Optimale Steuerung 2

Kapitel 8: Lösung dynamischer Optimierungsprobleme mit dem SQP-Verfahren

Prof. Dr.-Ing. habil. Pu Li

Fachgebiet Prozessoptimierung

Lösung dynamischer Optimierungsprobleme mit der simultanen Methode

Dynamische Optimierung

$$\min_{\mathbf{u}} \quad J(\mathbf{x},\mathbf{u},t)$$

$$\text{mit} \quad \mathbf{g}(\dot{\mathbf{x}},\mathbf{x},\mathbf{u},t) = \mathbf{0}$$

$$\mathbf{h}(\dot{\mathbf{x}},\mathbf{x},\mathbf{u},t) \le \mathbf{0}$$

$$\mathbf{x}_{\min} \le \mathbf{x} \le \mathbf{x}_{\max}$$

$$\mathbf{u}_{\min} \le \mathbf{u} \le \mathbf{u}_{\max}$$

$$\mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0$$

Diskretisierung

Nichtlineare Optimierung

$$\min_{\mathbf{x}_{l,i},\mathbf{u}_{l,i}} \quad J(\mathbf{x}_{l,i},\mathbf{u}_{l,i})$$

$$\text{mit} \quad \mathbf{g}_{l,i}(\mathbf{x}_{l,i},\mathbf{u}_{l,i}) = \mathbf{0}$$

$$\mathbf{h}_{l,i}(\mathbf{x}_{l,i},\mathbf{u}_{l,i}) \le \mathbf{0}$$

$$\mathbf{x}_{\min} \le \mathbf{x}_{l,i} \le \mathbf{x}_{\max}$$

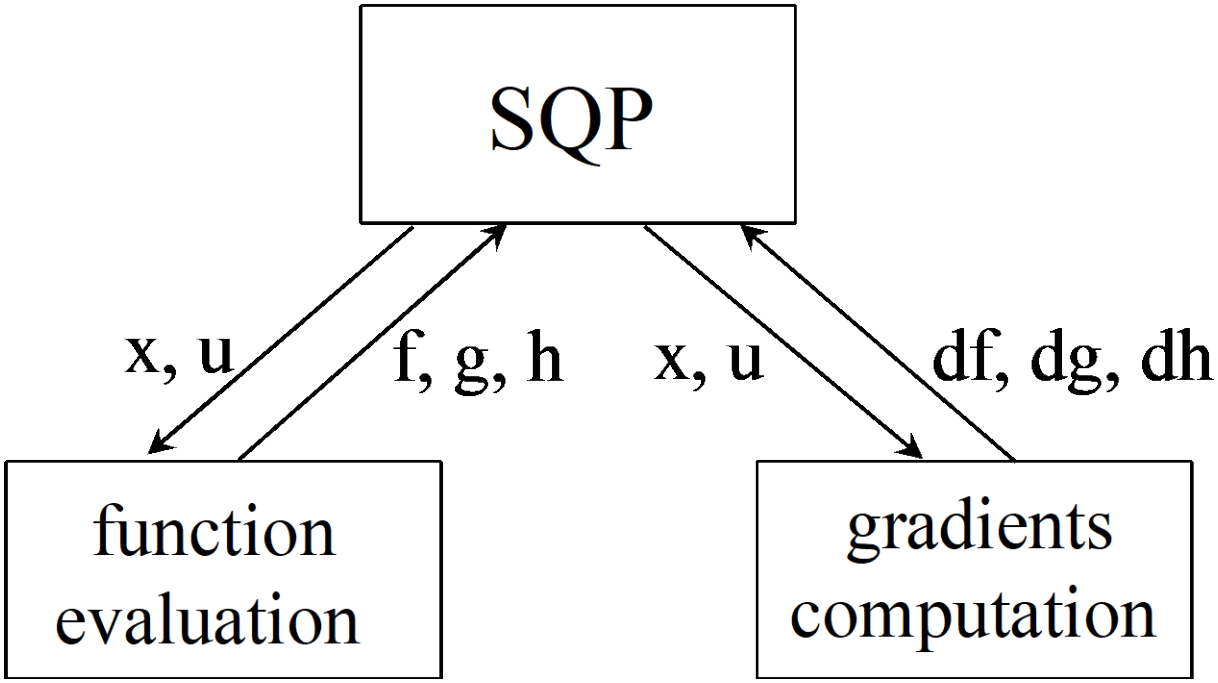
$$\mathbf{u}_{\min} \le \mathbf{u}_{l,i} \le \mathbf{u}_{\max}$$

$$i = 1, NC \quad \text{und} \quad l = 1, NL$$

Nach der Diskretisierung:

- Es gibt NL Zeitintervalle.
- In jedem Intervall werden NC Kollokationspunkte betrachtet.
- Jede Variable führt zu NL X NC diskreten Punkten.

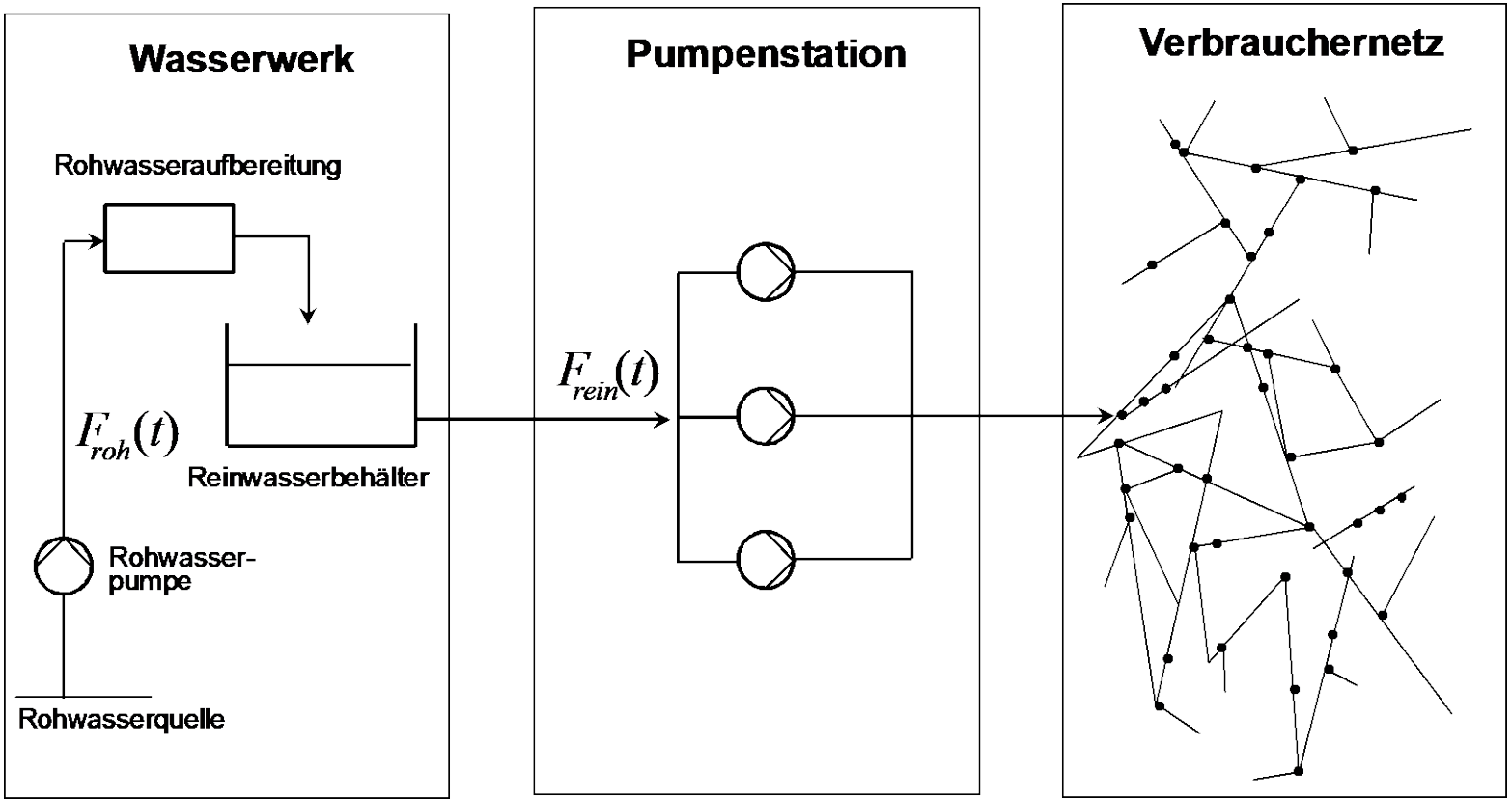
Lösung mit dem SQP-Verfahren



Ein großes NLP-Problem: jede Variable, jeder Kollokationspunkt, jedes Zeitintervall sind zu betrachten.

Beispiel: Betriebsplanung eines Wasserwerks

Wasserversorgung einer Stadt

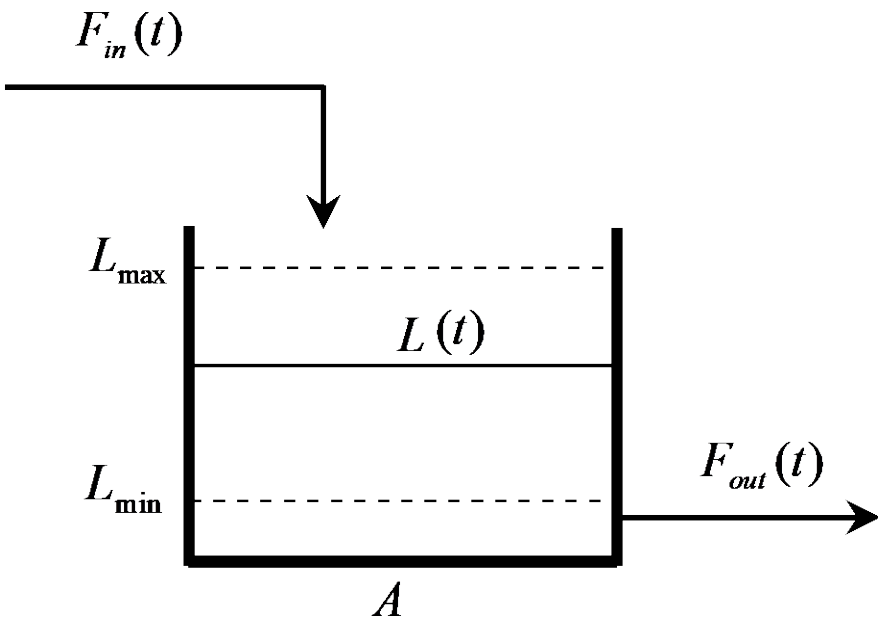


Optimale Betriebsplanung eines Wasserwerks für die nächsten 24 Stunden

Diskrete Formulierung ($k = 0, \cdots, 23$)

- Wasserbedarf $F_{out}(k)$ ist bekannt.
- Betriebskosten sind eine Funktion der Zeit $c(k)$

  d. h. es ist unterschiedlich am Tag und in der Nacht.
- Welche ist die optimale Fahrweise für $F_{in}(k)$?



