstupních veličin jsou uvedeny v tab. 2.

Tab. 2 – Vypočtené charakteristiky provozního optima pro volené nejistoty měřených veličin

Zadané nejistoty měřených veličin						
Veličina	Rozměr	Hodnota				
s_Q	m ³ · h ⁻¹	0,01	0,025	0,05	0,10	0,25
s_T	°C	0,01	0,025	0,05	0,10	0,25
$s_{x_{B, A0}}$	%	0,10	0,250	0,50	1,00	2,50
Vypočtené charakteristiky						
Veličina	Rozměr	Hodnota				
F_{min}	%	423,85	422,98	421,52	418,59	409,09
F_{max}	%	425,02	425,90	427,37	430,29	439,84
T_{min}	°C	213,60	213,50	210,60	207,90	201,60
T_{max}	°C	233,20	234,70	237,00	240,60	249,60
V_{min}	m ³	13,10	12,40	11,50	10,80	9,15
V_{max}	m ³	15,00	15,00	15,00	15,00	15,00
Standardní nejistota $s(F_B)$	%	0,2745	0,6861	1,3720	2,7440	6,8610
Rozšířená nejistota $s_e(F_B)$	%	0,5850	1,4620	2,9250	5,8500	14,625

Tvar výsledné účelové funkce je na obr. 7. Jelikož použitý program Surfer9 nedovoluje otočit směr vzestupu veličin (tj. vždy jen směrem rostoucích hodnot), byla osa odpovídající hodnotě účelové funkce transformována ($500 - z$), čímž se z minima stává maximum, ale extrém je alespoň z obrázku patrný.

Obr. 7 – Tvar výsledné účelové funkce zobrazený jako maximum



K řešení výše uvedených úloh byl využit tabulkový editor EXCEL a jeho nástroje *Řešitel*, *Hledání řešení* a *Přidání spojnic trendů*.

Závěr

Při hledání optimálních podmínek procesu v reaktoru není možné se omezit pouze na vyjádření sledovaných veličin jedinou hodnotou. Na sledované veličiny působí jednak poruchy (vnější vlivy i nestabilita surovin), jednak je měření zatíženo nejistotami měření, jejich ustalování je dynamické a odečítání hodnot měřených veličin je zatíženo i subjektivním faktorem. Tyto vlivy je třeba vzít v úvahu a optimum veličin stanovit formou intervalu, ve kterém lze režim reaktoru ještě považovat za optimální.

Přijatelný výsledek bude jen v tom případě, když hodnoty veličin zajišťující optimální provozní režim a jejich nejistoty budou ležet uvnitř vymezené oblasti mezních hodnot nejistot. Pro určení tohoto intervalu byla v našem případě použita metoda dvoubodové aproximace. Jelikož se jedná o současnou optimalizaci dvou veličin, je problém nalezení optima poměrně obtížný, zejména při různém vlivu těchto veličin na hodnotu účelové funkce. Proto je důležitý i výběr vhodné optimalizační metody. Zde byla pro jednoduchost užita metoda totálního průzkumu. Její použití je však z praktického hlediska náročné pro množství prováděných výpočtů. Pokud provedeme pouze globální hledání, nikoli podrobnější průzkum okolí optima, nalezená přesnost a správnost polohy optima je srovnatelná s výsledky nalezenými regulérním postupem z dat o řád méně přesných (tj. chyby měřených veličin jsou o řád větší).

Na základě získaných výsledků lze konstatovat, že takto experimentálně stanovený optimální režim je v rozsahu předpokládaných intervalů spolehlivosti a experimentální výsledky nevybočují z mezí zjištěných nejistot měření. Bylo provedeno testování vlivu velikosti nejistot měřených veličin na šíři intervalu spolehlivosti, který se při zvyšující se nepřesnosti měření zvětšuje. Je možno podle požadované velikosti intervalu definovat potřebnou minimální přesnost měření jednotlivých vstupních veličin. Se zvyšující nejistotou se kromě šíře intervalu spolehlivosti zhoršují charakteristiky těsnosti

proložení regresní závislosti. Jelikož tvar účelové funkce není symetrický vzhledem k minimu, taktéž intervaly spolehlivosti jednotlivých veličin nejsou symetrické.

Problematika je řešena v rámci výzkumného záměru MŠM 0021627505 „Řízení, optimalizace a diagnostika složitých systémů“.

Literatura

- [1] DRÁBEK, O.; TAUFER, I. *Automatizované systémy řízení technologických procesů*. [Skriptum]. Pardubice: VŠCHT Pardubice, 1990. 90 s. ISBN 80-85113-16-3.
- [2] HRUBINA, K.; et al. *Mathematical modelling of technical processes*. Prešov (Slovak Republic): Faculty of manufacturing Technologies on the UT Košice, 2001. 216 p. ISBN 80-88941-18-0.
- [3] CHUDÝ, V.; PALEŇČÁR, R.; KUREKOVÁ, E.; HALAJ, M. *Meranie technických veličín*. Bratislava: STU Bratislava, 1999. 688 s. ISBN 80-227-1275-2. Dostupné též na <<http://www.kam.sjf.stuba.sk/katedra/publikacie/edutrac/mtv/ucebnica/obsah.htm>>.
- [4] KUBANOVÁ, J. *Statistické metody pro ekonomickou a technickou praxi*. Bratislava: STATIS, 2004. 249 s. ISBN 80-85659-37-9.
- [5] MELOUN, M.; MILITKÝ, J. *Statistická analýza experimentálních dat*. Praha: Academia, 2004. 953 s., ISBN 80-200-1254-0.
- [6] OLEHLA, M.; aj. *Řešení úloh matematické statistiky ve FORTRANU*. Praha: NADAS, 1982. 368 s. OD-31-035-82 – 01-13.
- [7] SCALES, L.E. *Introduction to Non-linear Optimization*. Sutton. Surrey: MacMillan Publishers Ltd., 1985. 243 s., ISBN 0-333-32553-2.
- [8] TAUFER, I.; KOTYK, J.; HRUBINA, K.; TAUFER, J. *Algoritmy a algoritmizace. Vývojové diagramy. Sbíрка řešených příkladů*. Pardubice: Univerzita Pardubice, 2009. 94 s. V tisku.
- [9] TAUFER, I.; KREJČÍ, S.; JAVŮREK, M. *Laboratorní cvičení OPTIMALIZACE. Metody nelineárního programování*. [Skriptum], Pardubice: VŠCHT, 1993.

Abstract:

EFFECT OF DATA ACCURACY UPON DETERMINATION OF OPTIMUM CONDITIONS OF REVERSIBLE REACTION COURSE

Summary: The contribution presents a method of simulated determination of the optimum regime of a reactor in which a reversible reaction $A \rightleftharpoons B$ takes place. The quantity optimized is the production cost of one unit of product B; the quantities regulated are the volume of reaction mixture in the reactor and the reaction temperature. The text describes the ways of determination of limiting values of confidence intervals, and the experimental data are used for evaluating the confidence intervals depending upon various values of uncertainties of 'measured' values. The uncertainty in data causes broadening of the confidence interval as well as increased migration of the read values, which results in an increase in characteristics of goodness of fit of the regression dependence. A good accordance between the experimental results and theoretical presumptions has been found.

Key words: Technological process, optimization, uncertainties of measurement, confidence interval.