

Textové zadání příkladů

Softwarová podpora předmětu Optimalizace inženýrských procesů - N413011/M413005

Autoři: prof. RNDr. Milan Kubíček, CSc.
Ing. Jiří Kolář

Ústav matematiky (413)

1 Extrémy funkcí reálných proměnných (volný extrém)

1.1 Fitování experimentálních dat (rovnováha kapalina-pára)

Krásnou ukázkou neomezené nelineární optimalizace je fitování modelu na experimentální data. Při mnoha aplikacích v chemickém inženýrství je potřeba znalost rovnováhy mezi kapalinou a párou. Pro binární směsi, které se nechovají ideálně lze tuto rovnováhu popsat pomocí van Laarova modelu:

$$x_i \gamma_i p_i^{\text{sat}} = y_i p, \quad \text{pro } i = 1, 2, \quad (1)$$

$$\ln(\gamma_1) = A_{12} \left(\frac{A_{21} x_2}{A_{12} x_1 + A_{21} x_2} \right)^2, \quad (2)$$

$$\ln(\gamma_2) = A_{21} \left(\frac{A_{12} x_2}{A_{12} x_1 + A_{21} x_2} \right)^2, \quad (3)$$

$$(4)$$

kde pro každou složku i máme p_i parciální tlak, p_i^{sat} tlak nasycených par a x_i , y_i molární zlomek v kapalně a plynné fázi. Parametry A_{12} , A_{21} jsou příslušné van Laarovy koeficienty charakterizující danou binární směs. Tyto koeficienty lze pro porovnání nalézt také v mnoha tabulkách (Gmehling, 1981) [1]. Pro celkový tlak tedy musí platit:

$$p = y_1 p + y_2 p \quad (5)$$

$$p = x_1 \exp \left(A_{12} \left(\frac{A_{21} x_2}{A_{12} x_1 + A_{21} x_2} \right)^2 \right) p_1^{\text{sat}} + x_2 \exp \left(A_{21} \left(\frac{A_{12} x_2}{A_{12} x_1 + A_{21} x_2} \right)^2 \right) p_2^{\text{sat}} \quad (6)$$

Závislost tlaku nasycených par na teplotě popisuje například z Antoineva rovnice:

$$\log(p_i^{\text{sat}}) = A - \frac{B}{C + T}, \quad (7)$$

kde příslušné koeficienty A , B , C lze nalézt na <http://uchi.vscht.cz/uploads/etabulky/antoine.html>.

Vášim úkolem bude nalézt van Laarovy koeficienty pro binární směsi za konstantního tlaku:

1. heptan-oktan
2. benzen-toluen
3. ethanol-n-butanol
4. ethanol-furfural

5. ethanol-voda

6. methanol-voda

Příslušné experimentální data jsou dostupné na: <http://uchi.vscht.cz/index.php/cs/studium/navody-a-pomucky/e-tabulky>, nebo případně v příloze zadání. Data uvádějí složení kapalně a parní fáze v rovnováze za atmosférického tlaku.

Úlohu řešte jako problém nelineární optimalizace, kdy objektovou funkci definujeme pomocí rozdílu čtverců odchylek mezi modelem a experimentálními daty.

$$f(x, A_{12}, A_{21}) = \sum_{j=1}^N (y^{\text{model}}(x_j, A_{12}, A_{21}) - y^{\text{exp}}(x_j))^2, \quad (8)$$

kde x_j jsou molární zlomky složky 1 v kapalně fázi a y^{model} , y^{exp} příslušné molární zlomky složky 1 v parní fázi.

Při výpočtu je nutné znát teplotu varu směsi, tu odhadněte pomocí vztahu (6), kde celkový tlak bude $p = 101325$ Pa, řešte metodou půlení intervalů mezi teplotami varu čistých složek.

Úkoly:

1. Nalezněte minimum objektové funkce pomocí Newtonovy nebo Gradientní metody.
2. Jako počáteční nástřel volte $[A_{12}, A_{21}] = [1, 1]$.
3. Uveďte jejich výhody a nevýhody a vyzkoušejte použití obou metod zároveň.
4. Výslednou odchylku fitování modelu od experimentálních dat srovnajte s fitováním pomocí polynomu 3. a 6. řádu. A výsledky zobrazte v diagramu x-y.

Pozn. Pozornost věnujte zejména rovnováze methanol-voda, ethanol-furfural a benzen-toluen, okomentujte jak dobře konverguje Newtonova, Gradientní metoda a jejich kombinace v těchto případech.

1.2 Optimalizace modelu lyofilizace

Lyofilizace je alternativní metodou sušení pro látky, které se při zvýšené teplotě mohou znehodnocovat. Své uplatnění tak nachází především ve farmácii a potravinářském průmyslu. Materiál je při tomto procesu ochlazen na nízkou teplotu a za sníženého tlaku dochází k sublimaci zmrazeného rozpouštědla.

