

# 管式反应炉最优温度剖面的 准最优解法与软件\*

陈阳泉

王高亮

(西安工业学院) (西安重型机器厂)

**【摘要】** 使用准最优解法通过对温度剖面曲线进行某种函数结构的参数化描述,使泛函极小问题转化为多变量参数极小问题,文中使用了三种形式的参数化描述结构和直接搜索算法,结果对比表明,需要对系统及控制有先验了解的基础上决定一个合适的参数化描述结构,才能使这种直观简单的方法更加有效,简介了通用求解软件并讨论了约束的加入方法,应用表明,本文方法及软件容易被面向实际的工程应用人员所接受,是解决一大类实际问题的有效途径.

**【关键词】** 最优剖面 准最优方法 参数最优化 仿真与静态优化一体化软件

**【中图分类号】** TP273.1 O224

## 1 问题的数学模型<sup>[1]</sup>

某管式反应炉沿其纵坐标  $l$  或以时间  $t$  为变量的化学反应取决于反应炉的加热温度剖面(图1) $\theta(l)$ 或 $\theta(t)$ .其化学反应动力学方程(系统方程)为:

$$\begin{cases} \dot{x}_1(t) = -K_1 x_1(t) \\ \dot{x}_2(t) = K_1 x_1(t) - K_2 x_2(t) \end{cases} \quad (1)$$

而

$$K_1 = K_{10} \exp\left(-\frac{E_1}{R\theta(t)}\right) \quad K_{10} = 0.892 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$$

$$E_1 = 75.362 \text{ kJ/mol} \quad K_2 = K_{20} \exp\left(-\frac{E_2}{R\theta(t)}\right)$$

$$K_{20} = 0.768 \times 10^{16} \text{ s}^{-1} \quad E_2 = 125.604 \text{ kJ/mol}$$

其中,  $x_1(t)$ ,  $x_2(t)$  是管式反应炉中两个相互化学反

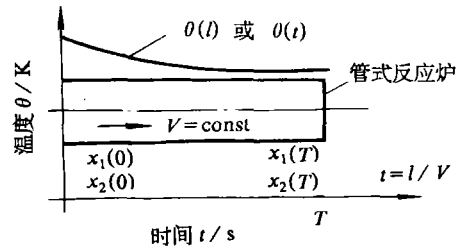


图1 管式反应炉的温度剖面

\* 1993-03-29 收稿

应产品的浓度. 反应炉中的质量流速  $v$  为常数, 而且常数  $R=8.374 \text{ J/mol} \cdot \text{K}$ . 反应炉输入端的初值为  $x_1(0)=0.53 \text{ mol/L}; x_2(0)=0.43 \text{ mol/L}$ . 任务是决定最优的反应炉温度剖面  $\theta(t)$ , 使产品  $x_2$  的浓度在反应炉输出端极大. 已知反应炉的输出对应时间  $T=480 \text{ s}$ , 温度剖面  $\theta(t)$  采用 Kelvin 温标 K, 状态与控制无约束. 指标泛函可写作

$$J(\theta) = -x_2(T) \quad (2)$$

## 2 准最优解法

与传统的最优控制问题的 Ritz 近似解法思想相近, 本文将控制函数  $\theta(t)$  以某种确定的函数结构进行参量化描述, 这样, 泛函数极小问题转化为多变量参数寻优问题. 准最优解法的原理见图 2.

为便于比较, 本文  $\theta(t)$  采用了三种参数化描述结构, 即第一类切比雪夫多项式, 亏数为 2 和 3 的分段三次样条函数.

### 2.1 第一类切比雪夫多项式

由于切比雪夫多项式的递推性和正交性, 使它比一般多项式更加实用. 已知在  $[-1, +1]$  上的第一类切比雪夫多项式为

$$\begin{aligned} T_0(t) &= 0, & T_1(t) &= t, & T_2(t) &= -1 + 2t^2 \\ T_n(t) &= 2t T_{n-1}(t) - T_{n-2}(t) \end{aligned} \quad (3)$$

对于  $t \in [t_0, t_f]$ , 则应作变换

$$t^* = 2 \cdot \frac{t - t_0}{t_f - t_0} - 1 \quad (4)$$

使  $t^* \in [-1, +1]$ , 此时

$$\begin{cases} T_0(t) = 0 \\ T_1(t) = 2 \cdot \frac{t - t_0}{t_f - t_0} - 1 \\ T_n(t) = 2(2 \cdot \frac{t - t_0}{t_f - t_0} - 1) T_{n-1}(t) - T_{n-2}(t) \end{cases} \quad (5)$$

则

$$\theta(t) = \sum_{i=0}^m c_i T_i(t) \quad (6)$$

### 2.2 亏数为 2 的分段三次样条函数

当控制函数  $\theta(t)$  形态较复杂时, 切比雪夫多项式描述就需要很高的阶次. 为克服数值计算误差, 减少寻优参数个数, 增加参数化描述的机动性, 使用低度光滑的分段三次样条多项式是一条实用可行的途径.

