

# CSTR 工艺与控制系统的 集成优化设计方法

周猛飞, 李 龙, 肖成松, 蔡亦军, 潘海天\*

(浙江工业大学化学工程学院, 浙江 杭州 310014)

**摘要:**与传统的序贯设计方法相比,过程工艺与控制系统的集成优化设计可较大地提高过程的可操作性和经济性能,但基于常规动态优化的集成设计问题求解困难。采用最优控制和分层优化策略的思想,将线性二次调节器(LQR)嵌入到过程工艺与控制系统集成设计框架中,以降低集成优化设计问题的求解难度。将该方法应用于连续搅拌釜式反应器(CSTR)的设计中,通过与传统的序贯设计方法相比较,表明了该方法的有效性。

**关键词:**集成优化;连续搅拌釜式反应器;线性二次调节器;工艺设计

**中图分类号:**TQ021.8

**文献标志码:**A

**文章编号:**0253-4320(2015)01-0170-05

## Integrated design and control process for a jacketed exothermic CSTR

ZHOU Meng-fei, LI Long, XIAO Cheng-song, CAI Yi-jun, PAN Hai-tian\*

(College of Chemical Engineering, Zhejiang University of Technology, Hangzhou 310014, China)

**Abstract:** Compared with traditional sequential design methods, simultaneous design and control process may result in numerous economic and operability benefits. While the conventional integrated design problem on the basis of dynamic optimization is difficult to solve. In this paper, the linear quadratic regulator (LQR) is embedded into the framework of integrated design and control process. The proposed method is based on the optimal control and bi-level optimization strategy to avoid the complexity of integrated design and keep the problem size manageable. Finally, the proposed method is applied to a jacketed exothermic continuous stirred tank reactor (CSTR), by comparison with the traditional sequential design method. The results show that the proposed method is effective.

**Key words:** integrated optimization; CSTR; linear quadratic regulator; process design

传统的化工过程工艺设计与控制系统设计是按照分步序贯设计方法进行的,即先基于过程稳态模型和经济最优准则确定满足要求的工艺设计,在此基础上设计配套的控制系統。实际上,控制性能好坏很大程度由流程结构、设备的设计规格等工艺设计因素所决定。分步序贯设计方法割裂了工艺设计和过程控制性能之间的关联性,不能保证所设计的过程在外部扰动和不确定性下依然能够保持稳定、高性能地运行<sup>[1-2]</sup>。而过程工艺与控制系统集成优化设计同时考虑了过程的稳态特性和动态特性,能获得满足所有设计和操作约束条件下达到经济性能最优的设计参数,如流程结构、设备尺寸、操作条件、控制器结构、控制器参数等。目前,化工过程工艺与控制系统集成优化设计已逐渐受到了国内外工艺设计领域与过程控制领域的高度重视,最近发表的文献[2-3]给出了这一研究领域的详细综述。

在过程工艺与控制系统集成优化设计方法的早

期研究中,一般采用基于可控性指标的方法<sup>[4]</sup>,如相对增益矩阵、条件数等。这类方法较容易实现,不足之处是这些指标不能直接和经济性能关联起来,而且这些指标一般是通过线性或稳态过程模型得到的,其应用有一定的局限性。为了克服这些不足,大部分文献采用动态优化的方法求解单一性能指标的目标函数优化问题<sup>[5-6]</sup>,这类方法兼顾了优化命题中存在的过程非线性和外部时变扰动的动态影响,但这类方法计算复杂,对计算要求高。因而研究人员提出了一些减少优化问题复杂性的方法,如嵌入式控制优化方法<sup>[7-10]</sup>,基于鲁棒控制理论的方法<sup>[11-13]</sup>,以及基于智能优化的方法<sup>[14]</sup>等。

在化工系统中,反应器是整个过程中最有影响的单元装置,常常决定着整个工艺流程的性质,也决定着生产的经济性和对环境的影响<sup>[15]</sup>。连续搅拌釜式反应器(CSTR)是化工行业中广泛使用的一种反应器,同时也是过程工业中典型的、存在着严重非线性

收稿日期:2014-07-22

基金项目:国家自然科学基金项目(21306171);浙江省自然科学基金项目(LY13B060005)

作者简介:周猛飞(1978-),男,博士,讲师,研究方向为化工过程设计、过程控制及优化;潘海天(1957-),男,博士,教授,博士生导师,研究方向为过程系统工程,通讯联系人,0571-88320329,htpan@zjut.edu.cn。