Optimale Betriebsplanung eines Wasserwerks für die nächsten 24 Stunden

Problemformulierung:

$$\min_{F_{in}(k)} \quad \sum_{k=0}^{23} c(k)F_{in}(k) + \beta \sum_{k=0}^{22} \left[F_{in}(k+1) - F_{in}(k)\right]^2$$

$$s.t. \quad L(k+1) = L(k) + \frac{1}{A}\left[F_{in}(k) - F_{out}(k)\right]$$

$$L(24) = L(0) = L_0$$

$$L_{\min} \le L(k) \le L_{\max} \qquad k = 1, \cdots, 24$$

$$F_{\min} \le F_{in}(k) \le F_{\max} \qquad k = 0, \cdots, 23$$

Parameter:

- Wasserbedarf (m^3/h): $F_{out}(k) = 500 - (16-k)^2$
- Kostenfunktion (€/m^3): $c(k) = \exp[-(k-12)^2/72]$
- Tankfläche (m^2): $A = 200$
- Initialfüllstand (m): $L_0 = 5$
- Grenze des Füllstands (m): $L_{\min} = 2, \; L_{\max} = 8$
- Durchflussbegrenzung (m^3/h): $F_{in,\min} = 200, \; F_{in,\max} = 700$
- Gewichtsfaktor: $\beta = 0.01$

Fachgebiet Prozessoptimierung

Optimale Betriebsplanung eines Wasserwerks für die nächsten 24 Stunden

Variablen:

- Steuervariablen: $F_{in}(k) \quad k = 0, \cdots, 23$
- Zustandsvariablen: $L(k) \quad k = 1, \cdots, 24$

Gleichungsnebenbedingungen:

$$L(k+1) = L(k) + \frac{1}{A}\left[F_{in}(k) - F_{out}(k)\right] \quad k = 0, \cdots, 23$$

$$L(24) = L(0) = L_0$$

Ungleichungsnebenbedingungen:

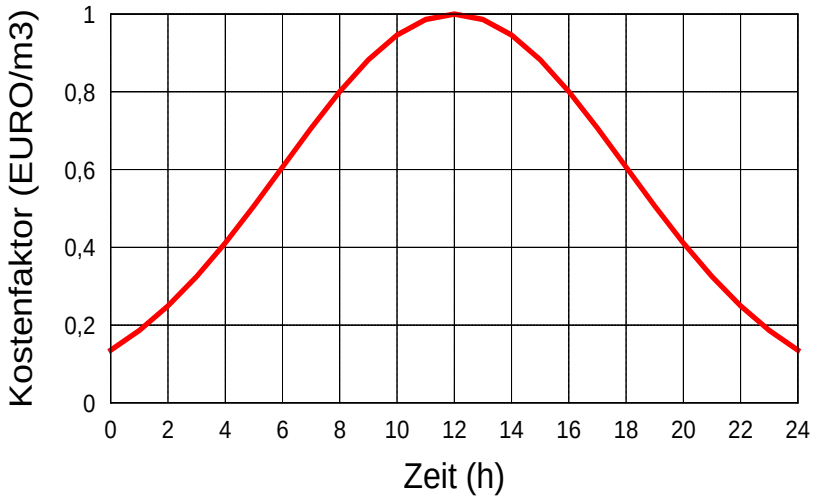
$$L_{\min} \le L(k) \le L_{\max} \qquad k = 1, \cdots, 24$$

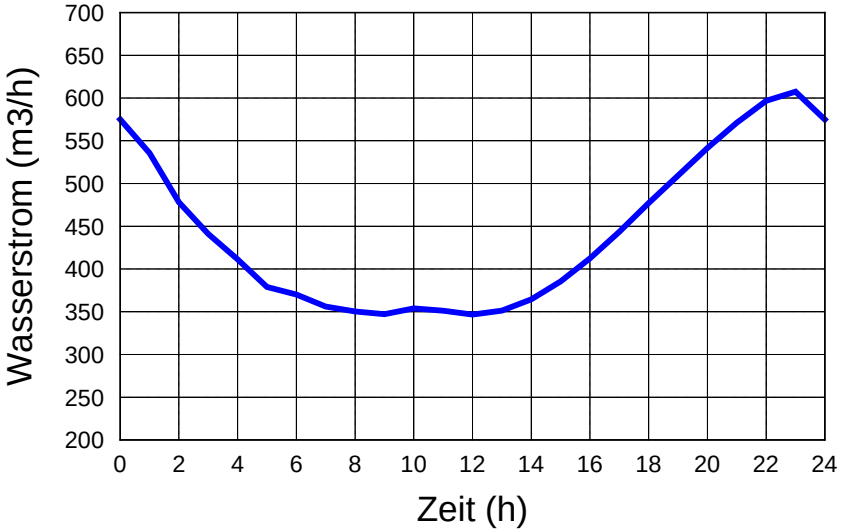
$$F_{\min} \le F_{in}(k) \le F_{\max} \qquad k = 0, \cdots, 23$$

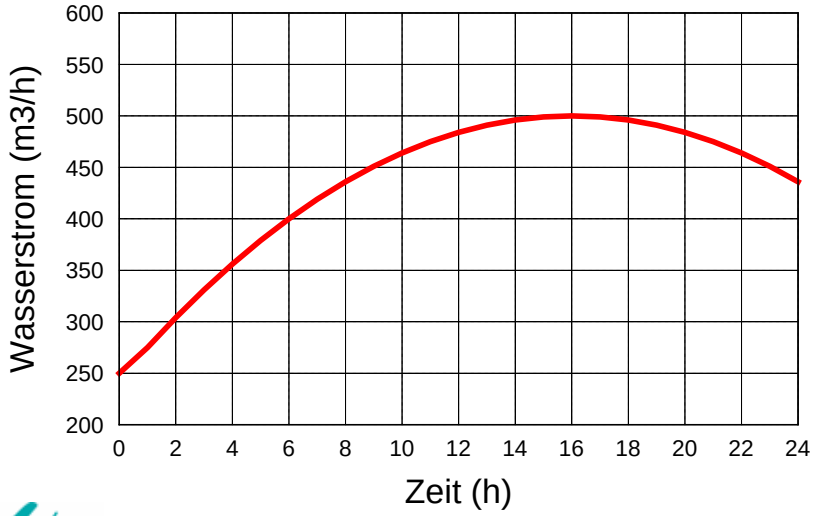
Die optimale Lösung:

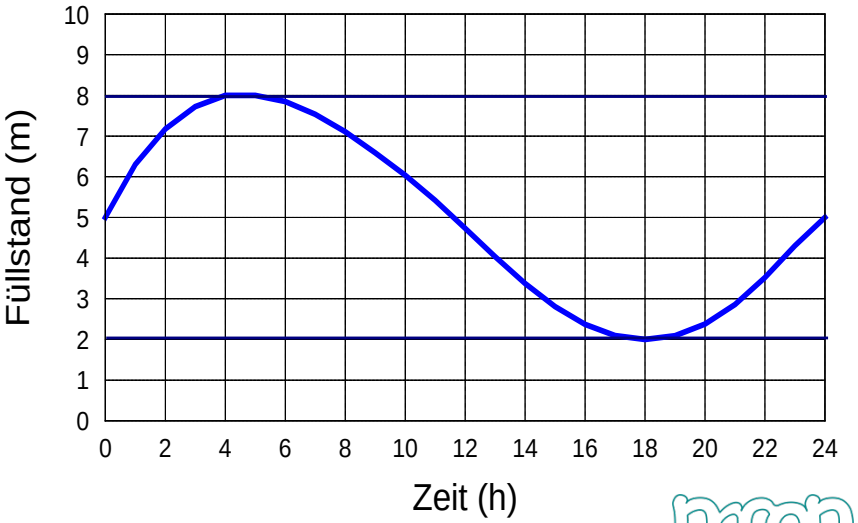
Kosten beim optimalen Fahrplan:	5784.24 €/Tag
Kosten beim konventionellen Fahrplan:	6558.07 €/Tag

Ergebnisse der Optimierung:









Fachgebiet Prozessoptimierung

Optimierung einer Batch-Destillation (vereinfachtes Modell)

Zielfunktion: $$\max_{R_V, t_f}\left[\mathrm{Profit}(R_V, t_f) = \frac{c_1 D(R_V, t_f) - c_2 B_0}{t_f} - c_3\right]$$

Kondensator: $$\frac{dx_1}{dt} = \frac{V}{HU_1}\left(y_2 - x_1\right)$$

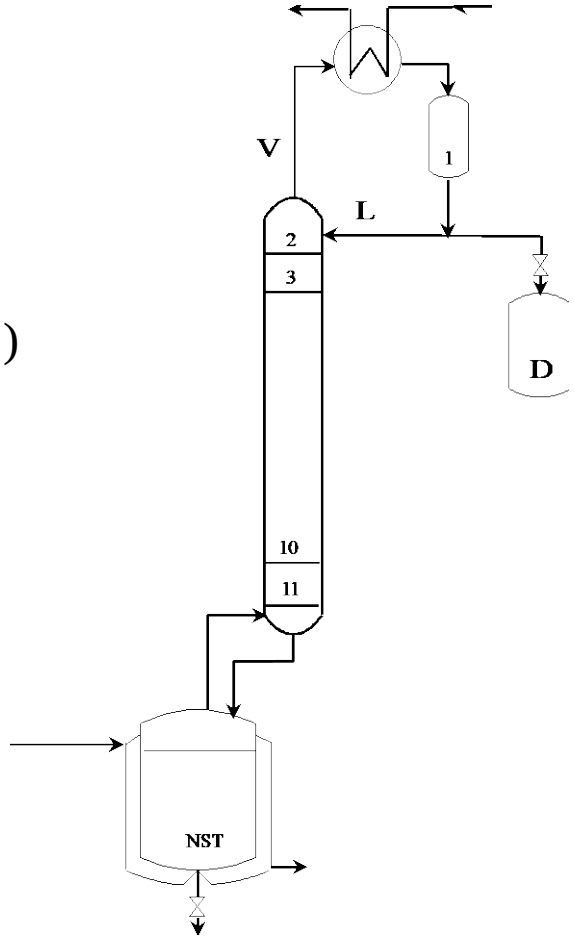
Stufe: $$\frac{dx_j}{dt} = \frac{V}{HU_j}(y_{j+1} - y_j) + \frac{L}{HU_j}(x_{j-1} - x_j) \qquad j = 2, NST - 1$$