对  $t \in [t_0, t_f]$  分为  $m$  段,  $m+1$  个分段节点为  $t_0=t_1 < t_2 < \dots < t_m < t_{m+1} = t_f$ , 亏数等于样条多

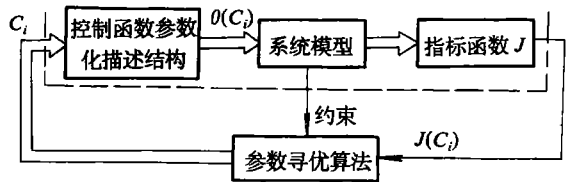


图2 最优控制问题的准最优解法原理

项式的阶次与内节点  $t_j (j=2, 3, \dots, m)$  处连续导数的最高阶次之差. 使用亏数为 2 的分段三次样条来描述  $\theta(t)$ , 则  $\theta(t) \in C^1 [t_0, t_f]$ . 计及内节点处的  $2m-2$  个等式约束, 这种描述的独立参数个数为  $4m-(2m-2)$  即  $2m+2$  个. 取为

$$C^T = [c_1, c_2, \dots, c_{2m+2}] \quad (7)$$

且  $c_{2i-1}=f_i, c_{2i}=d_i \quad (i=1, 2, \dots, m+1)$

其中  $f_i, d_i$  为节点  $t_i$  处的  $\theta(t)$  函数值和一阶导数值. 考察  $t \in [t_i, t_{i+1}]$ , 知由参数  $f_i, d_i, f_{i+1}, d_{i+1}$  可唯一决定一个三次多项式, 记作  $\theta_i(t)$ , 可以写成

$$\begin{aligned} \theta_i(t) &= [\gamma_1(\tau_i), \gamma_2(\tau_i), \gamma_3(\tau_i), \gamma_4(\tau_i)] [f_i, d_i, f_{i+1}, d_{i+1}]^T \\ &= [\alpha_{1i}, \alpha_{2i}, \alpha_{3i}, \alpha_{4i}] [1, t, t^2, t^3]^T \\ &= [\beta_{1i}, \beta_{2i}, \beta_{3i}, \beta_{4i}] [1, \tau_i, \tau_i^2, \tau_i^3]^T \end{aligned} \quad (8)$$

其中  $\tau_i = (t-t_i)/h_i, h_i = t_{i+1}-t_i$ . 显然,  $\tau_i \in [0, 1]$ , 容易得到

$$A_1 [\beta_{1i}, \beta_{2i}, \beta_{3i}, \beta_{4i}]^T = [f_i, d_i, f_{i+1}, d_{i+1}]^T \quad (9)$$

其中,

$$A_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & h_i^{-1} & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & h_i^{-1} & 2h_i^{-1} & 3h_i^{-1} \end{bmatrix} \quad \text{且} \quad A_1^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & h_i & 0 & 0 \\ -3 & -2h_i & 3 & -h_i \\ 2 & h_i & -2 & h_i \end{bmatrix}$$

那么,

$$\begin{bmatrix} \gamma_1(\tau_i) \\ \gamma_2(\tau_i) \\ \gamma_3(\tau_i) \\ \gamma_4(\tau_i) \end{bmatrix}^T = [1, \tau_i, \tau_i^2, \tau_i^3] \quad A_1^{-1} = \begin{bmatrix} 1 - 3\tau_i^2 + 2\tau_i^3 \\ h_i(\tau_i - 2\tau_i^2 + \tau_i^3) \\ 3\tau_i - 2\tau_i^3 \\ h_i(-\tau_i^2 + \tau_i^3) \end{bmatrix}^T \quad (10)$$

而且

$$[\beta_{1i}, \beta_{2i}, \beta_{3i}, \beta_{4i}]^T = A_2 [a_{1i}, a_{2i}, a_{3i}, a_{4i}]^T \quad (11)$$