Různé materiály se vyznačují různou kinetikou sušení, my si nyní definujeme jednoduchý model lyofilizace a pokusíme se z experimentálních dat určit parametry modelu. Lyofilizace se obvykle provádí v malých vialkách umístěných po skupinách v lyofilizátoru. První aproximací procesu je, že led sublimuje postupně po vrstvách a daný časový okamžik probíhá transport hmoty pouze na ploše definované průřezem vialky. Hybnou silou sublimace je rozdíl tlaků nasycených par a okolního tlaku. Diferenciální hmotnostní bilanci lyofilizace pak můžeme zapsat jako:

$$\frac{dm}{dt} = A_p \frac{p_{\text{sat}} - p_0}{R_p(h)}, \quad (9)$$

kde A_p je plocha vnitřního průřezu vialky, p_{sat} tlak nasycených par, p_0 okolní tlak a $R_p(h)$ je odpor již suchého materiálu vůči transportu hmoty, závisí tedy na aktuální pozici rozhraní ledu a již suchého materiálu. $R_p(h)$ očekáváme v následujícím tvaru:

$$R_p(h) = R_0 + \frac{A_1 h}{1 + A_2 h}, \quad (10)$$

parametry R_0 , A_1 , $A_2 \geq 0$ definují rychlost a průběh sublimace. Teplo spotřebované na skupenskou přeměnu je dodáváno z podložky udržované při konstantní teplotě, enthalpická bilance tedy bude vypadat následovně:

$$\frac{dH}{dt} = \Delta H_{\text{sub}} \frac{dm}{dt} - A_v K_v(x)(T_s - T), \quad (11)$$

kde ΔH_{sub} je enthalpie sublimace, A_v je plocha vnějšího průřezu vialky, T_s teplota podložky, T aktuální teplota a K_v koeficient prostupu tepla z podložky, přes mrazlou část materiálu, až k rozhraní:

$$K_v(x) = \left(\frac{1}{k_v} + \frac{h_{\text{max}} - h}{k_{\text{eff}}} \right), \quad (12)$$

kde h_{max} je celková výška vrstvy, k_v koeficient přestupu tepla z podložky a k_{eff} efektivní vodivost zmrzlého materiálu. Celou vialku si rozdělíme na n vrstev, a pro sublimaci každé vrstvy budeme předpokládat ustálený stav, to znamená, že se celá vrstva bude odpařovat při konstantní rychlosti odparu a výška h bude střední hodnota poloh okrajů vrstvy. Pro rovnici (11) tak platí:

$$\frac{dH}{dt} = 0, \quad (13)$$

a tato rovnice zároveň určuje i teplotu.

Úkoly:

1. Naimplementujte model pro parametry uvedené v tabulce (1)
2. Tlak nasycených par je dán experimentální korelací, kterou najdete v příloženém souboru. V tomto souboru jsou také data lyofilizačního experimentu (změna teploty a hmotnosti s časem). Experiment byl proveden za shodných podmínek s parametry modelu.
3. Vaším úkolem je pro daný experiment nalézt parametry R_0 , A_1 , A_2 , tak aby model fitoval co nejlépe uvedená data. Jako objektovou funkci použijte sumu čtverců odchylek mezi měřenou teplotou nebo hmotností vzorku.
4. Optimalizaci proveďte vámi nadefinovanou optimalizační metodou.
5. Porovnejte vhodnost gradientní, Newtonovy metody a simplexové, relaxační metody.
6. Jaká látka byla pravděpodobně sušena? Porovnejte získané parametry odporu s tabulkou (2).

Tabulka 1: Hodnoty parametrů modelu Lyofilizace

d_p	1,8	cm	vnitřní poloměr vialky
d_v	2,0	cm	vnější poloměr vialky
p_0	0.05	torr	celkový tlak
p_{sat}	viz. excel	torr	tlak nasycených par
T_s	273.15	K	teplota podložky
ΔH_{sub}	680	cal g ⁻¹	entalpie sublimace
k_{eff}	0.059	cal cm ⁻¹ s ⁻¹ K ⁻¹	efektivní vodivost
k_v	0.004	cal cm ⁻² s ⁻¹ K ⁻¹	koeficient přestupu tepla
ρ_{roztok}	1.0	g ml ⁻¹	hustota roztoku
$\rho_{\text{rozp. látka}}$	1.5	g ml ⁻¹	hustota rozp. látky
ρ_{led}	0.918	g ml ⁻¹	hustota ledu
$c_{\text{rozp. látka}}$	0.2	g (mlroztoku) ⁻¹	koncentrace rozp. látky
V_{roztok}	5	ml	objem roztoku

Tabulka 2: Typické hodnoty parametrů odporu pro některé materiály

Látka	R_0	A_1	A_2
Povidon	1.1	5	0
Sacharóza	2.3	5.3	0.7
Mannitol	3.9	10	0.3

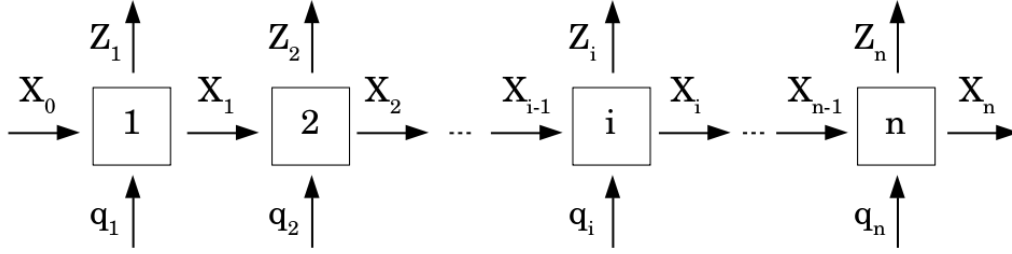
2 Extrémy funkcí reálných proměnných (extrém s omezením, vázaný extrém)