Sumpf: $$\frac{dx_{NST}}{dt} = \frac{L}{HU_{NST}}(x_{NST-1} - x_{NST}) + \frac{V}{HU_{NST}}(x_{NST} - y_{NST})$$

Totale Massenbilanz: $$\frac{dHU_{NST}}{dt} = -\frac{V}{1 + R_V} = -D(t)$$

Gleichgewicht: $$y_j = \frac{\alpha x_j}{1 + (\alpha - 1)x_j} \qquad j = 2, NST$$

Spezifikation: $$X^* \le \frac{\int_{t_s}^{t_f} \frac{x_1 V}{1 + R_V}\, dt}{\int_{t_s}^{t_f} \frac{V}{1 + R_V}\, dt} \le 1.0$$



Optimierung mit der simultanen Methode

Diskretisierung mit stückweiser Kollokation:

- Drei Zeitintervalle für die Startup-Phase
- Sechs Zeitintervalle für die Produktionsphase
- Drei-Punkte-Kollokation in jedem Intervall
- Ca. 400 Zustandsvariablen nach der Diskretisierung
- Die Steuerung ist eine stückweise konstante Funktion (R_V für 6 Intervalle)
- Die Länge der Intervalle als Steuervariablen betrachtet (9 Δt)

Optimierungsgebnisse der Batch-Kolonne

	Profit	Productmenge M_1 (mol)	Startup-Zeit t_S (h)	Chargenzeit t_f (h)	Iteration	CPU-Zeit (s) *
Fall 1 (Spezifikation: 0,935)	76,66	42,45	0,685	4,619	68	2446
Fall 2 (Spezifikation:0,945)	23,15	40,69	0,731	5,437	95	3168

Fachgebiet Prozessoptimierung

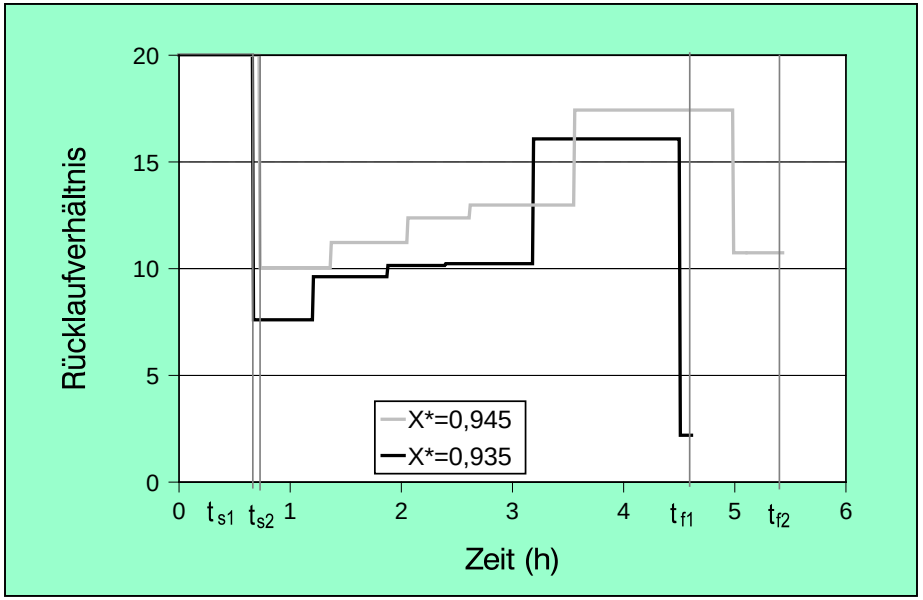
Optimale Führungsstrategie:

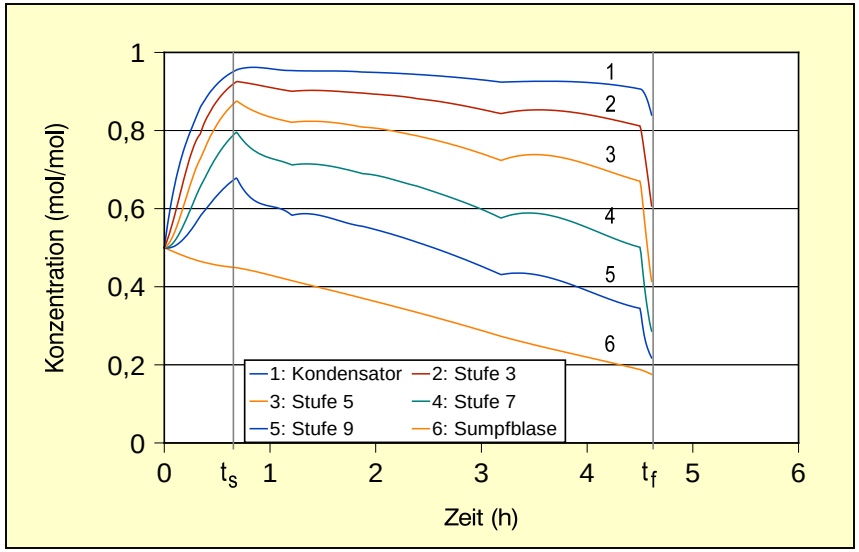
Rücklaufverhältnis:

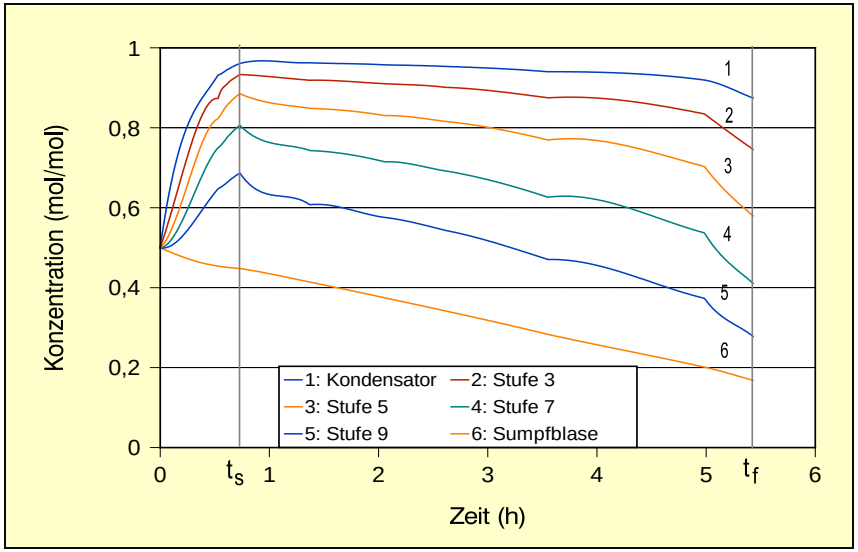
Konzentration:

$$x^* = 0{,}935$$

$$x^* = 0{,}945$$







Modifikation für große Systeme

Getrennte Betrachtung Zustands- und Steuervariablen

(Die sequentielle Methode)

Dynamische NLP

$$\min_{\mathbf{u}} J(\mathbf{x},\mathbf{u},t)$$
$$\text{s.t.}\quad \mathbf{g}(\dot{\mathbf{x}},\mathbf{x},\mathbf{u},t)=\mathbf{0}$$
$$\mathbf{h}(\dot{\mathbf{x}},\mathbf{x},\mathbf{u},t)\le\mathbf{0}$$
$$\mathbf{x}_{\min}\le\mathbf{x}\le\mathbf{x}_{\max}$$
$$\mathbf{u}_{\min}\le\mathbf{u}\le\mathbf{u}_{\max}$$
$$\mathbf{x}(t_0)=\mathbf{x}_0$$

Große NLP

$$\min_{\mathbf{x}_{l,i},\mathbf{u}_{l,i}} J(\mathbf{x}_{l,i},\mathbf{u}_{l,i})$$
$$\text{s.t.}\quad \mathbf{g}_{l,i}(\mathbf{x}_{l,i},\mathbf{u}_{l,i})=\mathbf{0}$$
$$\mathbf{h}_{l,i}(\mathbf{x}_{l,i},\mathbf{u}_{l,i})\le\mathbf{0}$$
$$\mathbf{x}_{\min}\le\mathbf{x}_{l,i}\le\mathbf{x}_{\max}$$
$$\mathbf{u}_{\min}\le\mathbf{u}_{l,i}\le\mathbf{u}_{\max}$$

Reduzierte NLP

$$\mathbf{x}_{l,i}=f(\mathbf{u}_{l,i})$$
$$\min_{\mathbf{u}_{l,i}} J(f(\mathbf{u}_{l,i}),\mathbf{u}_{l,i})$$
$$\text{s.t.}\quad \mathbf{h}_{l,i}(f(\mathbf{u}_{l,i}),\mathbf{u}_{l,i})\le\mathbf{0}$$
$$\mathbf{u}_{\min}\le\mathbf{u}_{l,i}\le\mathbf{u}_{\max}$$
$$\mathbf{x}_{\min}\le f(\mathbf{u}_{l,i})\le\mathbf{x}_{\max}$$

Berechnung der Sensitivitäten

Große NLP

$$\min_{\mathbf{x}^k,\mathbf{u}^k} \left\{ \begin{array}{l} \nabla_x J^k d\mathbf{x}^k + \nabla_u J^k d\mathbf{u}^k \\ + \frac{1}{2}\left[d\mathbf{x}^k \;\; d\mathbf{u}^k\right]\mathbf{B}^k\left[d\mathbf{x}^k \;\; d\mathbf{u}^k\right]^T \end{array} \right\}$$

mit

$$\nabla_x \mathbf{g}_i^k d\mathbf{x}^k + \nabla_u \mathbf{g}_i^k d\mathbf{u}^k + \mathbf{g}_i^k = \mathbf{0}$$

$$\nabla_x \mathbf{h}_i^k dx^k + \nabla_u \mathbf{h}_i^k d\mathbf{u}^k + \mathbf{h}_i^k \leq \mathbf{0}$$

