'91 韓國自動制御學術會議論文集 1991. 10.22~24

화학 공정의 편미분 방정식 모델설정과 제어에 관한 연구

° 최 영 순, 이 인 범, 장 근 수
포항공과대학 화학공학과

Development of Process Models by Partial Differential Equations and Control Systems

° Young - Soon Choe, In - Beum Lee, Kun Soo Chang
Dept. of Chemical Engineering, POSTECH

ABSTRACT

A chemical process model represented by partial differential equations was studied as one of nonlinear distributed parameter control problems. Using an optimal control theory in the form of maximum principles based on nonlinear integral equations, an algorithm to solve the problem was developed and coded into a computer program.

1. 서론

30여년의 역사를 가진 분산변수시스템(Distributed Parameter System) 이론 분야는, 대상 프로세스에 있어 공간에 분포된 변수를 그 위치와 함께 시간에 대해 종속적인 것으로 파악하여, 즉 공간과 시간에 모두 종속되는 변수로써 취급한다. 이러한 프로세스는 대부분 편미분 방정식이나 적분방정식 형태로 표현되며, 상미분 방정식계보다 수식이 더 복잡하고 그 구조가 달라 계의 제어성(controllability), 관측성(observability), 최적제어(optimal control)조건 등을 정립하기가 간단하지 않다.

본 논문에서는 상미분식이나 편미분식에 대해서가 아닌 적분식에 대하여 최적제어조건을 적용하는 방법과 함께 비선형 적분방정식(nonlinear integral equations)에 대해 최대치 원리(maximum principle)의 형태로서 최적제어를 시도할 때에 선행되어야 할 필요조건을 소개한다.

이제까지, 물질전달, 열전달, 유동현상, 화학반응을 수반하는 화학공정의 공정모델은 근사적인 묘사로서 상미분 방정식에 의존하거나 실험에 의한 방법을 채택하는 것이 보편적인 해석 방식이었으나, 이러한 많은 공정의 정확한 묘사는 실제로 편미분 방정식이어야 한다.

본 논문에서는 이러한 필요에 따라 전산기를 이용하여 분산변수공정의 편미분 방정식을 보다 정확하고 효율적으로 제어하기 위하여, 앞서 언급한 비선형 적분방정식에 대한 최대치 원리로서의 최적제어를 도입한 알고리즘을 개발하고, 이를 코드화하였다.

2. 편미분 방정식 모델과 제어문제

화학 공정의 대표적인 편미분 방정식 모델로써, 연속형 관형 반응기에서의 비가역 1차 화학 반응인 A → B 의 정상상태 문제를 대상으로 하여 변분 미적분법 (calculus of variations)을 적용한다. 정상상태의 물질 수지식을 무차원화하여 표현하면

$$\frac{1}{P_e}\frac{d^2c}{dz^2} - \frac{dc}{dz} = -D_a(1-C)\cdot\exp[\theta/(1+\theta/\gamma)] \quad (1)$$

경계조건은,

$$BC1 \quad z=0 \quad P_eC(0^+) = \left.\frac{dc}{dz}\right|_{z=0^+} \quad (2)$$

$$BC2 \quad z=1 \quad \frac{1}{P_e}\left.\frac{dc}{dz}\right|_{z=1^-} = 0 \quad (3)$$

여기서 C는 성분 B의 질량 분율

θ는 무차원 온도 (반응기 내부)

z는 무차원 길이

P_e는 축방향 Peclet 수

D_a는 Damköhler 수

γ는 무차원 활성화 에너지 이다.