2.1 Opakovaná extrakce s lineární a nelineární rovnováhou

Metodu Lagrangeových multiplikátorů lze s výhodou aplikovat na stupňovité procesy, kde výstup z jednoho stupně slouží zároveň jako vstup do stupně dalšího. Klasickým příkladem takového procesu je opakovaná extrakce. Naším úkolem bude co nejvýhodněji extrahovat složku A z rozpouštědla B pomocí extrakčního činidla C . Uvažujme n stupňovitý kontinuální proces (Obr. 1) s rovnovážnými stupni a předpokládejme vzájemnou nemísitelnost rozpouštědel. Obsah extrahované složky vyjádříme pomocí relativních zlomků:

$$X_i = \frac{\dot{m}_{i,A}^{(B)}}{\dot{m}_B}, \quad Z_i = \frac{\dot{m}_{i,A}^{(C)}}{\dot{m}_{i,C}}, \quad q_i = \dot{m}_{i,C} \quad (14)$$

kde $\dot{m}_{i,A}^{(B)}$, $\dot{m}_{i,A}^{(C)}$ je hmotnostní tok látky A v příslušné fázi a $\dot{m}_B$, $\dot{m}_{i,C}$ hmotnostní toky rozpouštědel. Hmotnostní tok extrakčního činidla v i -tém stupni si označme jako q_i . V každém stupni musí platit



Obrázek 1: Schéma opakované extrakce

hmotnostní bilance:

$$\dot{m}_B(X_{i-1} - X_i) = q_i Z_i = q_i f(X_i), \quad (15)$$

kde $Z_i = f(X_i)$ udává rovnováhu mezi fázemi, zatím budeme uvažovat lineární rovnováhu tedy $Z_i = f(X_i) = kX_i$. Zbývá určit hmotnostní proudy extrakčního činidla q_i , tak abychom maximalizovali zisk daný následující objektovou funkcí:

$$p(X, q) = \alpha \dot{m}_B \sum_{i=1}^n (X_{i-1} - X_i) - \beta \sum_{i=1}^n q_i = \alpha \dot{m}_B (X_0 - X_n) - \beta \sum_{i=1}^n q_i, \quad (16)$$

kde α je cena extraktu a β cena extrakčního činidla. Pro zjednodušení objektovou funkci podělíme $\alpha \dot{m}_B$:

$$p'(X, q) = \frac{p}{\alpha \dot{m}_B} = (X_0 - X_n) - \beta' \sum_{i=1}^n q_i, \quad \text{kde } \beta' = \frac{\beta}{\alpha \dot{m}_B}. \quad (17)$$

Z rovnice (15) si po drobné úpravě vyjádříme vazby:

$$g_i : \frac{X_{i-1}}{1 + k'q_i} - X_i = 0, \quad \text{kde } k' = \frac{k}{\dot{m}_B}. \quad (18)$$

Nyní si ukážeme, že zavedením Lagrangeových multiplikátorů lze celý optimalizační problém převést na jednoduchou soustavu nelineárních rovnic řešitelnou Newtonovou metodou. Lagrangeova funkce bude ve tvaru:

$$F = X_0 - X_n - \beta' \sum_{i=1}^n q_i + \sum_{i=1}^n \lambda_i \left(\frac{X_{i-1}}{1 + k'q_i} - X_i \right). \quad (19)$$

V bodě extrému musí být parciální derivace Lagrangeova funkce nulové tedy pro $i = 1 \dots n$ musí platit:

$$\frac{\partial F}{\partial X_i} = 0, \quad \frac{\partial F}{\partial q_i} = 0, \quad \frac{\partial F}{\partial \lambda_i} = 0. \quad (20)$$

$$\frac{\partial F}{\partial X_i} = -\lambda_i + \lambda_{i+1} \frac{1}{1 + k'q_{i+1}}, \quad (21)$$

$$\frac{\partial F}{\partial X_n} = -1 - \lambda_n \quad (22)$$

$$\frac{\partial F}{\partial q_i} = -\beta' - \lambda_i k' \frac{X_{i-1}}{(1 + k'q_i)^2}, \quad (23)$$

$$\frac{\partial F}{\partial \lambda_i} = \frac{X_{i-1}}{1 + k'q_i} - X_i. \quad (24)$$

Úkoly:

1. Najděte optimální spotřebu rozpouštědla pomocí Lagrangeových multiplikátorů pro hodnoty parametrů uvedené v tabulce (3)
2. Odvoďte parciální derivace Lagrangeovy funkce pro obecně nelineární rovnováhu
3. Najděte optimální spotřebu rozpouštědla pro rovnováhu $Z_i = f(X_i) = \sqrt{X_i}$

Tabulka 3: Hodnoty parametrů

N	10	
X_0	0.1	[-]
k	5	[-]
$\dot{m}_B$	5	kg s ⁻¹
α	200	Kč kg ⁻¹
β	30	Kč kg ⁻¹

2.2 Optimalizace reaktoru pomocí BFGS metody

Jednou z nejpoužívanějších kvazi-Newtonových metod je BFGS metoda, která začíná jako metoda gradientní a postupně přechází na metodu Newtonovu. Výhodou je, že Hessova matice je počítána postupnými iteracemi pouze z prvních derivací.