性的动态系统。然而 CSTR 的设计通常采用基于稳态优化的设计方法,没有考虑过程的动态性能。本文中基于嵌入式控制优化方法的思想<sup>[7]</sup>,将 LQR 嵌入到 CSTR 的过程工艺与控制系统集成优化设计框架中,将集成优化设计问题分解成一个双层决策来处理,在降低集成优化设计问题尺寸和求解复杂程度的同时,保证了所设计出的 CSTR 具备良好的动态性能和经济性能。

## 1 过程工艺与控制系统集成优化设计方法

### 1.1 常规集成优化设计方法

传统的序贯设计方法中工艺设计和控制系统设计是分步进行的。首先基于稳态优化获得最佳的设计变量,再在此基础上设计相应的控制系统,其基本框架如图 1 所示。而过程工艺与控制系统的集成优化设计对工艺设计与控制系统设计进行同步优化,其目标是通过优化过程设计变量  $d$ 、流程结构  $X_p$ 、控制结构  $X_c$  及控制器参数  $d_c$ ,使得过程的设备成本和操作成本最小化,同时在不确定性及外部干扰下,也能够满足过程可行性约束条件,其基本框架如图 2 所示。

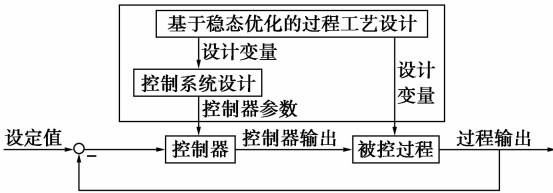


图 1 过程工艺设计与控制系统的序贯设计方法框架

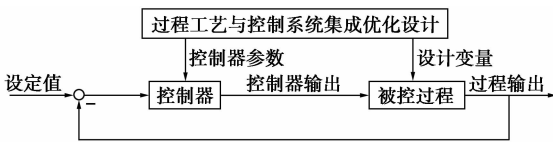


图 2 过程工艺设计与控制系统集成优化一般框架

过程工艺与控制系统集成优化设计问题的一般数学描述如下<sup>[16]</sup>:

$$\min_{d, X_p, x(t), z(t), u(t), d_c, X_c} E[J(x(t), z(t), u(t), d, X_p, X_c, \theta(t))] \quad (1)$$

s. t.

$$f(x(t), x(t), z(t), u(t), d, X_p, \theta(t)) = 0 \quad (2)$$

$$h(x(t), z(t), u(t), d, X_p, \theta(t)) = 0 \quad (3)$$

$$g(x(t), z(t), u(t), d, X_p, \theta(t)) \leq 0 \quad (4)$$

$$\phi(\chi(t), \chi(t), \xi(t), y(t), u(t), d_c, X_c) = 0 \quad (5)$$

$$\eta(\chi(t), \xi(t), y(t), u(t), d_c, X_c) = 0 \quad (6)$$

$$\mu(x(t), z(t), y(t)) = 0 \quad (7)$$

$$x(t) \in X, z(t) \in Z, u(t) \in U$$

$$\theta(t) \in \Theta, d \in D, d_c \in D_c$$

$$X_p \in \{0, 1\}^{n_{Xp}}, X_c \in \{0, 1\}^{n_{Xc}}$$

$$t \in [0, t_f]$$

其中,式(1)为目标函数的期望值; $x(t)$ 为微分状态变量; $z(t)$ 为代数变量; $u(t)$ 为控制变量; $d$ 为设计变量,如设备尺寸; $X_p$ 为流程拓扑结构; $\theta(t)$ 为过程不确定参数;式(2)是基于能量平衡和物料平衡的过程动态方程;式(3)是过程代数方程;式(4)为过程操作约束条件;式(5)、式(6)分别为控制器的微分方程和代数方程; $\chi(t)$ 、 $\xi(t)$ 分别为控制器的微分变量和代数变量; $y(t)$ 为测量变量; $d_c$ 为控制器参数; $X_c$ 为控制结构;式(7)为测量变量、代数变量以及状态变量之间的关系式。

由式(1)~式(7)可以看出,过程工艺与控制系统集成优化设计问题是一个无穷维的随机混合整数动态优化问题(stochastic mixed integer dynamic optimization, SMIDO)。SMIDO 问题计算复杂,对计算要求高,而且反馈控制的引入可能会由于某些参数存在而产生不稳定问题,同时也增加了目标函数和约束的非凸性<sup>[7]</sup>。文献[5]通过分解策略将该问题转化为一个多周期的确定性动态优化问题,提供了一个求解过程工艺与控制系统集成优化设计问题的一般框架。该方法的核心是 MIDO 问题的求解,求解难度依然较大。