其中,

$$A_2 = \begin{bmatrix} 1 & t_i & t_i^2 & t_i^3 \\ 0 & h_i & 2h_i t_i & 3h_i t_i^2 \\ 0 & 0 & h_i^2 & 3h_i^2 t_i \\ 0 & 0 & 0 & h_i^3 \end{bmatrix} \quad \text{且} \quad A_2^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & -h_i^{-1} t_i & h_i^{-2} t_i^2 & -h_i^{-3} t_i^3 \\ 0 & h_i^{-1} & -2h_i^{-2} t_i & 3h_i^{-3} t_i^2 \\ 0 & 0 & h_i^{-2} & -3h_i^{-3} t_i \\ 0 & 0 & 0 & h_i^{-3} \end{bmatrix}$$

### 2.3 亏数为 3 的分段三次样条函数

当控制函数  $\theta(t)$  含有明显的尖点时, 应使用亏数为 3 的分段三次样条函数来描述  $\theta(t)$ , 此时  $\theta(t)$  连续但不一定光滑,  $\theta(t) \in C^0 [t_0, t_f]$ . 独立描述参数个数为  $4m-(m-1)=3m+1$ . 设第  $i$  段首末节点  $t_i, t_{i+1}$  处的一阶导数值为  $d_{1i}, d_{2i}$ , 则内节点  $t_i$  处的左右导数分别为  $d_{2,i-1}$  和  $d_{1,i}$ . 它们不一定相等. 取参数向量为

$$\begin{aligned} C^T &= [c_1, c_2, \dots, c_{3m+1}] \\ c_i &= f_i \quad (i=1, 2, \dots, m+1) \end{aligned} \quad (12)$$

$$c_{m+2i} = d_{1,i}, \quad c_{m+2i+1} = d_{2,i} \quad (i=1, 2, \dots, m)$$

对于  $t \in [t_i, t_{i+1}]$ , 参见 2.2 节的讨论

$$\theta_i(t) = [y_1(\tau_i), y_2(\tau_i), y_3(\tau_i), y_4(\tau_i)] [f_i, d_{1,i}, f_{i+1}, d_{2,i}]^n \quad (13)$$

上面介绍的三种参数化描述结构可以满足多数的实际应用场合的需要. 本文采用上述三种参数化描述结构对温度剖面  $\theta(t)$  进行描述. 后面的计算结果对比显示, 不合适的描述结构将导致收敛很慢, 合适的描述结构的选用依赖于对系统及控制的先验了解知识.

### 3 通用求解软件 PSOSP

基于图 2 的最优控制问题的准最优解法原理, 作者在 ZFX<sup>[2]</sup> 的基础上二次开发构成了通用的最优控制问题准最优解法中型软件 PSOSP, 与文献[3]中的最优控制问题直接数值解法软件不同. PSOSP 的最大特点是解决最优控制问题不需用户编写任何用户子程序与应用软件相连接再运行. 这借助了 ZFX 中的基于模型库的系统构造方法及自动排序运算方法, 使得图 2 中的“系统模型”和“指标函数”两框完全可以由模型库中的有关模型块组合连接来完成. 用户只需按规定编写输入数据文件即可. 熟悉 ZFX 一类软件的用户是很容易学会使用 PSOSP 的. PSOSP 另一特色在于全自动化图形显示, 即不需要任何用户干预仅根据数据就可自动绘出符合通常习惯的便于量取读图的图形. 详细的介绍见文献[4].

“参数寻优算法”框采用了三大类共 13 种无约束多变量寻优算法<sup>[3]</sup>. 即直接搜索类 5 种: Hooke-Jeeves 法, Rosenbrock 法, Davies-Swan-Campey 法, Powell 法和单纯形法; 共轭梯度类 5 种: Fletcher-Reeves 法, Polak-Ribiere 法, Beale-Powell 法, Scaled FR 法和 Partan 法; 变尺度类 3 种: Davidon-Fletcher-Powell 法, Broyden-Fletcher 法和混和法. 统一构造优化方法库和仿真的软件接口, 取消了原 ZFX 对优化的种种限制, 可以指定任一模块中的某些参数或初值作为优化参量, 使优化参量的个数达到 50 且增加优化参量个数仅仅是在计算机内存允许条件下对一些数组进行扩维即可.

“控制函数参数化描述结构”框也可以由模型库中的模块组合来完成. 为方便用户, 仍然设置了一些通用的参数化描述结构, 如直线插值及上面介绍的三种描述结构形式. PSOSP 对控制函数参数化描述结构的丰富性, 足可以适合广泛的应用场合. 推荐使用低度光滑的三次样条函数, 它们的描述机动性强, 独立描述参数相对较少, 而且可直接给出分段多段式各系数, 便于控制实施.