BFGS algoritmus:

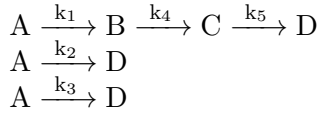
1. Nalézt směr p_k , $p_k = -B_k^{-1} \nabla f(x_k)$
2. Najít hodnotu relaxačního parametru α , například jako 1-D optimalizace ve směru p_k a nalézt min/max $f(x_k + \alpha \cdot p_k)$
3. Vypočítat $x_{k+1} = x_k + \alpha \cdot p_k$
4. Zlepšit odhad Hessovy matice, nalézt B_{k+1} , respektive budeme rovnou zlepšovat její inverzní matici $H_{k+1} = B_{k+1}^{-1}$ jako:

- $s_k = \alpha \cdot p_k$
- $y_k = \nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k)$
- $H_{k+1} = H_k - \frac{H_k y_k y_k^T H_k}{y_k^T H_k y_k} + \frac{s_k s_k^T}{y_k^T s_k}$

Pozn. Počáteční aproximaci Hessovy matice volte jako jednotkovou matici: $H_0 = B_0^{-1} = E$. Optimalizace účelové funkce v daném směru se obvykle provádí neexaktně, tedy odhadem na základě Wolfeho podmínek, my ji implementujeme jako 1-D hledání extrému (metoda ekv. párů, metoda zl. řezu, Fibonacciho metoda), hledání realizujte například v rozmezí $< 0, 1 >$ násobku p_k . Pokud budete mít problémy s konvergencí, počáteční iterace omezte i více, například pouze na interval $< 0, 0.1 >$ násobku p_k .

Popis reaktoru:

Aplikaci BFGS metody si předvedeme na optimalizaci výtěžku složky C v následující reakci ve vsádkovém reaktoru [2]:



kde $k_1, k_2, \dots, k_5$ jsou rychlostní konstanty jednotlivých reakcí. Časový průběh koncentrací složek a, b, c je popsán diferenciálními rovnicemi:

$$\frac{da}{d\tau} = -(k_1 + k_2 + k_3)a \quad (25)$$

$$\frac{db}{d\tau} = k_1a - k_4b \quad (26)$$

$$\frac{dc}{d\tau} = k_4b - k_5c \quad (27)$$

Počáteční koncentrace všech složek je nulová, kromě složky a, $a(\tau = 0) = 1$. Kinetika reakce se řídí Arrheniovskou kinetikou:

$$k_i = A_i \cdot \exp\left(\frac{E_i}{1,98} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{658}\right)\right), \quad (28)$$

kde T je teplota v [K], a parametry A_i , E_i jsou uvedeny v tabulce (4). Za předpokladu konstantní teploty, lze odvodit analytické řešení diferenciálních rovnic pro hodnotu koncentrace složky C, $c(\tau)$:

$$c(\tau) = \frac{k_4 k_1 \exp(-k_5 \tau)}{k - k_4} \left(\frac{1 - \exp(-(k_4 - k_5)\tau)}{k_4 - k_5} - \frac{1 - \exp(-(k - k_5)\tau)}{k - k_5} \right), \quad (29)$$

$$k = k_1 + k_2 + k_3. \quad (30)$$

Pro teplotu a čas platí následující omezení:

$$200 \leq T \leq 2000 \quad (31)$$

$$0 \leq \tau \leq 10 \quad (32)$$

Tabulka 4: Parametry Arrheniovy rovnice

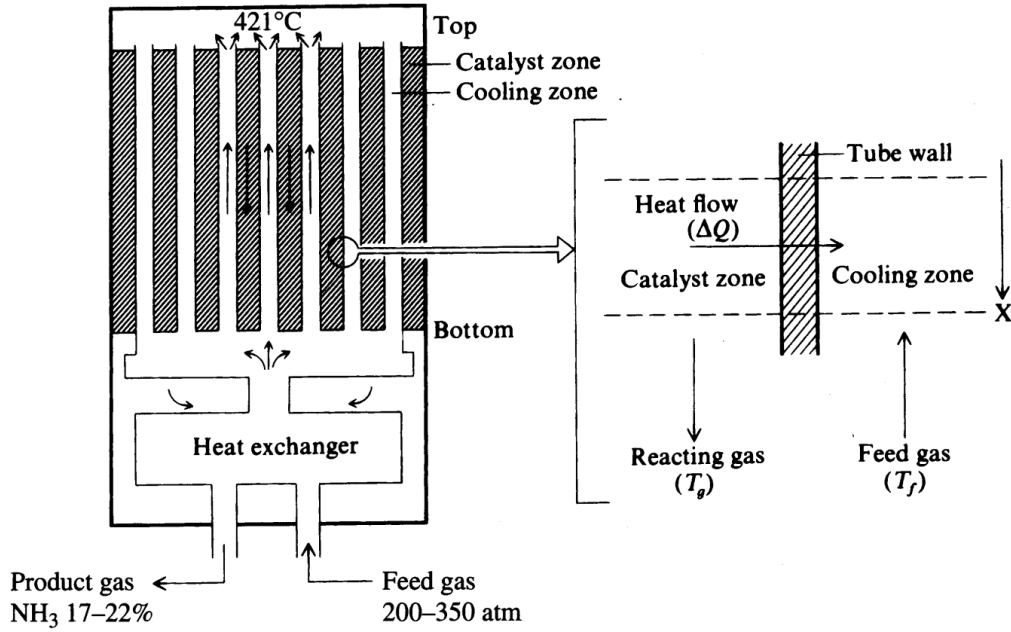
	1	2	3	4	5
A_i	1,02	0,93	0,386	3,28	0,084
E_i	16 000	14 000	15 000	10 000	15 000

Úkoly:

1. Implementujte BFGS metodu s 1-D hledáním extrému (metoda ekv. párů, metoda zl. řezu, Fibonacciho metoda)
2. Implementujte model vsádkového reaktoru, pro ošetření omezení použijte pokutových funkcí.
3. Nalezněte optimální teplotu a délku reakce, tak aby byl maximalizován výtěžek látky C.
4. Porovnejte konvergenci BFGS a gradientní metody.

