

OPTIMALIZACE CHEMICKÝCH STUPŇOVÝCH PROCESŮ POMOCÍ MATLAB SYMBOLIC MATH TOOLBOXU

Vladimír Hanta

Vysoká škola chemicko-technologická Praha, Ústav počítačové a řídicí techniky

Při modelování a simulaci chemicko-inženýrských systémů a procesů lze použitím funkcí symbolické matematiky do jisté míry mechanizovat část inženýrské práce při tvorbě, zjednodušování, řešení i optimalizaci matematických modelů. Největší možnosti použití symbolické matematiky leží v oblasti formálních úprav výrazů, dosazování a eliminaci, řešení i vlastní optimalizaci použitím nutných a postačujících podmínek pro extrém.

1. Úvod

V chemických stupňových procesech dochází ve srovnání s jednostupňovými procesy k vyššímu využití surovin a energií, a tím i k vyššímu zhodnocení vložených prostředků. Mezi tyto procesy patří např. opakovaná extrakce ve vícestupňovém extraktoru nebo chemická reakce v kaskádě reaktorů. Při tvorbě matematických modelů stupňových procesů se vychází z bilančních rovnic pro jednotlivé stupně a z rovnovážných vztahů mezi proudy. Modely stupňových procesů se obvykle vytvářejí postupným bilancováním od stupně ke stupně za použití rovnovážných vztahů. Vlastní řešení i optimalizace modelu se pak provádí vhodnými numerickými metodami. Obecné řešení a optimalizace těchto modelů jsou obvykle pracné s možností vzniku chyb. Při použití symbolické matematiky v prostředí MATLAB Symbolic Math Toolboxu lze všechny obecné výpočty pro jednodušší stupňové procesy provést s podporou počítače, tedy rychle a spolehlivě.

Postup sestavení modelu, jeho řešení a následná optimalizace pomocí symbolické matematiky je demonstrován na příkladu třístupňového extraktoru. Vlastní optimalizace je provedena symbolickým řešením podmínkových rovnic pro optimum. Jsou popsány výhody a nevýhody symbolických výpočtů a je provedeno jejich porovnání a zhodnocení.

2. Sestavení modelů stupňových procesů

Postupy při sestavování symbolických modelů stupňových procesů lze stručně zformulovat do několika kroků:

1. **Definice symbolických proměnných.** Zde je důležité vzít do úvahy vlastní fyzikální podstatu proměnných, případně technická omezení jejich rozsahu a zavést při definici symbolických proměnných vhodné typy (volby real, positive). Tyto volby mohou výrazně zjednodušit výsledky při úpravách a zjednodušování symbolických výrazů a při řešení symbolických rovnic.
2. **Sestavení bilančních vztahů pro každý stupeň.** Při bilancování jednotlivých stupňů stupňových systémů nebo procesů se používají základní fyzikální zákony zachování, v chemicko-inženýrských systémech se bilancuje hmotnost, složky, entalpie a obecně energie. Bilanční vztahy obvykle popisují vzájemné vztahy mezi jednotlivými hmotnými proudy subsystémů.
3. **Použití přídatných vztahů.** Základní bilance se doplňují o různé přídatné vztahy, které popisují závislosti mezi jednotlivými složkami nebo fázemi proudů. Obvykle se zde používá předpoklad dosažení rovnováhy (rovnovážné vztahy, kinetické údaje atd.).

4. **Zjednodušení rovnic modelu.** V řadě případů je možné eliminovat z modelových rovnic některé proměnné a snížit dimenzi systému. K eliminaci se používají ty proměnné, které v některých rovnicích jsou na ostatních proměnných lineárně závislé, nemusí to být však pravidlo.

3. Optimalizace symbolického modelu

K optimalizaci symbolického modelu je obvykle vhodné použít klasických postupů analytické teorie extrémů. Numerická optimalizace symbolického modelu není vhodná a navíc se přechodem do numerické oblasti eliminuje hlavní přednost symbolických modelů – výsledky optimalizace pak nejsou funkční vztahy mezi proměnnými optimalizovaného systému nebo procesu. Symbolická optimalizace je založena na symbolickém řešení a/nebo ověřování nutných a/nebo postačujících podmínek optima.