尽管本文的最优控制问题是无约束的, 但多数的实际问题总是受约束的. 与文献[1]的做法不一样, 本文考虑软件的通用性与成熟性, 没有在参数寻优算法中考虑约束. PSOSP 中采用两种途径来考虑约束, 一是对控制函数  $\theta(t)$  的直接约束, 另一种方法是采用惩罚函数的形式. 对  $\theta(t)$  的直接受约束可以在图 2 中的“系统模型”框前直接加入模型库中的某些非线性环节来实现, 例如, 对于约束  $a < \theta(t) < b$ , 可加入不对称饱和和特性模块来实现, 即:

$$\theta(t) = \begin{cases} a, & \theta(t) < a \\ \theta(t), & \theta(t) \in [a, b] \\ b, & \theta(t) > b \end{cases} \quad (14)$$

采用惩罚函数的方法可以考虑更广泛的一类约束, 设为

$$g(t, \theta(t), X(t)) \leq 0, \quad g \in R \quad (15)$$

可令

$$\mathcal{J}(\theta) = J(\theta) + \int_{t_0}^{t_f} \sum_{j=1}^r N(g_j) \cdot g_j^2(t, \theta(t), X(t)) dt \quad (16)$$

其中

$$N(g_j) = \begin{cases} 0 & g_j(t, \theta(t), X(t)) \leq 0 \\ K_j & g_j(t, \theta(t), X(t)) > 0 \end{cases} \quad (17)$$

$$K_j > 0, \quad (j = 1, 2, \dots, r)$$

$K_j$  为惩罚强度系数,可以适当取大一些.

(16), (17) 式也可以由模型库中的某些模块组合来构造. 实践表明,这两种约束加入方法都是可行的,但建议使用惩罚函数的方法<sup>[5]</sup>.

需要指出的是,由于 PSOSP 强调了模型库中各模型块的重复使用次数的概念,完全可以解决控制为向量的问题.

ZFX 包含了文献[6]的所有工作,亦具有求解最优控制问题的两点边值试射解法功能. 但当状态方程与协态方程不能显式解耦时或问题为奇异最优控制问题时,控制函数不能显式地为状态变量的函数关系. 此时最优控制问题不能直接转化为两点边值问题(TPBVP),而且由于不能考虑约束条件,这就大大缩小了可解问题范围. 此外,由于 PSOSP 有效的主程序调度与管理,寻优过程也可以采取“粗精结合”的策略以大幅度地减少寻优时间. 所谓“粗精结合”,即先在系统稳定积分步长域内采用较大的积分步长对系统参数粗寻优,待指标大幅度下降到一定程度时,再采用能保证精度要求的适当的小步长对系统参数进行精寻优. 这也是 PSOSP 的一个优点. PSOSP 在人机交互方面采取了较强的用户友好设计,如每当需用户交互时都有详细的“用户动作指南”对非希望的用户响应的纠正指导以及丰富的出错信息提示等. 输出管理采用了屏幕显示、文档文件输出和图形显示的相互独立的输出频率控制方式. 考虑到寻优时间较长的特点,PSOSP 在本次终止运行时都将下次继续运行时的必要信息存储,便于用户对较复杂问题的分次间隔运行求解.

总之,PSOSP 已经构成了比较实用的系统仿真与静动态优化通用集成型软件.

## 4 数值结果

为便于进行比较,所有运行均采用 RK-4 定步长积分. 使用单纯型搜索,  $\theta_0(t) = 250$  K. 利用 PSOSP 的 TPBVP 自动求解功能得到一个标准解作为参照,在 PSOSP 中,35 号模块为切比雪夫多项式;36 号模块为亏数 2 的 3 次样条;37 号模块为亏数 3 的 3 次样条;38 号模块为折线(亏数 1 的 1 次样条). 附表为不同描述结构下的收敛结果对比. 从表中看出,TPBVP 的最优指标最好,比[1]中的结果还要好. 对于 36, 37 号模块,  $m=2$  的情形,从图 3 可见,最佳的  $\theta(t)$  近似为二次曲线,这两种描述显得参数冗余,容易收敛到局部极点. 35( $m=2$ ), 36( $m=1$ ) 及 38( $m=2$ ) 号的收敛结果均

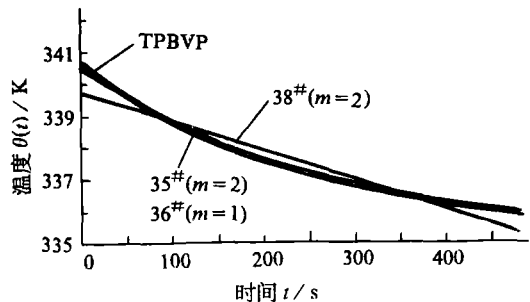


图 3 最佳温度剖面求解结果对比

可以接受,但 38( $m=3$ )号收敛为局部极值点.这充分说明了这种准最优方法对控制剖面的参量化描述要求是有限制的,它需要对控制剖面有一定的先验了解.图 4 为各种方案的对比,可知描述参数冗余的结局.图 5 为 TPBVP,35,36 号的状态轨迹对比,几乎没有差别.