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + a_x^k d\mathbf{x}^k$$

$$\mathbf{u}^{k+1} = \mathbf{u}^k + a_u^k d\mathbf{u}^k$$

Reduzierte NLP

$$\min_{\mathbf{u}^k} \left\{ \nabla_x J^k \left(\frac{d\mathbf{x}}{d\mathbf{u}}\right)^k d\mathbf{u}^k + \nabla_u J^k d\mathbf{u}^k + \frac{1}{2}\left[\left(\frac{d\mathbf{x}}{d\mathbf{u}}\right)^k d\mathbf{u}^k d\mathbf{u}^k\right]\mathbf{B}^k\left[\left(\frac{d\mathbf{x}}{d\mathbf{u}}\right)^k d\mathbf{u}^k d\mathbf{u}^k\right]^T \right\}$$

$$s.t. \quad \nabla_x \mathbf{g}^k \left(\frac{d\mathbf{x}}{d\mathbf{u}}\right)^k d\mathbf{u}^k + \nabla_u \mathbf{g}^k d\mathbf{u}^k + \mathbf{g}_i^k = \mathbf{0}$$

$$\nabla_x \mathbf{h}^k \left(\frac{d\mathbf{x}}{d\mathbf{u}}\right)^k d\mathbf{u}^k + \nabla_u \mathbf{h}^k d\mathbf{u}^k + \mathbf{h}^k \leq \mathbf{0}$$

$$\mathbf{u}^{k+1} = \mathbf{u}^k + \alpha_u^k d\mathbf{u}^k$$

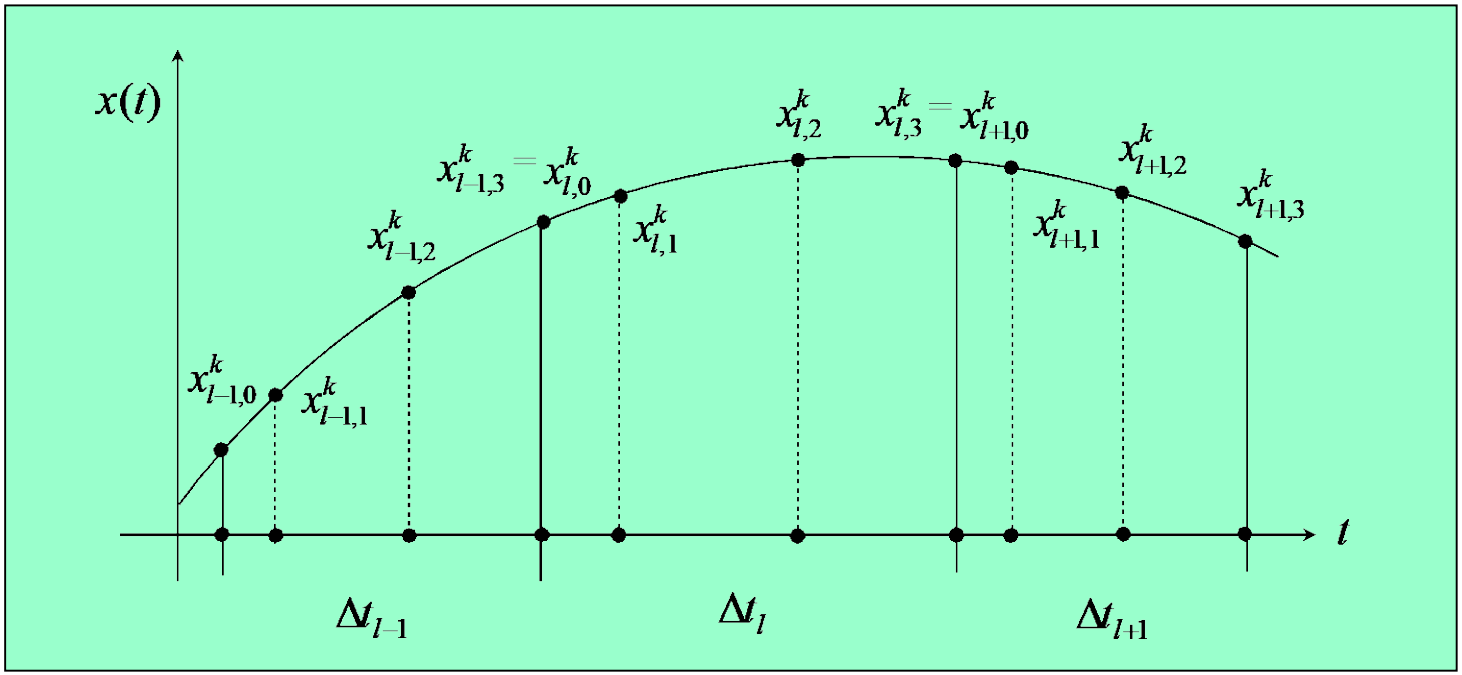
Berechnung der Sensitivitäten

Modellgleichungen im Zeitintervall *l*:

$$\mathbf{g}_l(\mathbf{x}_{l,0}^k, \mathbf{x}_l^k, \mathbf{u}_l^k) = \mathbf{0}$$

Taylor-Entwicklung:

$$\mathbf{C}_l^k(\mathbf{x}_{l,0} - \mathbf{x}_{l,0}^k) + \mathbf{D}_l^k(\mathbf{x}_l - \mathbf{x}_l^k) + \mathbf{E}_l^k(\mathbf{u}_l - \mathbf{u}_l^k) = \mathbf{0}$$



Berechnung der Sensitivitäten

Gradienten im betrachteten Zeitintervall:

$$\frac{\partial \mathbf{x}_l}{\partial \mathbf{u}_l} = -\left(\mathbf{D}_l^k\right)^{-1} \mathbf{E}_l^k \quad , \qquad \frac{\partial \mathbf{x}_l}{\partial \mathbf{x}_{l,0}} = -\left(\mathbf{D}_l^k\right)^{-1} \mathbf{C}_l^k$$

Gradienten am letzten Kollokationspunkt:

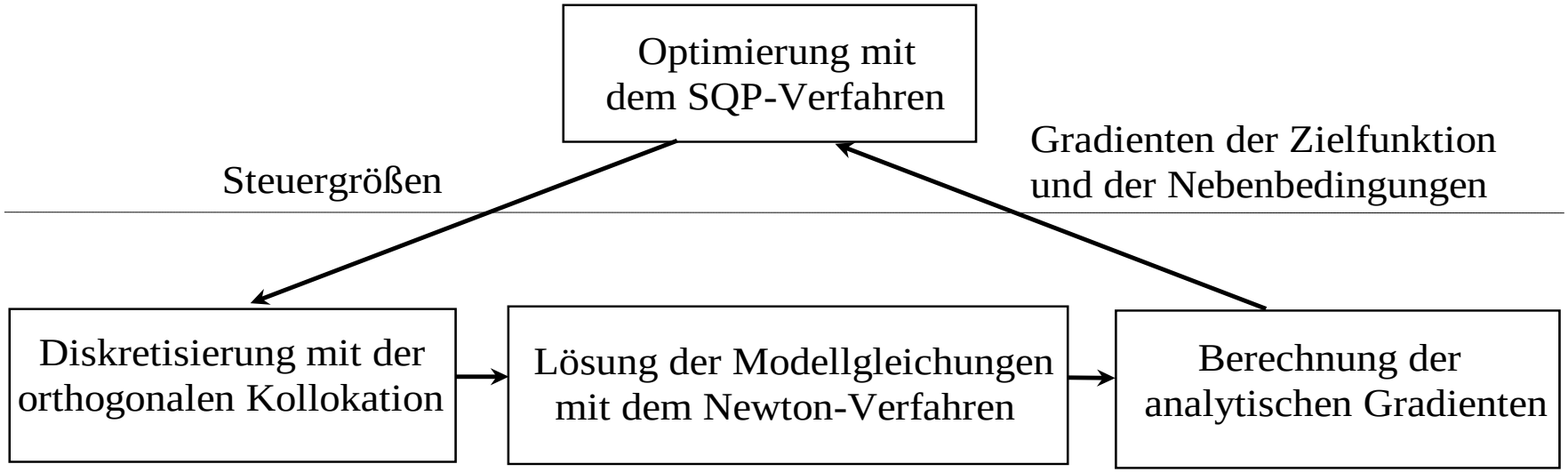
$$\frac{\partial \mathbf{x}_{l+1,0}}{\partial \mathbf{u}_l} = \frac{\partial \mathbf{x}_{l,NC}}{\partial \mathbf{u}_l} \quad , \qquad \frac{\partial \mathbf{x}_{l+1,0}}{\partial \mathbf{x}_{l,0}} = \frac{\partial \mathbf{x}_{l,NC}}{\partial \mathbf{x}_{l,0}}$$

Transfer der Gradienten von Intervall zu Intervall:

$$\frac{\partial \mathbf{x}_{l+1,0}}{\partial \mathbf{u}_{l-1}} = \frac{\partial \mathbf{x}_{l+1,0}}{\partial \mathbf{x}_{l,0}} \frac{\partial \mathbf{x}_{l,0}}{\partial \mathbf{u}_{l-1}}$$

Struktur der sequentiellen Optimierungsmethode

Optimierungsschicht



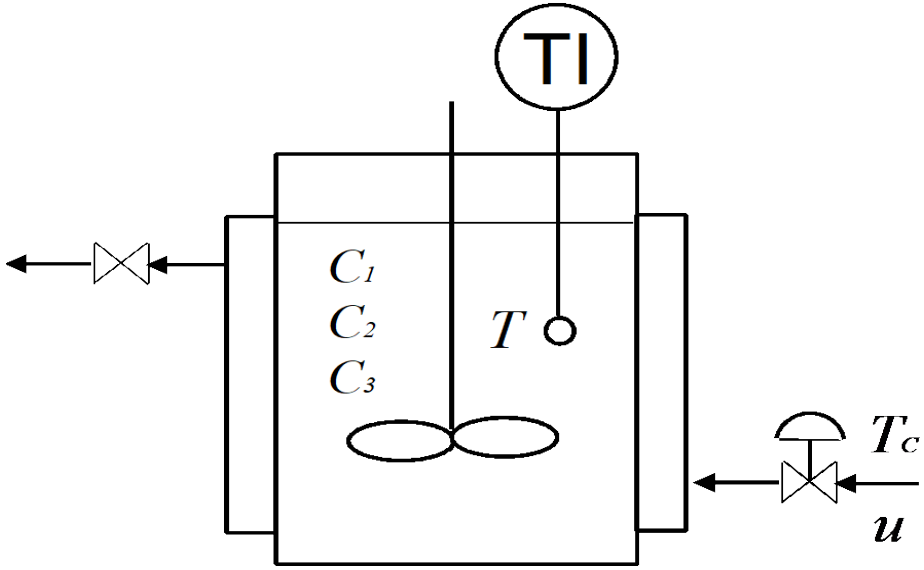
Simulationsschicht

Optimierung eines Batch-Bioreaktors für Bier-Fermentation

Edukte (Zucker): Glucose ($C1$), Maltose ($C2$), Maltotriose ($C3$)

Produkte: Biomasse (XB), Ethanol (Eth)

- Wie lange soll die Reaktion durchgeführt werden?
- Wie ist die Führungsstrategie?