2.3 Optimalizace trubkového reaktoru pro výrobu amoniaku

V případě složitějšího optimalizačního problému s více omezeními je často nejjednodušším řešením užití pokutových funkcí. Následující problém optimalizace trubkového reaktoru pro výrobu amoniaku byl formulován Murasem et al. (1970) [3]. Přiváděné reaktanty v protiproudém uspořádání chladí reakční směs (viz. Obr. 2) až do okamžiku kdy se dostanou do oblasti katalyzátoru. Definice modelu



Obrázek 2: Schéma reaktoru s příkladem typických procesních parametrů [4].

je poněkud rozsáhlejší, proto popis všech parametrů modelu je shrnut v tabulce (5). Kinetika reakce: $N_2 + 3H_2 \longrightarrow 2NH_3$, je dána následujícími rovnicemi (tlak dosazujte v [atm], teplotu v [K]):

$$\log(K_a) = -2.691122 \cdot \log(T) - 5.519265 \cdot 10^{-5} \cdot T + 1.848863 \cdot 10^{-7} \cdot T^2 + \frac{2001.6}{T} + 2.6899, \quad (33)$$

$$K_1 = 8.849 \cdot 10^{14} \cdot \exp\left(\frac{-170560}{RT}\right), \quad (34)$$

$$r = \frac{K_1}{3.6} \cdot \left(K_a^2 \frac{p_{N_2} \cdot p_{H_2}^{1.5}}{p_{NH_3}} - \frac{p_{NH_3}}{p_{H_2}^{1.5}} \right). \quad (35)$$

Hmotnostní bilance reaktoru (předpoklad konstantního celkového tlaku):

$$\alpha = \frac{N_{0,N_2} - N_{N_2}}{N_{0,N_2}}, \quad (36)$$

$$N_{H_2} = N_{0,H_2} - 3\alpha N_{0,N_2}, \quad (37)$$

$$N_{NH_3} = N_{0,NH_3} + 2\alpha N_{0,N_2}, \quad (38)$$

$$y_i = \frac{N_i}{N_{N_2} + N_{H_2} + N_{NH_3}}, \quad (39)$$

$$p_i = y_i p, \quad (40)$$

$$\frac{dN_{N_2}}{ds} = -r(p_{N_2}, p_{H_2}, p_{NH_3}, p, T_g). \quad (41)$$

$$(42)$$

Entalpická bilance:

$$\dot{m}_{c,p,f} \frac{dT_f}{ds} = -k \cdot S_1 (T_g - T_f), \quad (43)$$

$$\dot{m}_{c,p,g} \frac{dT_g}{ds} = -k \cdot S_1 (T_g - T_f) - \Delta H_r \cdot S_2 \cdot r(p_{N_2}, p_{H_2}, p_{NH_3}, p, T_g). \quad (44)$$

$$(45)$$

Počáteční podmínky:

$$T_f(s=0) = T_g(s=0) = T_0, \quad N_{N_2}(s=0) = N_{0,N_2}. \quad (46)$$

Všimněte si, že integrujeme od horního okraje reaktoru ve směru toku produktů, ale proti směru proudu výchozích látek.

Objektová funkce je podrobně odvozena v Murase et al. (1970) [3], nutno dosazovat teplotu na konci reaktoru, $T_g(s = s_{\max})$, $T_f(s = s_{\max})$ v [K], $N_{N_2}(s = s_{\max})$ v $[\text{kmol h}^{-1} \text{m}^2]$, $s = s_{\max}$ v [m]:

$$F(N_{N_2}, T_g, T_f, s) = 1.33563 \cdot 10^7 - 1.70843 \cdot 10^4 \cdot N_{N_2} + 704.09 \cdot (T_g - T_0) - 699.27 \cdot (T_f - T_0) - \sqrt{3.45663 \cdot 10^7 + 1.98365 \cdot 10^9 \cdot s} \quad (47)$$

Tabulka 5: Hodnoty parametrů

Nezávislé proměnné		
s	délka reaktoru	[m]
T_0	okrajová teplota	[K]
Závislé proměnné		
T_g	teplota reakční směsi	[K]
T_f	teplota nástřiku	[K]
N_i	molární tok složky i	$[\text{mol s}^{-1} \text{m}^{-2}]$
Parametry		
$N_{0,i}$	poč. molární tok složky i	$[\text{mol s}^{-1} \text{m}^{-2}]$
p	celkový tlak	286 atm
$\dot{m}$	hmotnostní tok reaktantů na vstupu	26 400 kg h^{-1}
S_1	specifická plocha pro transport tepla	10 $\text{m}^2 \text{m}^{-1}$
S_2	plocha průřezu reaktoru	0.78 m^2
k	koeficient prostupu tepla	581.8 $\text{J s}^{-1} \text{m}^{-2} \text{K}^{-1}$
$c_{p,f}$	tepelná kapacita reaktantů	2.96 $\text{kJ kg}^{-1} \text{K}^{-1}$
$c_{p,g}$	tepelná kapacita produktů	3.01 $\text{kJ kg}^{-1} \text{K}^{-1}$
ΔH_r	reakční entalpie	-112.97 kJ mol^{-1}
R	mol. plyn. konstanta	8.314 $\text{J K}^{-1} \text{mol}^{-1}$
Složení nástřiku (molární zlomek)		
N_2	0.2175	
H_2	0.6525	
NH_3	0.05	
CH_4	0.04	
Ar	0.04	

Úkolem je najít délku reaktoru a teplotu nástřiku která maximalizuje objektovou funkci, za platnosti následujících omezení:

$$0 \leq s \leq 10, \quad [\text{m}], \quad (48)$$

$$400 \leq T_f \leq 800 \quad [\text{K}]. \quad (49)$$

Úkoly - varianta (a):

1. Naimplementujte model
2. Omezení zaveďte pomocí pokutových funkcí (Carollova a Rosenbrockova)
3. Nalezněte optimum (doporučujeme metodu Nelder-Mead)
4. Porovnejte výsledky pokutových funkcí. Jaký mají vliv jejich parametrech ovlivňující šířku přechodové zóny?
5. Zobrazte teplotní profil podél reaktoru a vykreslete vývoj velikosti molárního toku dusíku v reakční zóně.