附表 不同描述结构下的收敛结果对比

方法	最优指标	单纯形搜索次数	最优参数	备注
TPBVP	0.679568		$\lambda_1(0)=-0.610163$ $\lambda_2(0)=-0.828283$	$\lambda_1(T)=0$ $\lambda_2(T)=-1$
35 <sup>#</sup>	0.6795633	319	$c_0=337.7224$ $c_1=-2.218744$ $c_2=0.5198303$	$m=2$
36 <sup>#</sup>	-0.579796	312	局部极点,略	$m=2$
	-0.6795663	673	$c_1=340.7198, c_2=-0.024$ $c_3=335.8175, c_4=-0.00588$	$m=1$
37 <sup>#</sup>	-0.6261691	615	局部极点,略	$m=2$
38 <sup>#</sup>	0.6795282	132	$c_1=339.7773, c_2=335.3415$	$m=2$
	-0.6594201	210	$c_1=337.1225$ $c_2=344.8214$ $c_3=301.3522$	$m=3$

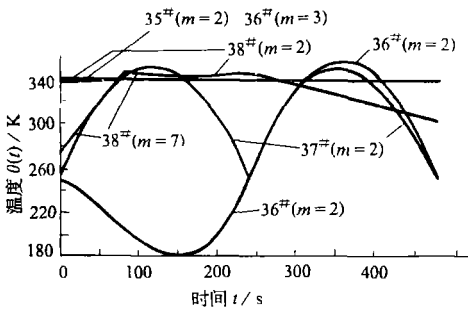


图 4 各种描述方案的结果对比

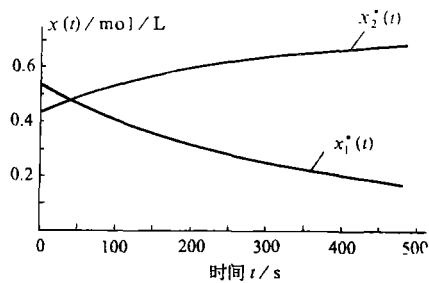


图 5 最优状态轨迹对比

## 5 结论

使用适当的参数化描述结构和仿真与静态优化一体化软件 PSOSP,基于直接搜索优化算法,可在不需使用者编写一句程序的情况下,有效地解决一大类的最优控制问题.

## 参 考 文 献

- 1 [联邦德国]H G 稚可普著. 静态和动态计算机辅助优化法. 邓建华译. 西安:西北工业大学出版社,1988.
- 2 韩慧君编. 系统仿真. 北京:国防工业出版社,1985.
- 3 叶庆凯,王肇明编著. 优化与最优控制中的计算方法. 北京:科学出版社,1986.
- 4 陈阳泉,窦惠芳. 带约束多段异次多项式数据拟合算法与软件. 气动实验与测量控制,1991(3)
- 5 陈阳泉,王高亮. 塔式起重机最优定位问题的直接参数化最优解法. 系统工程与电子技术,1992(7)
- 6 马纪虎等. 扩展 CSS 仿真程序及其应用. 信息与控制,1983(4)

## Suboptimal Method and Software for the Solution of Optimal Temperature Profile

*Chen Yangquan      Wang Gaoliang*

### Abstract

The suboptimal method of this paper applies some definite function structures to parametrically describe the temperature profile which converts the functional minimization problem to multivariable parametric minimization problem. Three kinds of function structure for parameterization description of control function and the direct searching algorithm for multivariable minimization are used. The comparative results indicate that only proper parameterization description structures based on the *a priori* knowledge of the system and the control can make this direct and simple method more effective. The solution software for general purpose are briefly introduced and the practical constraints considerations are discussed. Applications show that the method and software of this article are more easily acceptable by active engineers and can solve a bulk of relevant practical problems more effectively without any user programming.

**Keywords:** optimal profile      suboptimal method      parametric optimization  
integrated software for simulation and static/dynamic optimization