Das Optimierungsproblem:

Zielfunktion:

$$\max_{u(t),t_f} \left\{ J\left(u(t),t_f\right) = Eth(t_f) - wt_f \right\}$$

Komponentenbilanzen:

Glucose:

$$\frac{dC_1}{dt} = -\frac{k_1 C_1}{k_1' + C_1} XB$$

Maltose:

$$\frac{dC_2}{dt} = -\frac{k_2 C_2}{k_2' + C_2} \frac{k_1''}{k_1'' + C_1} XB$$

Maltotriose:

$$\frac{dC_3}{dt} = -\frac{k_3 C_3}{k_3' + C_3} \frac{k_1''}{k_1'' + C_1} \frac{k_2''}{k_2'' + C_2} XB$$

Energiebilanz:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{1}{\rho C_P} \left[\sum_{i=1}^{3} \Delta H_i \frac{dC_i}{dt} - u\,(T - T_c) \right]$$

Funktionen im Modell:

Ethanolkonzentration: $$Eth(t) = \sum_{i=1}^{3} R_{E_i}\left[C_i(0) - C_i(t)\right]$$

Biomassekonzentration: $$XB(t) = XB(0) + \sum_{i=1}^{3} R_{X_i}\left[C_i(0) - C_i(t)\right]$$

$$k_i = k_{i0}\exp[-E_i / R(T + 273.15)]$$
$$k_i' = k_{i0}'\exp[-E_i' / R(T + 273.15)]$$
$$k_i'' = k_{i0}''\exp[-E_i'' / R(T + 273.15)]$$

Reaktionskinetik:

Temperaturrestriktion: $$0°C \le T(t) \le T_{\max}$$

Beschränkung der Steuerung: $$0 \le u(t) \le u_{\max}$$

Das singuläre Regelungsproblem:

Die Regelgröße (Temperatur): T

hohe Temperatur $\Rightarrow$ hohe Reaktionsrate

Aber wenn die Temperatur zu hoch ist, wird der Mechanismus der Fermentation zerlegt.

Exotherme Reaktion braucht Kühlung:

Die Stellgröße (Kühlungsstrom): u

Es wird gewünscht, die Temperatur an der maximalen Grenze zu halten:

$$T(u,t) = T_{\max} \qquad 0 \le u(t) \le u_{\max}$$

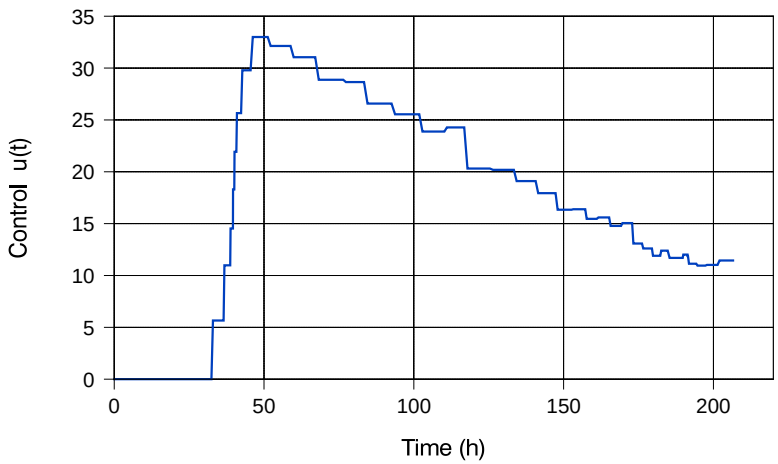
Diskretisierung mit: Drei-Punkte-Kollokation
40 Zeitintervalle in der Chargenzeit

Anzahl der Variablen nach der Diskretisierung:

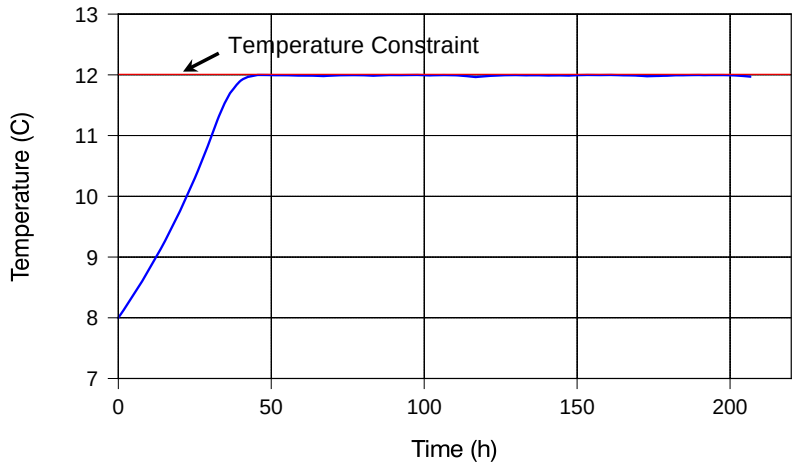
- 480 Zustandsvariablen
- 80 Steuervariablen

Ergebnisse der Optimierung:

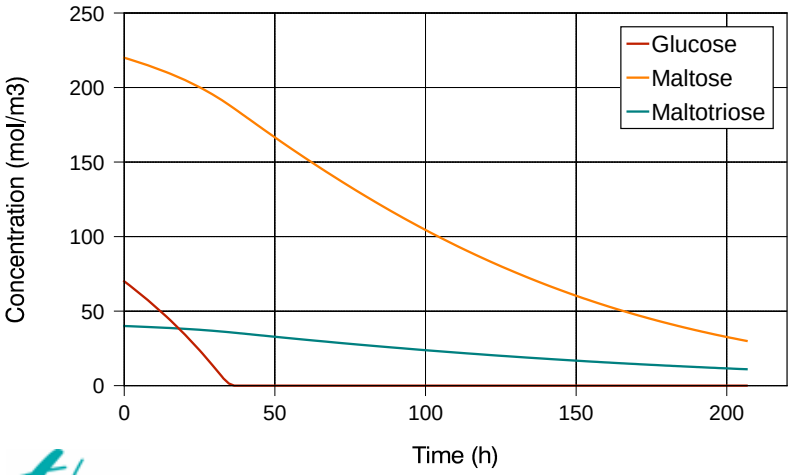
Optimal cooling policy ($u_{\max} = 40$)



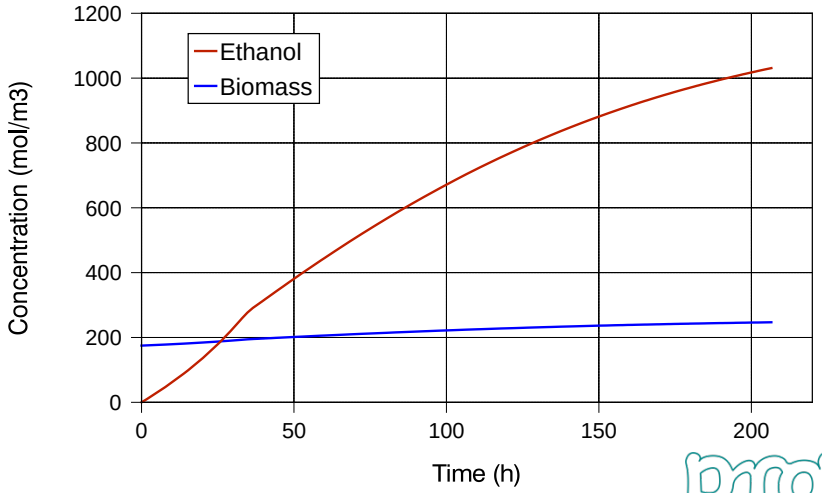
Optimal temperature profile ($u_{\max} = 40$)



Optimal profile of the sugar uptake



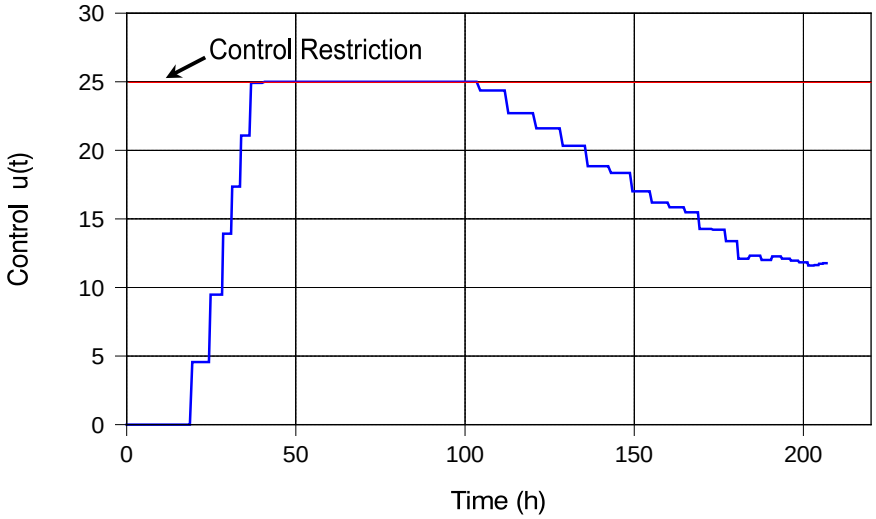
Optimal ethanol and biomass profiles



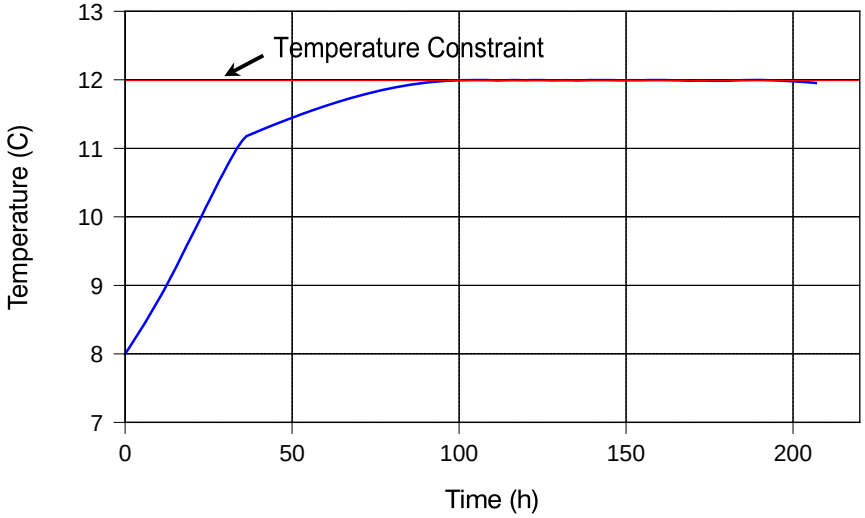
Fachgebiet Prozessoptimierung

Optimierungsergebnis mit starker Einschränkung der Steuervariable

Optimal cooling policy ($u_{\max} = 25$)



Optimal temperature profile ($u_{\max} = 25$)