### 1.2 基于 LQR 的集成优化设计方法

该方法基于最优控制和分层优化策略,将复杂的过程工艺与控制系统集成优化问题转化为一个易处理的双层优化问题,其基本框架如图 3 所示。这种框架将控制决策优化问题内嵌在设计决策优化问题中:在设计决策优化层,利用基于有限元正交配置(orthogonal collocation on finite elements, OCFE)的动态优化方法获得最优设计决策(如确保动态过程性能的设备尺寸);而在控制决策优化层,由 LQR 获得最优控制律,并通过最优控制来评估由每个可选的设计决策变量所确定的过程的动态性能,同时将最优控制律反馈到设计决策层,进行设计决策的下一代迭代优化。这种方法不仅确保了在工艺设计的同时兼顾控制系统的优化,另外,在设计决策优化层无需直接对控制决策进行优化,因而大大降低了集成优化问题的计算负担,因此,可以采用常规的动态优化算法对其进行有效求解。

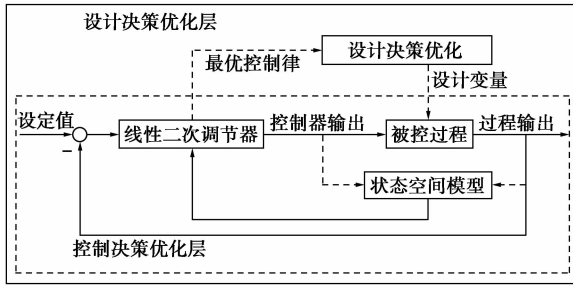


图 3 基于 LQR 的过程工艺设计与控制系统集成优化框架

基于 LQR 的过程工艺设计与控制系统集成优化问题的数学描述如下：

$$\min_d \text{Exp}[ \text{Cost}(d, \theta, \xi(t), x(t), u(t)) ] \quad (8)$$

$$\text{s. t. } \min_{K^*} = \sum_0^{\infty} (x_k^T Q x_k + u_k^T R u_k) \quad (9)$$

$$\text{s. t. } x_{k+1} = A_k x_k + B_k u_k^* \quad (10)$$

$$u_k^* = -K^* x_k \quad (11)$$

$$\min_{A_k, B_k} \Delta_{\text{LSQ}} = \sum_{k=1}^r [x(k) - \hat{x}(k)]^2 \quad (12)$$

其中式(8)为设计决策优化层的目标函数； $d$  表示设计变量； $\theta$  为时不变不确定因素； $\xi(t)$  为时变不确定因素； $x$  为状态变量； $u$  为操纵变量；式(9)为控制决策优化层的目标函数； $x_k$  为状态变量实际值与设定值的偏差； $u_k$  为操纵变量实际值与设定值的偏差； $Q, R$  为权重因子；式(10)为系统的线性状态空间模型； $K^*$  为最优控制律；式(12)为系统辨识方程； $x(k)$  为状态变量在时间点  $k$  的偏差； $\hat{x}(k)$  为状态变量在时间点  $k$  的偏差估计值。

### 1.2.1 设计决策优化

在设计决策优化层,通过最小化设备投资成本和操作费用来获得设计变量的最优值,优化问题的数学描述如下<sup>[17]</sup>：

$$\min_{d, x(t)} \Gamma = \int_0^{t_{\max}} C_1(d, c, x(t), \theta, t) dt + C_2(d, c) \quad (13)$$

$$\text{s. t. } h_c(d, x(t), x(t), \theta, t) = 0 \quad (14)$$

$$g_j^{\text{point}}(d, x(t), \theta, t) \leq 0, t \in [H_1, H_2] \quad (15)$$

$$g_j^{\text{path}}(d, x(t), \theta, t) \leq 0, t \in [0, H_{\text{end}}] \quad (16)$$

其中,式(13)右边第一项为操作费用,第二项为设备投资成本;式(14)表示守恒定理约束;式(15)表示点约束;式(16)表示路径约束。

采用基于 OCFE 的动态优化方法来实现设计决策的优化。OCFE 方法中,整个时域被分割成有限时间单元,如图 4 所示。

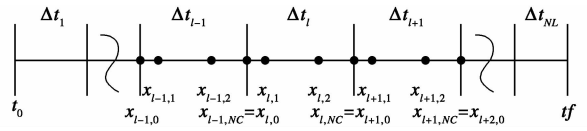


图 4 有限元正交配置点分布

由于上述优化问题无需直接对控制变量进行优化,因此,只需用 OCFE 对状态变量进行离散,通过将状态变量近似在有限单元中的配置点上,并用正交多项式来近似微分方程,式(13)~式(16)所示的 DAE 优化问题被转化为一个 NLP 问题。