Vlastní postup optimalizace lze zformulovat do několika kroků, který se může lišit podle toho, do jaké míry se podaří eliminovat rovnice modelu – vazby a převést vázaný optimalizační problém na volný.

1. **Sestavení účelové funkce.** Toto kritérium optimality je vhodná funkce vstupních proměnných modelu, která kvantifikuje požadavky na kvalitu řešení.
2. **Eliminace rovnic modelu.** Je vhodné zjednodušit postup symbolické optimalizace eliminací rovnic modelu a převést výpočet vázaného optima na výpočet volného optima. Optimalizační výpočty se v tomto případě velmi zjednoduší.
3. **Sestavení nutných podmínek optima.** Každé optimum musí vyhovovat nutným podmínkám optima – derivace účelové funkce podle optimalizačních řídicích proměnných musí být nulové.
4. **Řešení podmínkových rovnic.** Optimální symbolické hodnoty optimalizačních řídicích proměnných se vypočítají jako funkce konstant modelovaného systému.
5. **Ověření druhu optima.** Nalezené řešení optimalizačního problému nemusí být optimem, je nutné ověřit postačující podmínky optima a určit druh optima (minimum, maximum). V případě volného extrému je řešení jednoduché a symbolicky dobře algoritmizovatelné. V případě vázaného extrému symbolické ověřování, zda vůbec se jedná o optimum a určení jeho typu je složitější a postup je více heuristický.

Důležitou součástí všech výpočtů je systematické zjednodušování vypočtených symbolických mezivýsledků. Jestliže se zjednodušování neprovádí, může během výpočtů vzniknout symbolický výraz natolik složitý, že jej funkce MATLAB Symbolic Math Toolboxu nemusí zvládnout.

4. Sestavení a optimalizace modelu stupňového procesu

Modelový příklad, na kterém je demonstrována symbolická optimalizace chemických stupňových procesů, je optimalizace třístupňového extraktoru s křížovým tokem.

V třístupňovém extraktoru s křížovým tokem se z roztoku o konstantním hmotnostním průtoku Q [kg/h] extrahuje v každém stupni rozpuštěná látka čistým extrakčním činidlem (nemísitelným s roztokem) o hmotnostním průtoku q_i , $i = 1, 2, \dots, n$ [kg/h]. Koncentrace rozpuštěné látky na vstupu extraktoru je x_0 , na výstupu z každého stupně extraktoru je x_i , $i = 1, 2, \dots, n$. Koncentrace jsou vyjádřeny v hmotnostních zlomcích. V každém stupni extraktoru se mezi rozpuštěnou látkou v roztoku a v extrakčním činidle ustanoví lineární rovnováha ($y_i = k x_i$, $i = 1, 2, \dots, n$). Cílem je nalézt optimální koncentrace rozpuštěné látky v roztoku na výstupu z každého stupně extraktoru x_i , $i = 1, 2, \dots, n$ a optimální průtoky extrakčního činidla q_i , $i = 1, 2, \dots, n$ pro každý stupeň extraktoru tak, aby celkový zisk

z extrakčního procesu (rozdíl mezi ziskem z extrahované látky a náklady na extrakční činidlo) byl maximální. Cena extrahované látky je a Kč/kg, cena rozpouštědla je b Kč/kg.

Postup tvorby symbolického modelu extraktoru a jeho optimalizaci lze rozčlenit do několika kroků:

- definice symbolických proměnných,
- definice účelové funkce,
- hmotnostní bilance rozpuštěné látky pro stupně extraktoru v implicitním tvaru,
- eliminace výstupních koncentrací rozpuštěné látky v extrakčním činidle z účelové funkce pomocí rovnice rovnováhy,
- eliminace průtoků extrakčního činidla z účelové funkce pomocí bilančních rovnic,
- výpočet nutných podmínek pro optimum (první derivace účelové funkce),
- řešení nutných podmínek – výpočet optimálních výstupních koncentrací za jednotlivými stupni extraktoru,
- výběr fyzikálně a technicky přípustných řešení (pouze kladná řešení),
- zajištění jednoznačnosti řešení,
- výpočet optimálních průtoků extrakčního činidla,
- sestavení postačujících podmínek pro maximální řešení (postupný výpočet prvních parciálních derivací účelové funkce a matice druhých parciálních derivací),
- ověření postačujících podmínek pro maximální řešení.