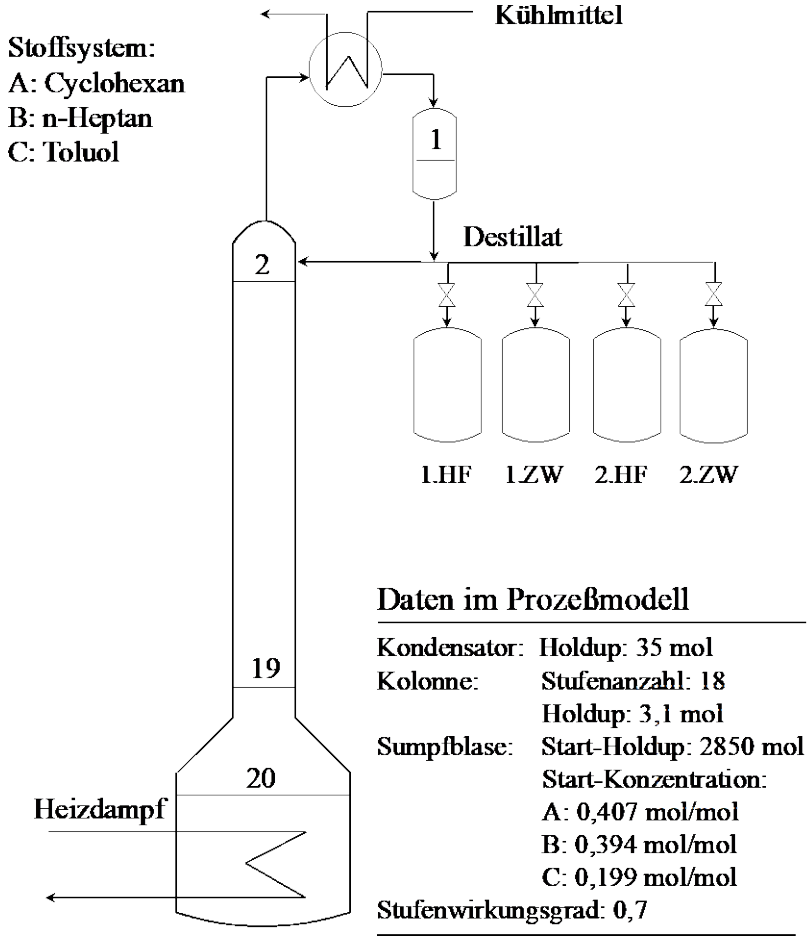


Optima bei verschiedenen Gewichtungsfaktoren

Gewichtungsfaktor (*w*)	2.0	3.0	4.0
Zielfunktional	617.7	434.2	286.2
End-Ethanol-Konzentration	1030.8	926.9	803.3
Totale Batch-Zeit (h)	206.6	164.2	129.3
Anzahl der Iterationen	30	27	23
CPU-Zeit (s)*	14.3	13.2	10.8

*** SUN ULTRA 1 Station (143 MHz)**

Optimierung der Pilotanlage für Batch-Destillation



Problemformulierung:

$$\max \text{Profit}(R_V, t_1, t_2, t_3, t_f)$$

$$= \max \left\{ \left[c_1 \mathbf{M}_1 + c_2 \mathbf{M}_2 + c_3 H_{NST}(t_f) - c_0 H_{NST}(t_0) \right] / t_f - c_4 \right\}$$

mit den Gleichungsnebenbedingungen (für jede Stufe):

Komponentenbilanz:	**M**
Phasengleichgewicht:	**E**
Summenbeziehung:	**S**
Energiebilanz:	**H**

und mit den Ungleichungsnebenbedingungen (Produktspezifikationen):

$$x_1^* \le \frac{\int_{t_0}^{t_1} \frac{V_2 x_{1,1}}{1+R_V} dt}{\int_{t_0}^{t_1} \frac{V_2}{1+R_V} dt} \le 1.0 \qquad x_2^* \le \frac{\int_{t_2}^{t_3} \frac{V_2 x_{1,2}}{1+R_V} dt}{\int_{t_2}^{t_3} \frac{V_2}{1+R_V} dt} \le 1.0$$

$$x_3^* \le x_{NST,3}(t_f) \le 1.0$$

Ergebnisse der Optimierung:

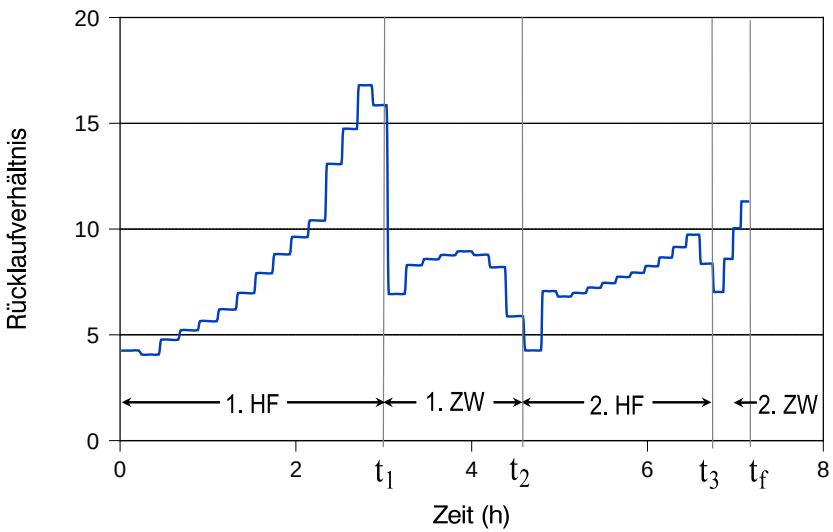
Fall 1:

Spezifikation (mol/mol):

$$X_1^* = 0{,}96 \quad X_2^* = 0{,}89 \quad X_3^* = 0{,}96$$

Profit: 4,68 €/h

Chargenzeit: 7,15 h



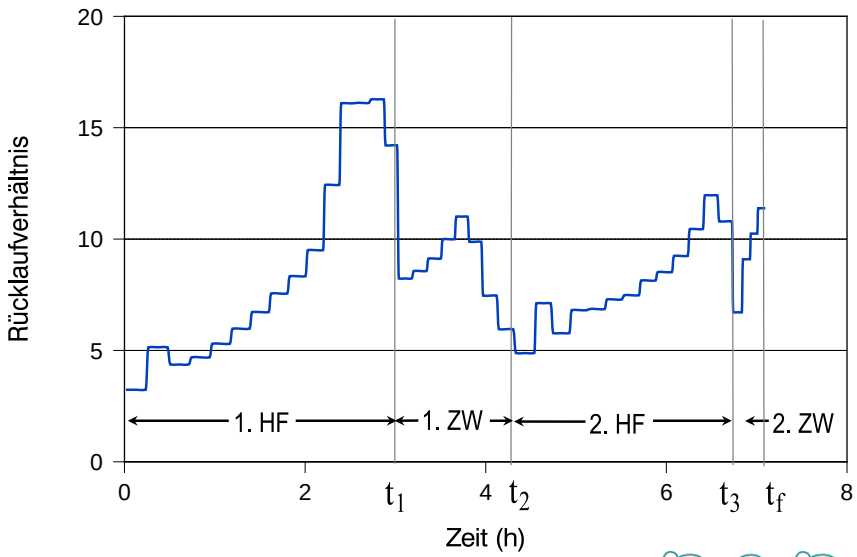
Fall 2:

Spezifikation (mol/mol):