在图 4 中,NC 表示配置点,NL 表示有限单元数, $x$  表示离散的状态变量。利用 Lagrange 多项式的基可以将状态变量以正交多项式线性组合的形式表示为：

$$x_i(t_{l,i}) = \sum_{j=0}^{NC} \zeta_j^l(t) x_{i,j} =$$

$$\sum_{j=0}^{NC} \left\{ \prod_{i=0}^{NC} [(t - t_{l,i}) / (t_{l,j} - t_{l,i})] \right\} x_{i,j}, l = 1, \dots, NL \quad (17)$$

通过式(13)~式(16),状态变量及其微分项在配置点处的值可表示为：

$$x_i(t_{l,i}) = \sum_{j=0}^{NC} \zeta_j^l(t_{l,i}) x_{i,j} = x_{i,i}, i = 0, NC \quad (18)$$

$$dx_i(t_{l,i})/dt = \sum_{j=0}^{NC} [d\zeta_j^l(t_{l,i})/dt] x_{i,j}, i = 0, NC \quad (19)$$

配置方式采用 Radau 配置法,即有限元的节点与配置点重合,将某一单元的末端配置点作为下一单元的初值,这样可保证相邻两单元间状态变量的连续性,有利于改善算法的收敛性。

### 1.2.2 LQR 控制决策优化

在控制决策优化层,利用 LQR 求解式(9)、式(10)所示的优化问题,可得到一个状态反馈比例控制器,最优控制律  $K^*$  可通过求解如下的 Riccati 方程得到：

$$A \cdot P + P \cdot A + Q - P \cdot B \cdot R^{-1} \cdot B \cdot P = 0 \quad (20)$$

$$K^* = R^{-1} \cdot B \cdot P \quad (21)$$

其中, $P$  为正定埃尔米特矩阵。

由于 LQR 仅适用于线性状态空间模型,所以需采用系统辨识方法将非线性动态模型辨识成线性状态空间模型。系统的自适应辨识要求求解式(12)所示的最小二乘拟合问题。为求解该问题,可将式(12)进一步转化为如下形式<sup>[7]</sup>：

$$\min_{\alpha} \Delta_{\text{LSQ}} = \sum_{k=1}^r [x(k) - \hat{x}(k)]^2 = \sum_{k=1}^r [x(k) - z(k) \hat{\alpha}^T]^2 \quad (22)$$

$$z(k) = [-x(k-1) \cdots -x(k-n)u(k-1) \cdots u(k-m)] \quad (23)$$

$$\hat{\alpha} = [\alpha_1 \cdots \alpha_n \beta_1 \cdots \beta_m] \quad (24)$$

其中,  $\alpha, \beta$  为放大系数, 用于评估过去的状态和控制行为对当前状态的影响。可以通过下式实现  $\hat{\alpha}$  的递推更新:

$$\hat{\alpha}_r = \hat{\alpha}_{r-1} + P_r z_r (x(k) - z_r^T \hat{\alpha}_{r-1}) \quad (25)$$

$$P_r = P_{r-1} + P_{r-1} z_r z_r^T P_{r-1} / (1 + z_r^T P_{r-1} z_r) \quad (26)$$

其中  $P_r$  为误差矩阵的协方差估计值。

## 2 案例研究

本文中以连续搅拌釜式反应器为研究对象<sup>[18]</sup>, 如图 5 所示, 在 CSTR 中进行一级放热、不可逆的反应  $A \rightarrow B$ , 反应温度和反应物的出口浓度由夹套冷却水流量调节。假设反应物的进料流量等于出料流量, 根据物料平衡和能量平衡有如下强非线性状态方程组:

$$dC_A/dt = (F/V)(C_{A,0} - C_A) - C_A K_0 e^{-E/RT} \quad (27)$$

$$dT/dt = (F/V)(T_0 - T) - [(\Delta H \times C_A K_0) / \rho C_p] e^{-E/RT} - (UA_H / \rho V C_p)(T - T_j) \quad (28)$$

$$dT_j/dt = (F_j/V_j)(T_{j,0} - T_j) + (UA_H / \rho_j V_j C_j)(T - T_j) \quad (29)$$

$$A_H = \pi D_R h \quad (30)$$

$$V = (\pi/4) D_R^2 h \quad (31)$$

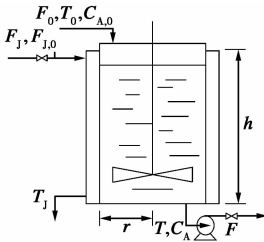


图 5 连续搅拌釜式反应器(CSTR)