Program pro vytvoření symbolického modelu třístupňového extraktoru s křížovým tokem a jeho následnou optimalizaci je uveden níže:

```
% Optimalizace stupňových procesů pomocí symbolických výpočtů
% Eliminace vazeb
% definice prostředí
clear, close all, clc
% definice symbolických proměnných
% a cena extrahované látky [Kč/kg], b cena rozpouštědla [Kč/kg]
syms a b positive
% k rovnovážná konstanta pro roztok a extrakční činidlo [-]
syms k positive
% Q průtok extrahovaného roztoku [kg/h]
syms Q positive
% x0 vstupní koncentrace rozpuštěné látky [kg/kg]
syms x0 positive
% x1, x2, x3 koncentrace rozpuštěné látky na výstupu z každého stupně
[kg/kg]
syms x1 x2 x3 positive
% q1, q2, q3 průtoky extrakčního činidla každým stupněm [kg/h]
syms q1 q2 q3 positive
% y1, y2, y3 výstupní koncentrace rozpuštěné látky v extrakčním činidle
[kg/kg]
syms y1 y2 y3
% definice účelové funkce
f=a*Q*(x0-x3)-b*(q1+q2+q3);
% hmotnostní bilance rozpuštěné látky pro jednotlivé stupně extraktoru
% tvar statické bilance: vstupy-výstupy=0
bil1=Q*x0-q1*y1-Q*x1;
bil2=Q*x1-q2*y2-Q*x2;
bil3=Q*x2-q3*y3-Q*x3;
% eliminace výstupních koncentrací rozpuštěné látky v extrakčním činidle
% pomocí rovnice rovnováhy
bil1=subs(bil1,y1,k*x1);
bil2=subs(bil2,y2,k*x2);
bil3=subs(bil3,y3,k*x3);
```

```

% eliminace průtoků extrakčního činidla z účelové funkce
% pomocí bilančních rovnic
f=subs(f,{q1,q2,q3},{solve(bil1,q1),solve(bil2,q2),solve(bil3,q3)});
% výpočet optimálních výstupních koncentrací za stupni extraktoru
[x1s,x2s,x3s]=solve(diff(f,x1),diff(f,x2),diff(f,x3),'x1,x2,x3');
% výběr kladných řešení
x1r=x1s(abs(x1s)==x1s);
x2r=x2s(abs(x2s)==x2s);
x3r=x3s(abs(x3s)==x3s);
% zajištění jednoznačnosti řešení
x1o=x1r(1)
x2o=x2r(1)
x3o=x3r(1)
% výpočet optimálních průtoků extrakčního činidla
q1o=simple(solve(simple(subs(bil1,{x1,x2,x3},{x1o,x2o,x3o})),q1))
q2o=simple(solve(simple(subs(bil2,{x1,x2,x3},{x1o,x2o,x3o})),q2))
q3o=simple(solve(simple(subs(bil3,{x1,x2,x3},{x1o,x2o,x3o})),q3))
% výpočet optimální hodnoty účelové funkce
fo=simple(subs(f,{x1,x2,x3},{x1o,x2o,x3o}))% test minimálního řešení
% vektor prvních parciálních derivací (transponovaná Jacobiho matice)
Jmat=simple(jacobian(f,[x1,x2,x3]))';
% matice druhých parciálních derivací (Hessova matice)
Hmat=simple(subs(jacobian(Jmat,[x1,x2,x3]),{x1,x2,x3},{x1o,x2o,x3o}));
% testování negativní definitnosti Hessovy matice pro maximum
% pomocí Sylvestrových podmínek
for kk=1:3
    D(kk)=simple(det(-Hmat(1:kk,1:kk)));
    sylvester(kk)=abs(D(kk))==D(kk);
end
if sylvester==ones(1,3), disp('Nalezený extrém je maximum!'), end