반응기의 최적 온도 제어를 목표로 하여 목적함수를 정하면,

$$\text{minimize } \{ P = C(1) + \int_0^1 -[\theta(z) - \theta_d(z)]^2 dz \} \quad (4)$$

분산 변수 제어 문제는 해당 적분식 문제로 재구성할 수 있으므로 다음과 같은 절차를 따라 수행한다. Pontriagin 의 최대치 원리에 의한 costate 식은 다음과 같다.

$$\frac{1}{P_e}\lambda_{zz} + \lambda_z = \lambda \cdot D_a \cdot \exp[\theta / (1+\theta/\gamma)] \quad (5)$$

$$\text{BC1} \quad \frac{1}{P_e}\lambda_z(0) = 0 \quad (6)$$

$$\text{BC2} \quad \frac{1}{P_e}\lambda_z(1) + \lambda(1) = 1 \quad (7)$$

상태식의 Green 함수는,

$$G(z;\zeta) = \begin{cases} -1 & 0 \leqq \zeta \leqq z \\ -\exp[P_e(z-\zeta)] & z < \zeta \leqq x \end{cases} \quad (8)$$

상태식의 적분 표현은,

$$C(z) = \int_z^1 \exp[P_e(z-\zeta)] \cdot D_a \cdot (1-C) \cdot \exp[\theta/(1+\theta/\gamma)](\zeta)d\zeta + \int_0^z D_a \cdot (1-C) \cdot \exp[\theta/(1+\theta/\gamma)](\zeta)\, d\zeta \quad (9)$$

$$Y = 1 - C \quad (10)$$

라 하면, 식 (9)는 다음과 같이 된다.

$$Y = 1 - \int_z^1 \exp[P_e(z-\zeta)] \cdot D_a \cdot Y \cdot \exp[\theta/(1+\theta/\gamma)](\zeta)\, d\zeta + \int_0^z D_a \cdot Y \cdot \exp[\theta/(1+\theta/\gamma)](\zeta)\, d\zeta \quad (11)$$

costate 식의 Green 함수는,

$$GL(z;\zeta) = \begin{cases} -\exp[P_e(\zeta-z)] & 0 \leqq \zeta \leqq z \\ -1 & z < \zeta \leqq x \end{cases} \quad (12)$$

costate 식에 대한 적분표현은,

$$\lambda(z) = \int_z^1 -\lambda \cdot D_a \cdot \exp[\theta/(1+\theta/\gamma)](\zeta)\, d\zeta + \int_0^z -\lambda \cdot D_a \cdot \exp[P_e(\zeta-z)] \cdot \exp[\theta/(1+\theta/\gamma)](\zeta)\, d\zeta \quad (13)$$

상태식 (13)은 매립 (imbeding) 방법을 통하여 다음과 같은 초기 조건 미분식으로 전환될 수 있다.

$$Y_x(z,x) = D_a \cdot \exp[\theta/(1+\theta/\gamma)] \cdot J(z,x) \cdot \exp(-P_e x) \cdot (1-e(x)) = F_1(J,e,z,x) \quad (14)$$

$$\text{IC} \quad Y(z,x)\big|_{x=z} = 1 - e(z) \quad (15)$$

$$J_x(z,x) = D_a \cdot \exp[\theta/(1+\theta/\gamma)] \cdot J(z,x) \cdot \exp(-P_e x) [-\exp(P_e x) - R(x)] = F_2(J,R,z,x) \quad (16)$$

$$\text{IC} \quad J(z,x)\big|_{x=z} = -\exp(P_e \cdot z) - R(z) \quad (17)$$

$$e(x) = D_a \cdot \exp[\theta/(1+\theta/\gamma)] \cdot [1-e(x)] \cdot [1 + R(x) \cdot \exp(-P_e x)] = F_3(R,e,x) \quad (18)$$

$$\text{IC} \quad e(0) = 0 \quad (19)$$

$$R(x) = D_a \cdot \exp[\theta/(1+\theta/\gamma)] \cdot [-\exp(P_e x) - R(x)] \cdot [1 + R(x) \cdot \exp(-P_e x)] = F_4(R,x) \quad (20)$$

$$\text{IC} \quad R(0) = 0 \quad (21)$$

$$C = I - Y \quad (22)$$

같은 방법으로 costate 식 (5) ~ (7)도 초기 조건 미분식으로 다음과 같이 표현될 수있다.