过程及反应器尺寸受到以下约束:

$$300 \leq T \leq 333.15 \quad (32)$$

$$0 \leq C_A \leq 800.9 \quad (33)$$

$$h/D_R = 2 \quad (34)$$

假设过程受到夹套进口冷却水温度正弦变化扰动, 如下式所示:

$$T_{pi} = 294 + 5 \sin 2t \quad (35)$$

连续搅拌釜式反应器的模型参数见表 1。

CSTR 案例研究的目标是最小化设备成本和操作成本, 同时在受到外部扰动时, 系统能够保持在操作可行域内, 并满足产品质量要求。设计变量主要包括反应器直径、高度、操作工况(反应温度、冷却水流量等)。

表 1 连续搅拌釜式反应器的模型参数

参数	数值	参数	数值
$F_0 / (\text{m}^3 \cdot \text{h}^{-1})$	2.83	$R / (\text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})$	8.314
$T_0 / \text{K}$	294	$U / (\text{J} \cdot \text{h}^{-1} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1})$	$3.066 \times 10^6$
$C_{A,0} / (\text{mol} \cdot \text{m}^{-3})$	16018	$C_p / (\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})$	$3.14 \times 10^3$
$E / (\text{J} \cdot \text{mol}^{-1})$	69771	$\Delta H / (\text{J} \cdot \text{mol}^{-1})$	-34889.4
$\rho_j / (\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})$	998	$C_j / (\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})$	4186.5
$\rho / (\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})$	800.9		

CSTR 过程工艺与控制的集成设计问题可以表示成如下优化问题:

$$\min_{D_R, h, T, F_j} J = c_1 D_R^{1.066} h^{0.802} + \int_0^{t_f} c_2 F_j dt \quad (36)$$

s. t.

- (1) 过程模型动态方程
- (2) 约束条件
- (3) LQR 最优控制

为了与传统的工艺设计方法比较, 对 CSTR 设计也采用了序贯设计方法。其中 CSTR 的设计是基于稳态经济计算实现的。稳态最优设计问题的数学描述如下:

$$\min_{D_R, h, T^N, F_j^N} J = c_1 D_R^{1.066} h^{0.802} + c_2 t_f F_j \quad (37)$$

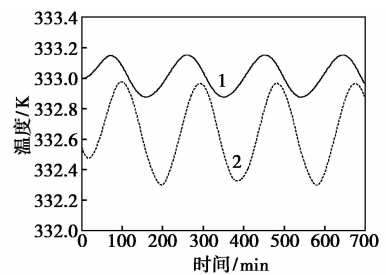
s. t.

- (1) 过程模型稳态方程
- (2) 约束条件

表 2 比较了传统的序贯设计法和集成设计方法所得到的结果。图 6 和图 7 中实线和虚线分别表示

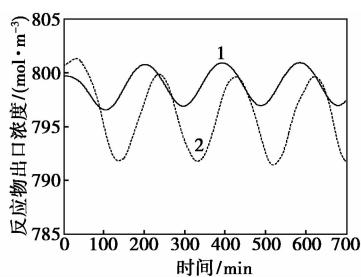
表 2 序贯设计法和集成设计法的优化结果比较

变量	序贯设计	集成设计
直径/m	4.1501	4.1049
反应温度/K	332.5457	333
设备投资成本/(美元·a <sup>-1</sup> )	$4.3875 \times 10^4$	$4.2987 \times 10^4$
操作费用/(美元·a <sup>-1</sup> )	$1.7819 \times 10^3$	$1.78755 \times 10^3$
总成本/(美元·a <sup>-1</sup> )	$4.5657 \times 10^4$	$4.4773 \times 10^4$



1—集成设计; 2—序贯设计

图 6 反应温度的闭环动态响应



1—集成设计;2—序贯设计

图 7 反应物 A 出口浓度的闭环动态响应

集成设计方法和序贯设计方法的闭环控制动态性能。

由表 2 可以看出,从经济方面考虑,基于 LQR 控制的集成设计方法在过程设计中较序贯设计方法更具吸引力,集成设计方法所得结果的设备年投资成本和年度操作费用都低于序贯设计方法的结果。从图 6 和图 7 所显示出的 CSTR 动态性能来看,由于集成设计方法在进行工艺设计的同时兼顾了控制系统的设计,因而其所得的最优操作点更接近约束边界,并且能够实现过程严格的卡边操作,其对应最优设计的控制性能要优于序贯设计方法。