$$X_1^* = 0{,}94 \quad X_2^* = 0{,}89 \quad X_3^* = 0{,}96$$

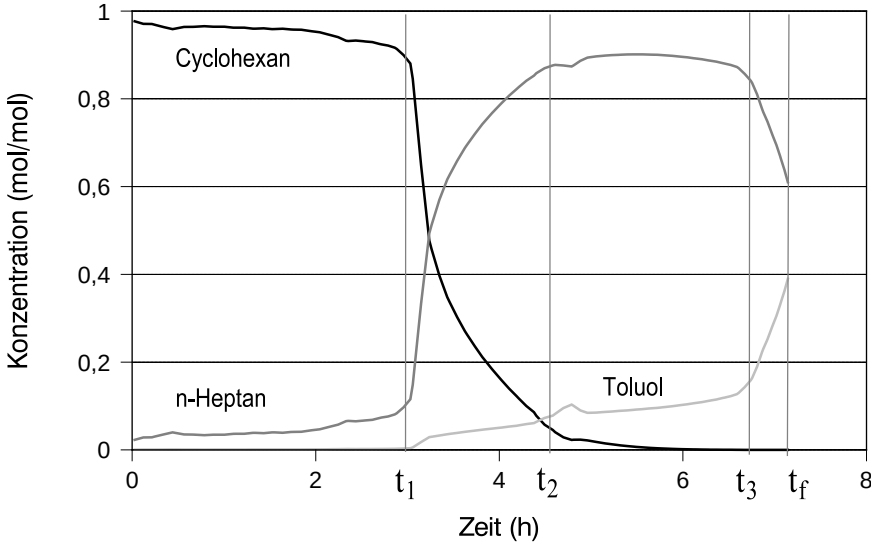
Profit: 7,09 €/h

Chargenzeit: 7,08 h

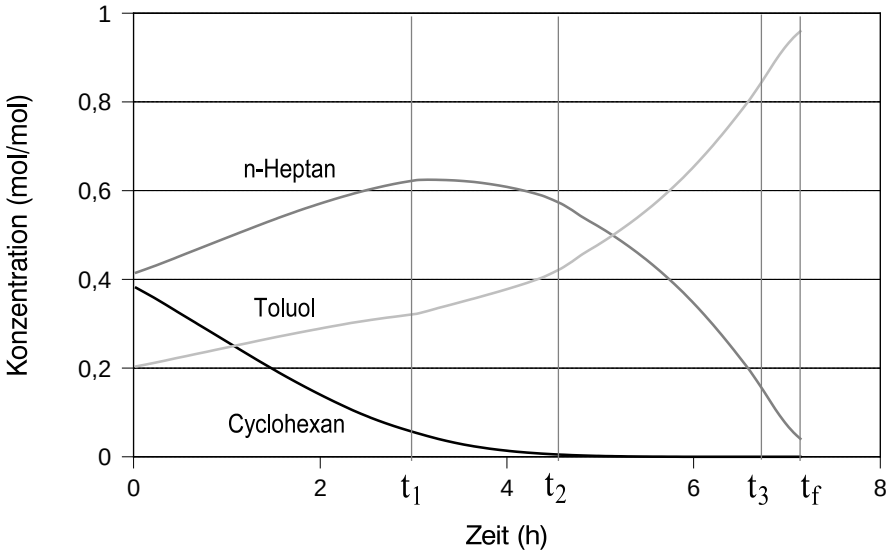


Konzentrationsverlauf während der Charge

Im Kondensator



In der Sumpfblase



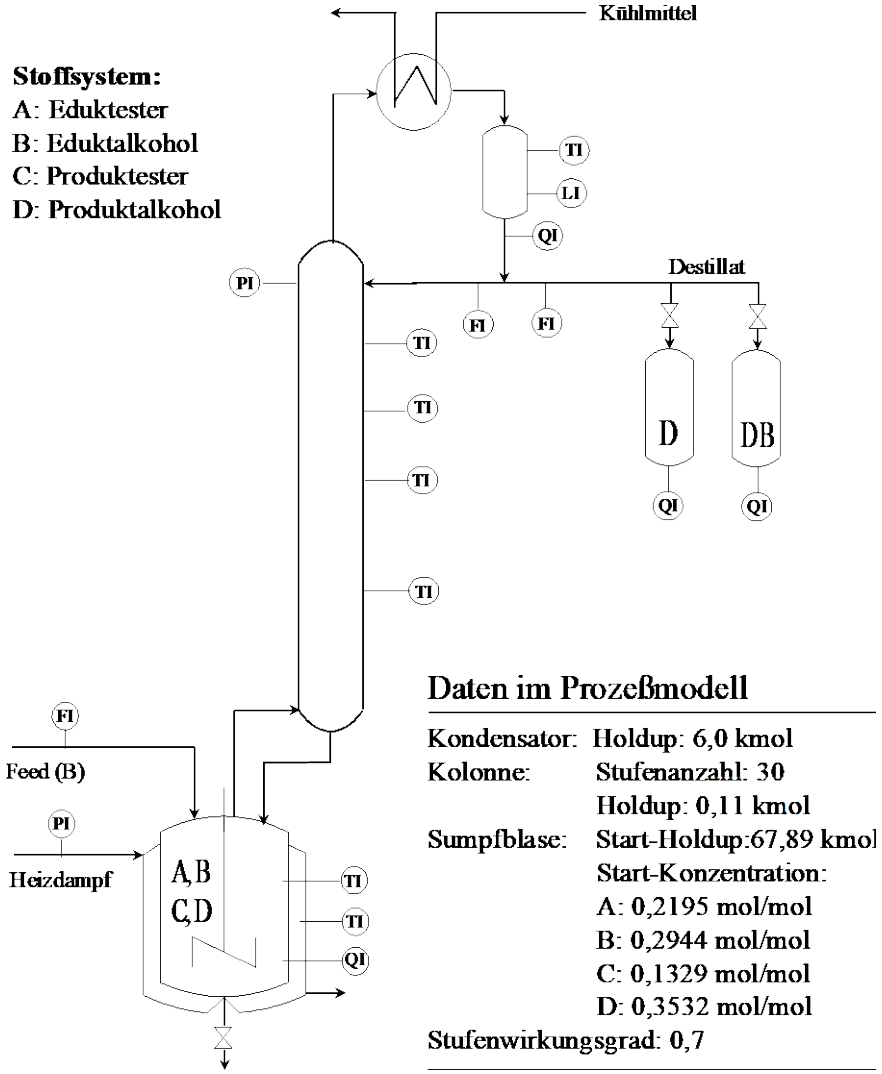
Optimierung eines industriellen Semibatch-Destillationsprozesses

Vorgehensweise:

- Prozessanalyse
- Modellierung
- Modellvalidierung
- Optimierung
- Realisierung

Führungsstrategie:

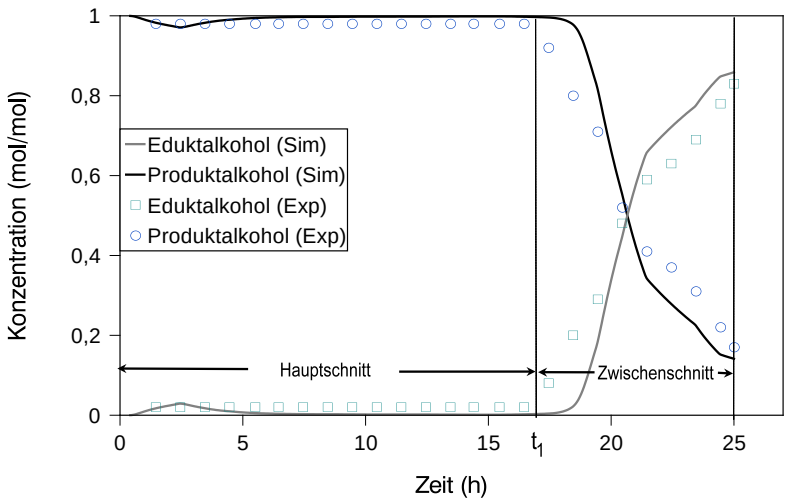
- Rücklaufverhältnis
- Feedstrom



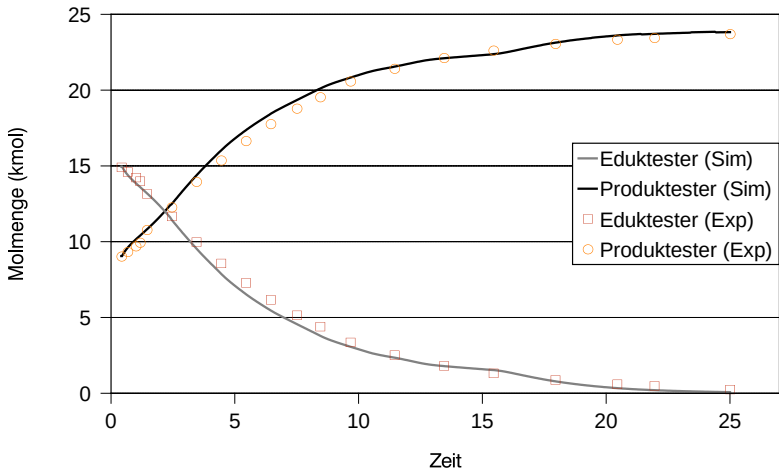
Destillation mit überlagerter Reaktion

$$\underset{A}{\text{Eduktester}} + \underset{B}{\text{Eduktalkohol}} \underset{k_R}{\overset{k_H}{\rightleftharpoons}} \underset{C}{\text{Produktester}} + \underset{D}{\text{Produktalkohol}}$$

Modellvalidierung durch Versuche an der Anlage



Kopfkonzentration (Alkohol)



Sumpfkonzentration (Ester)

Problemformulierung

Zielfunktion: $\min\ t_f\left(R_V(t), F_{NST}(t), t_1\right)$

mit den Gleichungsnebenbedingungen (für jede Stufe):

Komponentenbilanz:	**M**
Phasengleichgewicht:	**E**
Summenbeziehung:	**S**
Energiebilanz:	**H**

und mit den Ungleichungsnebenbedingungen für Produktspezifikationen:

$$x_{1,D}(t) \geq 0{,}98, \quad 0 \leq t \leq t_1$$

$$x_{NST,C}(t_f) \leq 0{,}002$$

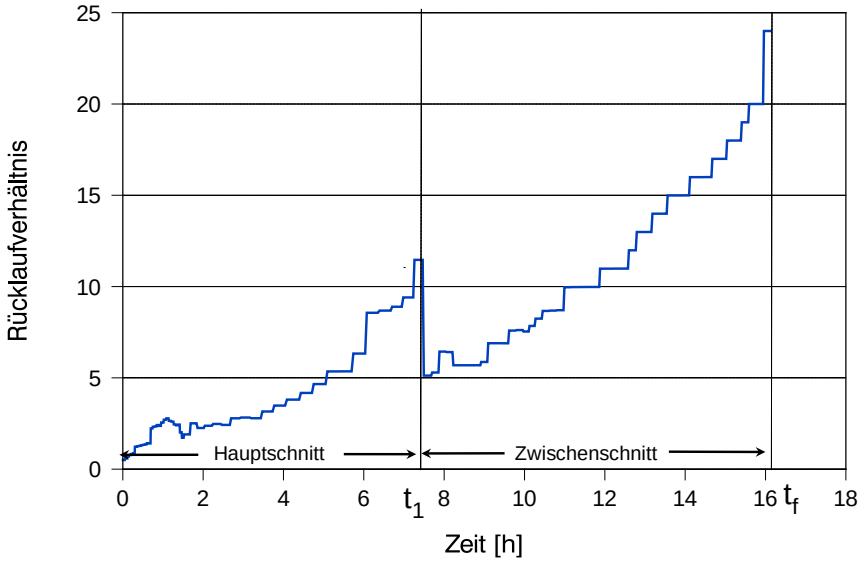
und für die physikalischen Randbedingungen des Feedstroms:

$$\int_0^{t_f} F_{NST}(t)dt \leq 20$$

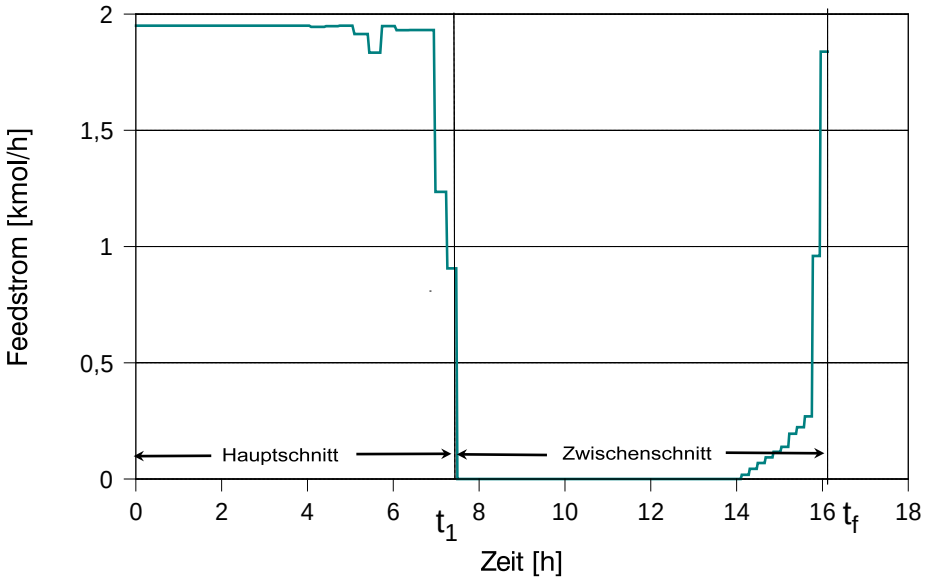
$$0 \leq F_{NST}(t) \leq 150$$

Ergebnisse der Optimierung

Rücklaufverhältnis



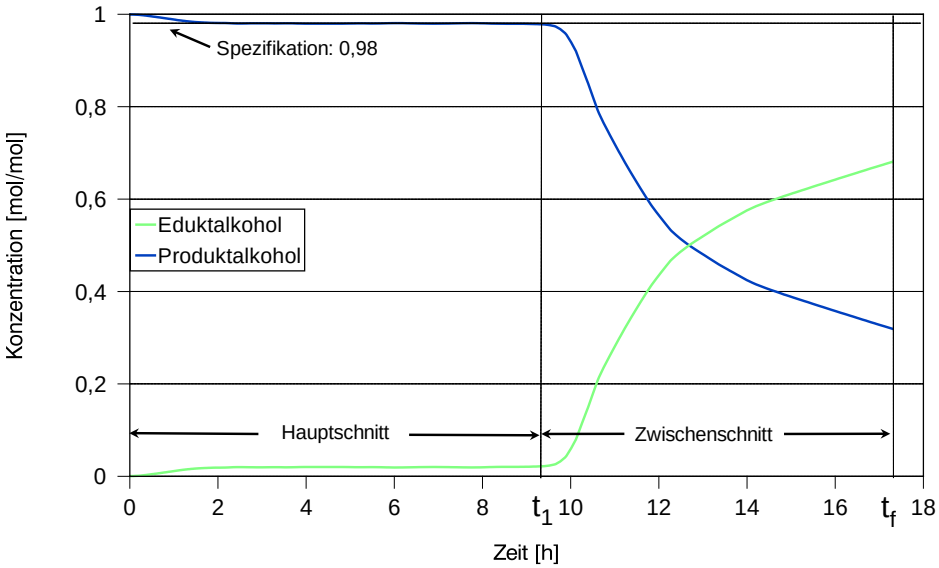
Feedstrom



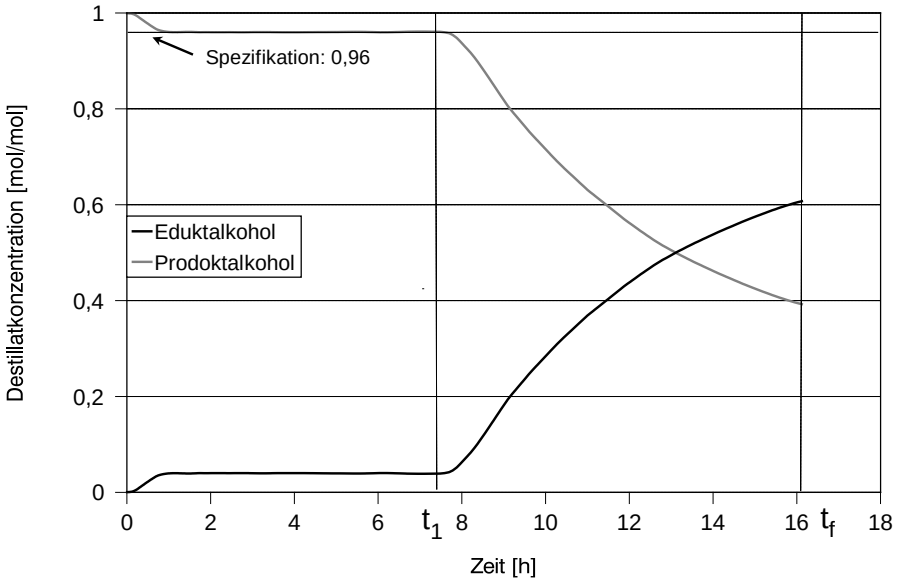
Ergebnisse der Optimierung

Kopfkonzentration (mol/mol)

Fall 1: $x_D = 0.98$



Fall 2: $x_D = 0.96$

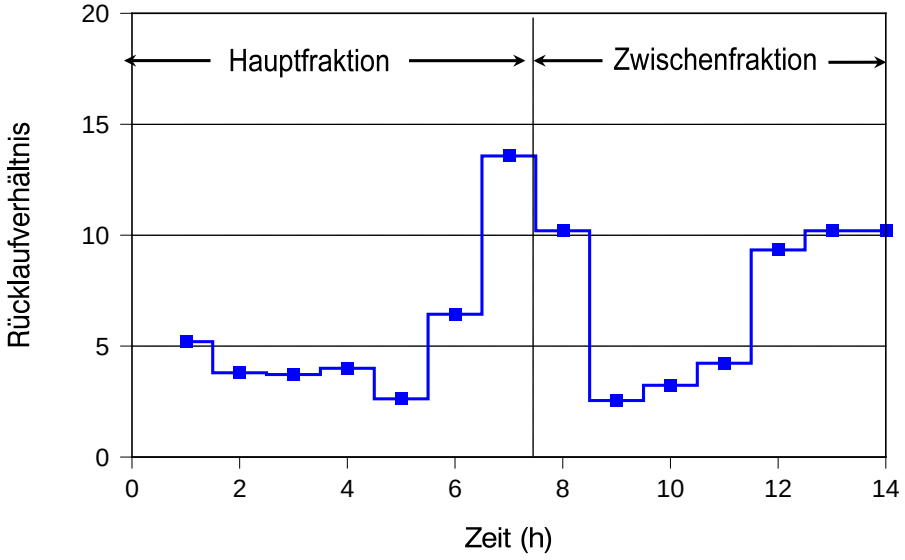


Ergebnisse der Optimierung

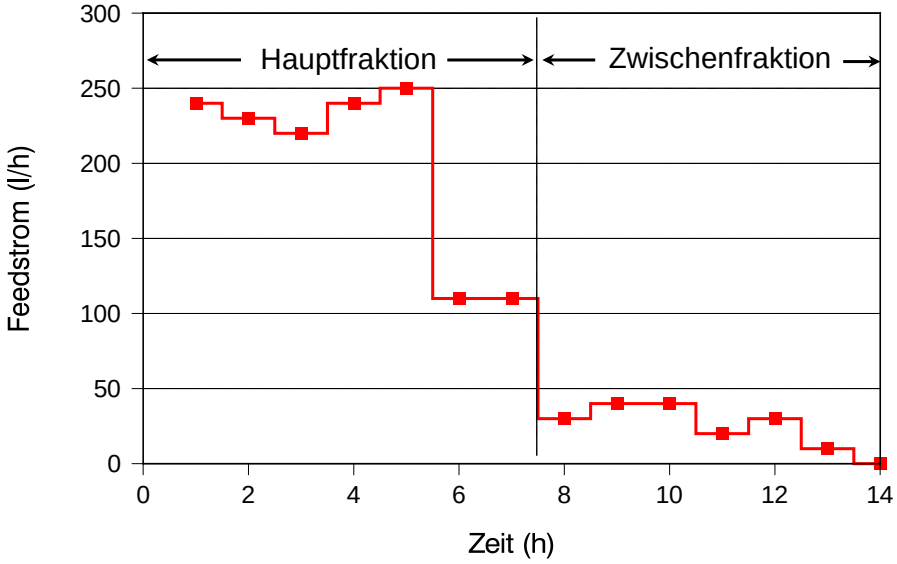
	Spezifikation (mol/mol)	Umschaltzeit (h)	Chargenzeit (h)
Konventionell	$x^*_{1,D}(t) = 0{,}98$ $x^*_{NST,C}(t_f) = 0{,}002$	$t_1 = 16{,}15$	$t_f = 25{,}12$
Fall 1	$x^*_{1,D}(t) = 0{,}98$ $x^*_{NST,C}(t_f) = 0{,}002$	$t_1 = 9{,}22$	$t_f = 17{,}39$
Fall 2	$x^*_{1,D}(t) = 0{,}96$ $x^*_{NST,C}(t_f) = 0{,}002$	$t_1 = 7{,}28$	$t_f = 16{,}16$

Realisierung an der Anlage

Rücklaufverhältnis

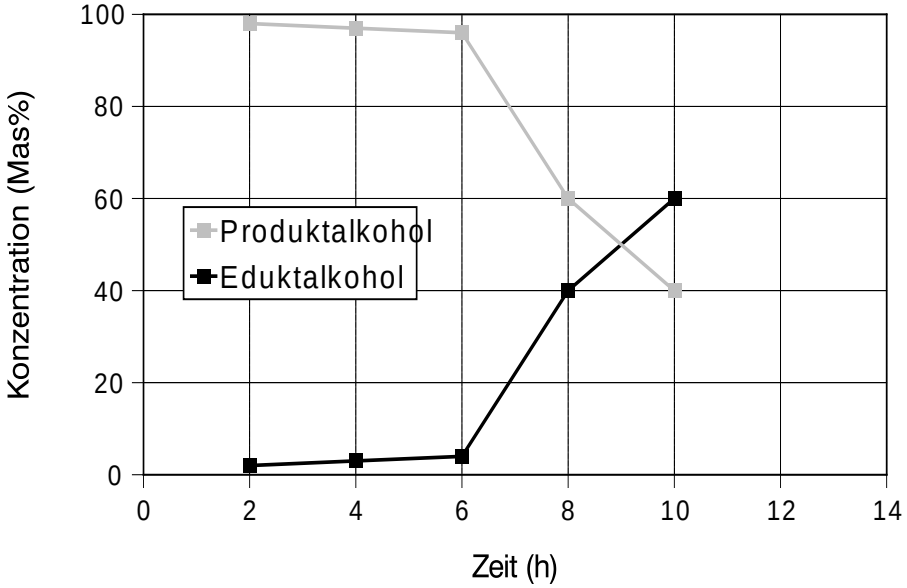


Feedstrom

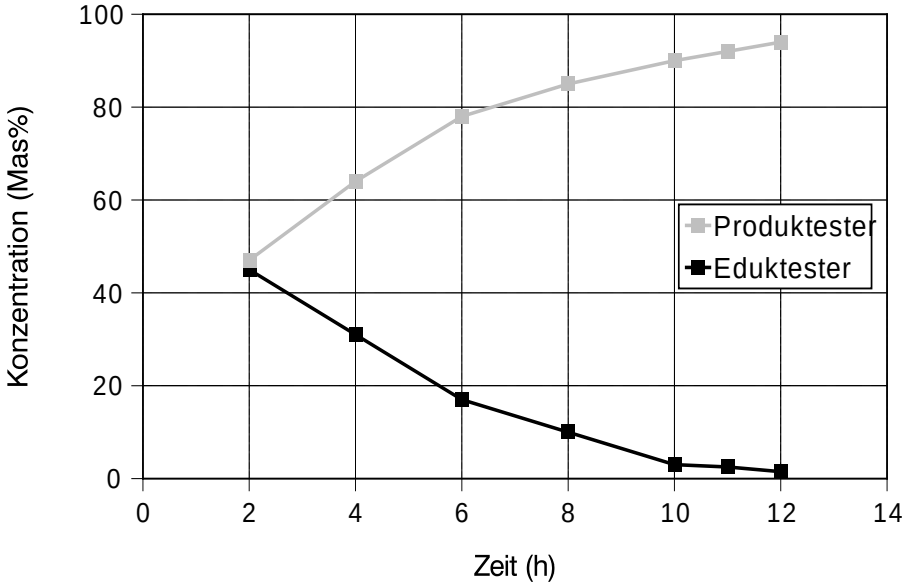


Realisierung an der Anlage

Kopfkonzentration (Alkohol)



Sumpfkonzentration (Ester)



Zusammenfassung

Dynamische Prozessoptimierung:

- **Modellierung (DAE-System)**
- **Diskretisierung mit orthogonaler Kollokation**
- **Simulation und Modellvalidierung**
- **Optimierung (simultane und sequentielle Methoden)**
- **Realisierung an der Anlage**