```

5. Výhody a nevýhody tvorby a optimalizace symbolických modelů

Základní předností symbolických modelů je fakt, že všechny výsledky se získají v obecné formě v závislosti na vstupních proměnných systému. Je vhodné symbolické výpočty po každém kroku zjednodušovat, tím se do značné míry zvyšuje možnost použití této techniky pro složitější systémy. Na rozdíl od mechanického zjednodušování pomocí funkcí člověk při zjednodušování výsledků uplatňuje heuristický přístup a obvykle je schopen symbolické výsledky získat v přehlednější formě. Pro použitý model jsou všechny tři průtoky

extrakčního činidla stejné $q_i^{opt} = \frac{Q}{k} \left(\sqrt[4]{x_0 \frac{ak}{b}} - 1 \right)$, $i = 1, 2, 3$, odpovídající symbolické výrazy,

i když jsou ekvivalentní, vypadají odlišně a až při podrobnějším rozboru se zjistí jejich totožnost. Výstupní koncentrace lze zapsat obecně pro všechny stupně ve velmi přehledném tvaru v závislosti na celkovém počtu stupňů a pořadovém čísle stupně

$x_i^{opt} = \sqrt[4]{\left(\frac{b}{ak}\right)^i} x_0^{4-i}$, $i = 1, 2, 3$, zatímco ze symbolického řešení tyto závislosti nejsou zřejmé.

Všechny výpočty lze až na jedinou výjimku provést obecně pomocí indexování s využitím cyklů a vektorů v závislosti na počtu stupňů n . Touto výjimkou je symbolické řešení podmínkových rovnic, odpovídající funkce **solve** vyžaduje zadání parametrů (rovnic a proměnných) jako explicitního seznamu.

```

f =
a*Q*(x0-x3)-b*(q1+q2+q3)

x1o =
a^2*k^2*(b/a/k*(x0*b/a/k)^(1/2))^(3/2)/b^2

```

```

x2o =
  (x0*b/a/k)^(1/2)

x3o =
  (b/a/k*(x0*b/a/k)^(1/2))^(1/2)

q1o =
  Q/k^(3/4)/b^(1/4)*x0^(1/4)*a^(1/4)-Q/k

q2o =
  Q*((b*(x0*b*a*k)^(1/2))^(1/2)-b)/b/k

q3o =
  Q*((a*k*x0)^(1/4)-b^(1/4))/k/b^(1/4)

fo =
  -(-a*b^(1/4)*k*x0^(7/4)+4*b*x0*a^(1/4)*k^(1/4)-
  3*x0^(3/4)*b^(5/4))*Q/b^(1/4)/x0^(3/4)/k

Nalezený extrém je maximum!

```

6. Závěry

Tvorba a optimalizace symbolického modelu pomocí funkcí MATLAB Symbolic Math Toolboxu je pro chemicko-inženýrské stupňové procesy velmi užitečným přístupem. Jednoduchým a dobře algoritmizovatelným postupem lze získat obecné výsledky, které by se jinak musely odvozovat pracně bez podpory počítače. Tento postup navíc zaručuje získání přesných a správných výsledků, chyby a omyly při řešení jsou prakticky vyloučeny. Jinou otázkou je konečný tvar výsledků, zde je zapotřebí vynaložení určitého množství heuristického zjednodušování, aby výsledky byly převedeny do přehledných a komprimovaných tvarů. Celý algoritmus tvorby symbolického modelu pro konkrétní chemický stupňový proces lze zapsat sevřeně pomocí symbolických vektorů, symbolických indexovaných proměnných a cyklů v závislosti na obecně zadaném počtu stupňů s jedinou, ale podstatnou výjimkou – symbolické řešení soustavy podmínkových rovnic. Vstupní parametry odpovídající funkce se musí zadávat jako seznamy bez možnosti zápisu do vektorů, výsledky jsou objekty – struktury, ke kterým se musí přistupovat individuálně.

Poděkování

Tato práce byla vypracována za podpory programu č. MSM 223400007 Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy České republiky.

Literatura

- [1] Beveridge, G. S. G., Schechter, R. S.: Optimization: Theory and Practice. McGraw-Hill, New York, USA, 1970.
- [2] Míka, V.: Základy chemického inženýrství. SNTL/ALFA, Praha, 1977
- [3] Moler, C., Costa, P. J.: Symbolic Math Toolbox. For Use with MATLAB. User's Guide. The MathWorks, Inc., Natick, MA, 1997
- [4] Using MATLAB, The MathWorks, Inc., Natick, MA, 2000

Ing. Vladimír Hanta, CSc.

Vysoká škola chemicko technologická v Praze

Ústav počítačové a řídicí techniky

Technická 5, 166 28 Praha 6

tel.: +420-2 2435 4212, fax.: +420-2 2435 5053, e-mail: hantav@vscht.cz