### 3 结论

通过将 LQR 嵌入到过程控制与工艺设计集成优化框架中,整个动态优化问题转化为一个双层决策问题。在控制决策层采用 LQR 获得显式最优控制律,并将其反馈给设计决策层,从而使复杂的动态优化问题能够在合理的计算要求内得以求解。将该方法应用于一个连续搅拌釜式反应器中,结果显示,基于 LQR 控制的集成设计方法可以确保所设计的化工过程在外部扰动情况下仍能维持在接近设计边界和产品质量边界下稳定操作,无论是从经济性能方面来讲还是从动态性能方面考虑,集成设计方法的结果都要优于序贯设计方法。但本文中仅考虑了过程扰动形式已知的情况,而没有考虑过程的不确定性,因此,在集成优化过程中同时考虑过程扰动和不确定性是后续要开展的工作。

### 参考文献

[1] 许锋,罗雄麟.控制与工艺集成优化设计研究进展[J].化工进展,2005,24(5):483-488.  
 [2] Yuan Z, Chen B, Sin G, *et al.* State-of-the-art and progress in the optimization-based simultaneous design and control for chemical processes[J]. *AIChE Journal*, 2012, 58(6):1640-1659.

[3] Sharifzadeh M. Integration of process design and control: A review [J]. *Chemical Engineering Research and Design*, 2013, 91(12): 2515-2549.  
 [4] Luyben M L, Floudas C A. Analyzing the interaction of design and control-2. Reactor-separator-recycle system [J]. *Computers & Chemical Engineering*, 1994, 18(10):971-993.  
 [5] Mohideen M J, Perkins J D, Pistikopoulos E N. Optimal design of dynamic systems under uncertainty[J]. *AIChE Journal*, 1996, 42(8):2251-2272.  
 [6] Khajuria H, Pistikopoulos E N. Optimization and control of pressure swing adsorption processes under uncertainty[J]. *AIChE Journal*, 2013, 59(1):120-131.  
 [7] Malcolm A, Polan J, Zhang L, *et al.* Integrating systems design and control using dynamic flexibility analysis [J]. *AIChE Journal*, 2007, 53(8):2048-2061.  
 [8] Patel J, Uygun K, Huang Y. A path constrained method for integration of process design and control[J]. *Computers & Chemical Engineering*, 2008, 32(7):1373-1384.  
 [9] Lu X, Li H, Yuan X. Pso-based intelligent integration of design and control for one kind of curing process[J]. *Journal of Process Control*, 2010, 20(10):1116-1125.  
 [10] Moon J, Kim S, Linninger A A. Integrated design and control under uncertainty; Embedded control optimization for plantwide processes [J]. *Computers & Chemical Engineering*, 2011, 35(9):1718-1724.  
 [11] Bahakim S S, Ricardez-Sandoval L A. Simultaneous design and MPC-based control for dynamic systems under uncertainty: A stochastic approach [J]. *Computers & Chemical Engineering*, 2014, 63:66-81.  
 [12] Bahakim S S, Rasoulilian S, Ricardez-Sandoval L A. Optimal design of large-scale chemical processes under uncertainty: A ranking-based approach[J]. *AIChE Journal*, 2014; in press.  
 [13] Trainor M, Giannakeas V, Kiss C, *et al.* Optimal process and control design under uncertainty: A methodology with robust feasibility and stability analyses [J]. *Chemical Engineering Science*, 2013, 104: 1065-1080.  
 [14] Lu X, Li H, Duan J, *et al.* Integrated design and control under uncertainty: A fuzzy modeling approach[J]. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2010, 49(3):1312-1324.  
 [15] 陈启石,冯霄.反应器网络综合优化方法的研究进展[J].现代化工,2002,22(5):14-18.  
 [16] Kookos I K, Perkins J D. An algorithm for simultaneous process design and control[J]. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2001, 40(19):4079-4088.  
 [17] Moon J, Kim S, Linninger A A. Embedded control for optimizing flexible dynamic process performance[J]. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2011, 50(9):4993-5004.  
 [18] Seferlis P, Georgiadis M C. The integration of process design and control[M]. Amsterdam, The Netherlands: Elsevier, Ltd, 2004. ■