Úkoly - varianta (b):

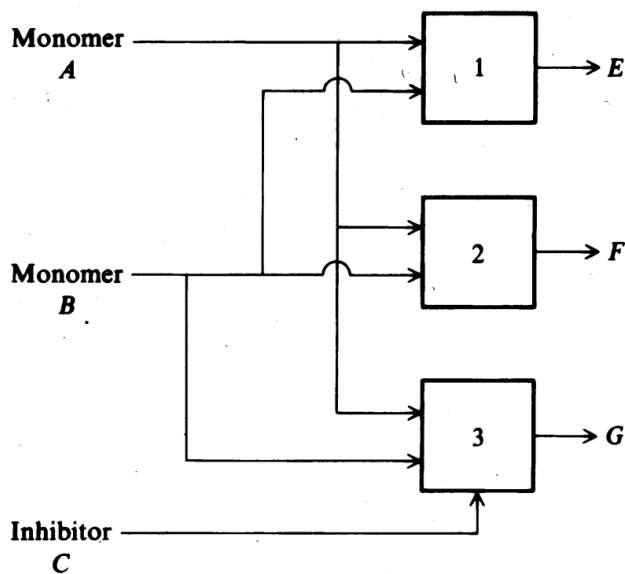
1. Naimplementujte model
2. Omezení zaveďte pomocí pokutových funkcí (Carollova a Rosenbrockova)
3. Naimplementujte vlastní optimalizační metody která nevyužívá výpočet derivací (jednoduchá relaxační metoda, Rosenbrockova nebo simplexová metoda) a nalezněte optimum.
4. Srovnajte užití Newtonovy a vaší optimalizační metody z pohledu konvergence a výpočetní složitosti, zdůvodněte.
5. Zobrazte teplotní profil podél reaktoru a vykreslete vývoj velikosti molárního toku dusíku v reakční zóně.

3 Lineární programování

3.1 Optimalizace produkce chemické továrny

Plán výroby je úzce spojen s aktuálními cenami surovin a produktů na trhu. Navíc, pokud máme omezené množství výchozích surovin je nutné správně rozvrhnout produkci tak abychom dosáhli co největšího zisku. Takový problém lze snadno řešit metodami lineárního programování.

V chemické továrně se vyrábí 3 polymery: E , F , G , každý vzniká v samostatném procesu podle schématu (3). Všechny dostupné výchozí suroviny nemusíme spotřebovat ale chceme dosáhnout maximálního zisku. V tabulce (6) jsou shrnuty ceny výchozích látek a produktů.



Obrázek 3: Schéma výrobního procesu [4].

Úkoly:

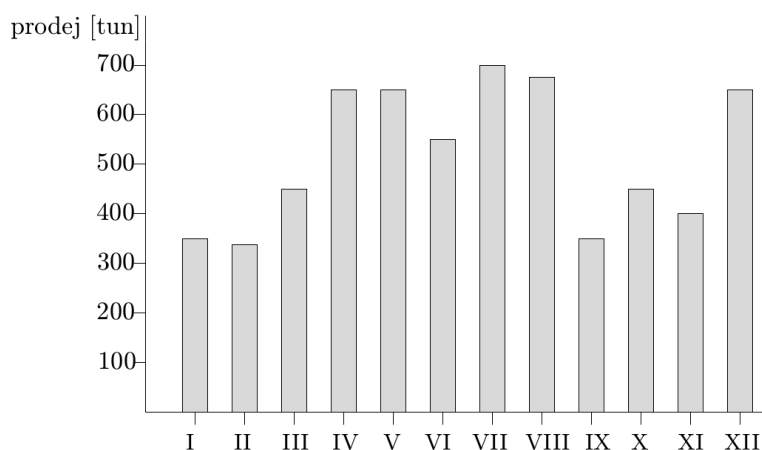
1. Formulujte problém jako úlohu lineárního programování
2. Najděte optimum pomocí simplexní metody
3. Jak se změní řešení pokud navíc požadujeme vyrobit alespoň 2000kg E, 1500kg F a 1000kg G?

Tabulka 6: Procesní data

Výchozí látky				
Surovina	Množství	Cena		
	[kg/den]	[tis. Kč/100 kg]		
A	4000	1,5		
B	3000	2,0		
C	2500	2,5		
Produkty				
Proces	Produkt	Reakční poměr	Výrobní náklady	Prodejní cena
1	E	$\frac{2}{3}A, \frac{1}{3}B$	1,0 tis. Kč/100 kg A (spotřebováno v 1)	4,0 tis. Kč/100 kg E
3	F	$\frac{2}{3}A, \frac{1}{3}B$	0,5 tis. Kč/100 kg A (spotřebováno v 2)	3,3 tis. Kč/100 kg F
2	G	$\frac{1}{2}A, \frac{1}{6}B, \frac{1}{3}C$	1,0 tis. Kč/100 kg G (vyprodukováno ve 3)	3,8 tis. Kč/100 kg E

3.2 Rozvržení produkce

Další možnou aplikací lineárního programování je rozvržení produkce tak abychom pokryli poptávku, ale zároveň minimalizovali náklady na uskladnění produktu, případně náklady na přenastavení výrobní linky. Pěkný příklad z potravinářského průmyslu je rozvržení výroby zmrzliny [5].



Obrázek 4: Příklad spotřeby zmrzliny [5].

Budeme uvažovat, že výroba je celý jeden měsíc stejná a všechna zmrzlina, která se daný měsíc neprodá se musí celý tento měsíc skladovat. Náklady na změnu výroby a skladování jsou v tabulce (7).

Tabulka 7: Náklady

Změna výroby	150 tis. Kč/t
Náklady na skladování	60 tis. Kč/t/měsíc

Úkoly:

1. Formulujte problém jako úlohu lineárního programování
2. Data poptávky odečtete z grafu (4), nebo využijte připravenou šablonu.
3. Najděte optimum pomocí simplexní metody

4. Porovnejte řešení pokud požadujeme:

- (a) Aby žádná uskladněná zmrzlina na konci roku nezbyla.
- (b) Pokud se zbylá zmrzlina využije v roce následujícím se stejnou poptávkou (v lednu máme k dispozici přebytek z prosince)

Návod:

Zadejte si proměnné pro přebytek zmrzliny s_i , aktuální produkci x_i v roce i . Pak celkové náklady můžeme definovat jako:

$$1500 \sum_{i=1}^{12} |x_i - x_{i-1}| + 600 \sum_{i=1}^{12} s_i, \quad (50)$$

abychom odstranili absolutní hodnotu zavedeme nezáporné proměnné definující zvýšení výroby y_i a její snížení z_i . Potom platí:

$$x_i - x_{i-1} = y_i - z_i \quad \text{a} \quad |x_i - x_{i-1}| = y_i + z_i, \quad (51)$$

Důležitým pozorováním je, že pokud minimalizujeme celkové náklady, tak pro každé i musí být y_i nebo z_i nulové, jinak by totiž celkové náklady bylo možné snížit, tedy rovnice (51) budou splněny pro optimální řešení výsledného lineárního programu.

4 Dynamické programování

4.1 Optimální strategie výměny katalyzátoru

Při reálném procesu dochází při katalytické reakci k postupnému znehodnocování katalyzátoru a snižování jeho účinnosti. Za úvahu poté stojí, kdy je optimální katalyzátor vyměnit, protože je tento úkon obvykle spojen s vysokými náklady a nutností odstavit produkci.

V následujícím příkladu budeme uvažovat jednoduchou izotermní reakci v plynné fázi v trubkovém reaktoru:

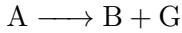
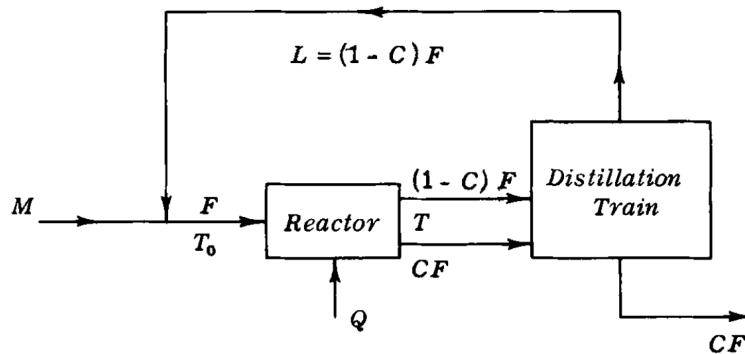


Schéma celého procesu je znázorněno na obrázku (5). Nástřík surového materiálu je přiváděn do vyhřívaného reaktoru, a produkty jsou následně separovány v destilační koloně. Nezreagovaná složka A se pak ve formě recyklu vrací do reakce, kde je doplněna surovinou na původní množství. Značení je shrnuto v tabulce (8).



Obrázek 5: Procesní schéma [6].

Hmotnostní bilance procesu tedy lze napsat:

$$M = C \cdot F \quad (52)$$

$$F = M + L \quad (53)$$

Tabulka 8: Značení

M	hmotnostní tok čerstvé látky A	$[\text{kg den}^{-1}]$
F	celkový hmotnostní tok látky A	$[\text{kg den}^{-1}]$
C	konverze reakce	
$C \cdot F$	hmotnostní tok produktů	$[\text{kg den}^{-1}]$
$L = (1 - C)F$	hmotnostní tok recyklu A	$[\text{kg den}^{-1}]$
Q	teplo předané reaktoru	$[\text{kJ den}^{-1}]$
T_0	teplota proudu na vstupu do reaktoru	$[\text{K}]$
T	teplota proudu na výstupu z reaktoru	$[\text{K}]$

Pro konverzi budeme předpokládat platnost následujícího vztahu:

$$C = c_1 T - c_2 F - c_3 S, \quad (54)$$

kde c_1 , c_2 , c_3 jsou vyhodnoceny z experimentálních dat. A S je kumulativní tok látky A přes katalyzátor, který definuje stav katalyzátoru. Pro nový katalyzátor platí $S = 0$. A pro hodnotu S po n dnech platí: $S = \sum_{i=1}^n F_i$.

Entalpická bilance je dána:

$$Q = F c_p (T - T_0) + \Delta H_r \cdot C \cdot F, \quad (55)$$

kde c_p je průměrná tepelná kapacita proudu a ΔH_r reakční entalpie. Pro konverzi, teplotu a nástřik platí následující omezení:

$$C \leq 0,8 \quad (56)$$

$$5000 \leq T \leq 10000 \quad [\text{K}] \quad (57)$$

$$900 \leq F \leq 1000 \quad [\text{kg den}^{-1}] \quad (58)$$

$$(59)$$

Nakonec si definujeme zisk jako:

$$P = CFV_1 - MV_2 - QV_3 - LV_4 - V_5 \quad (60)$$

Hodnoty všech parametrů jsou shrnuty v tabulce (9). R je cena výměny katalyzátoru.

Tabulka 9: Hodnoty parametrů

$c_1 =$	10^{-3}	$V_1 =$	0,1	tis. Kč kg^{-1}
$c_2 =$	10^{-5}	$V_2 =$	0,05	tis. Kč kg^{-1}
$c_3 =$	10^{-6}	$V_3 =$	3,00	tis. Kč $(\text{milion kJ})^{-1}$
$c_p =$	0,5	$V_4 =$	0,03	tis. Kč kg^{-1}
$\Delta H_r =$	300	$V_5 =$	0	
$R =$	50	$T_0 =$	298.15	$[\text{K}]$

Pro řešení úlohy metodou dynamického programování budeme uvažovat diskrétní hodnoty času, jednotlivé dny. Každý den i je možno buď nechat celý den běžet reaktor při toku F_i nebo vyměnit katalyzátor.

Úkoly:

1. Formulujte úlohu jako problém dynamického programování, jak bude vypadat příslušná tabulka a jaké hodnoty do ní budeme značit?
2. Uvažujte diskrétní teplotu s krokem 25 K a nástřik F s krokem 1000 kg den^{-1}

3. Najděte optimální strategii provozu reaktoru na 28 dní na základě objektové funkce (60). Strategie bude obsahovat rozvržení velikosti nástřiku, teploty na každý den a údaje kdy se má katalyzátor vyměnit.
4. Porovnejte zisk pro různé počáteční stavy katalyzátoru.

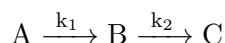
Nápověda:

Nejprve určete pro jaké nástřiky vychází maximální zisk v závislosti na stavu katalyzátoru, pokud by vyšla konstantní hodnota, značně to usnadní řešení.

5 Vektorová optimalizace

5.1 Optimalizace vsádkového reaktoru

Při reakci, kdy žádaný produkt podléhá rozkladné reakci proti sobě jdou dvě kritéria, jedním je výtěžek reakce, a druhým její selektivita. Takový problém je typickou úlohou vektorové optimalizace. Uvažujte následující reakční schéma:



Žádaným produktem je chemická látka B, ta však podléhá rozkladné reakci na nežádoucí produkt C. Obě reakce se řídí kinetikou prvního řádu a u rychlostních konstant předpokládáme Arrheniovskou závislost. Hmotnostní bilanci reaktoru můžeme tedy zapsat jako:

$$\frac{dc_A}{d\tau} = -k_1 c_A \quad (61)$$

$$\frac{dc_B}{d\tau} = k_1 c_A - k_2 c_B \quad (62)$$

$$\frac{dc_C}{d\tau} = k_2 c_B \quad (63)$$

$$k_1 = 2 \cdot \exp\left(\frac{-2,5 \cdot 10^4}{RT}\right) \quad (64)$$

$$k_2 = 10 \cdot \exp\left(\frac{-3,0 \cdot 10^4}{RT}\right) \quad (65)$$

$$(66)$$

Počáteční podmínky při $\tau = 0$: $c_A = 1$, $c_B = 0$, $c_C = 0$, jako regulační proměnné volte čas reakce (τ) a teplotu (T) v rozmezí:

$$100 \leq \tau \leq 3600 [s] \quad (67)$$

$$298.15 \leq T \leq 353.15 [K] \quad (68)$$

Jako kriteria optimality volíme výtěžek reakce (Y) a selektivitu (S):

$$\max: Y = \frac{c_B}{c_{A0}} \quad (69)$$

$$\max: S = \frac{c_B}{c_B + c_C} \quad (70)$$

Úkoly:

1. Naimplementujte model a příslušnou vektorovou objektovou funkci.
2. Nalezněte Paretovu množinu pro $(\max(Y), \max(S))$ metodou váhových koeficientů nebo ϵ -omezení. Lineární omezení na regulační proměnné zajistěte vhodnou pokutovou funkcí.

3. Paretovu množinu zobrazte jako závislost mezi kriterii Y a S .
4. Paretovu množinu zobrazte také v prostoru regulačních proměnných τ , T .
5. Jaké nejvyšší možné selektivity můžeme dosáhnout, pokud požadujeme, aby byl výtěžek alespoň 35%? A jak dlouho a při jaké teplotě by měla reakce běžet?

Reference

- [1] J. Gmehling, U. Onken, and W. W. Arlt, *Vapor-liquid equilibrium data collection*. Frankfurt/Main : Dechema ; Flushing, N.Y. : Distributed by Scholium International, 1977.
- [2] M. Kubíček, *Optimalizace inženýrských procesů*. SNTL - Nakladatelství technické literatury, 1986.
- [3] A. Murase, H. L. Roberts, and A. O. Converse, "Optimal thermal design of an autothermal ammonia synthesis reactor," *Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development*, vol. 9, no. 4, pp. 503–513, 1970.
- [4] T. F. Edgar, . Himmelblau, David M. (David Mautner), and . Lasdon, Leon S., *Optimization of chemical processes*. New York : McGraw-Hill, 2nd ed ed., 2001.
- [5] J. Matoušek, *Lineární programování - Úvod pro informatiky*. KAM MFF UK, 2006.
- [6] S. M. Roberts, "3 allocation problems," in *Dynamic Programming in Chemical Engineering and Process Control*, vol. 12 of *Mathematics in Science and Engineering*, pp. 39 – 78, Elsevier, 1964.