$$\lambda_x(z,x) = \bar{J}(z,x) \cdot D_a \cdot \exp[\theta/(1+\theta/\gamma)](x) [1 - \exp(P_e x) \cdot \bar{e}(x)] \quad (23)$$

$$\text{IC} \quad \lambda(z,x)\big|_{x=z} = 1 - (\exp(-P_e z)) \cdot \bar{e}(z) \quad (24)$$

$$\bar{J}_x(z, x) = \bar{J}(z, x) \cdot D_a \cdot \exp[\theta/(1+\theta/\gamma)](x)[-1 - \exp(-P_e x) \cdot \bar{R}(x)] \quad (25)$$

$$\text{IC} \quad \bar{J}(z, x)\big|_{x=z} = -1 - \exp(-P_e z) \cdot \bar{R}(z) \quad (26)$$

$$\bar{e}(x) = D_a \cdot \exp[\theta/(1+\theta/\gamma)] \cdot [1 - \exp(-P_e x) \cdot \bar{e}(x)] \cdot [\exp(P_e x) + \bar{R}(x)] \quad (27)$$

$$\text{IC} \quad \bar{e}(0) = 0 \quad (28)$$

$$\bar{R}(x) = D_a \cdot \exp[\theta/(1+\theta/\gamma)] \cdot [-1 - \exp(-P_e x) \cdot \bar{R}(x)] \cdot [\exp(P_e x) + \bar{R}(x)] \quad (29)$$

$$\text{IC} \quad \bar{R}(0) = 0 \quad (30)$$

Hamiltonian 함수는 다음과 같이 정의된다.

$$H(\theta(z)) = -[\theta(z) - \theta_d(z)]^2 + \lambda \cdot D_a \cdot (1 - C) \cdot \exp[\theta/(1+\theta/\gamma)] \quad (31)$$

Pontriagin 의 최대치 원리에 의하면, 다음과 같은 최적 조건으로 귀착된다.

$$H(\theta^*(z)) (=) \max_{\theta \in \Theta} H(\theta(z)) \quad (32)$$

여기서 $\theta^*(z)$ 는 최적 제어이다.

3. 결과

이상의 제어이론을 바탕으로 최적제어 (optimal control policy)를 위해 구배알고리즘(gradient algorithm)을 사용하여 최적온도 및 농도 제어 프로화일을 구하였고 그 결과는 그림 1~2와 같다. 1번의 계산으로 원하는 결과에 이르렀으며 PS/2 를 사용한 계산 시간은 2~3초에 불과하였다.

참고문헌

1. Wang, F. Y., I. B. Lee, and K. S. Chang, " Necessary Conditions in the Optimal Control of Nonlinear Equations ", '89 KACC Proceedings, pp 947 (1989)
2. Wang, F. Y., Ph. D. Thesis (1985), University of Waterloo, Waterloo, Ont., Canada
3. Butkovskiy, A. G., " Structural Theory of Distributed Systems ", Ellis Horwood Ltd., 1983
4. Ray, W. H., and D. G. Lainiotis, " Distributed Parameter Systems ", Marcel Dekker Inc., 1978

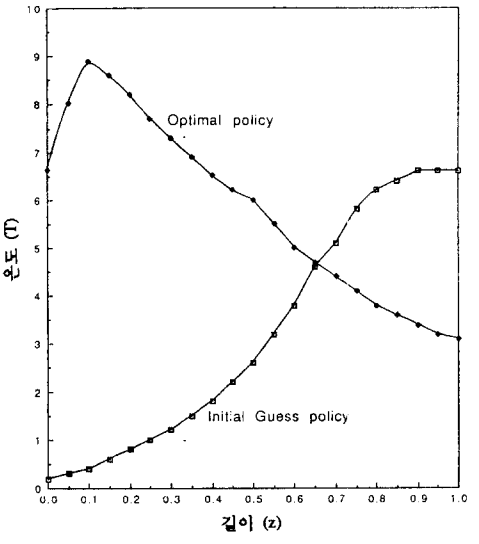

그림 1. 온도 프로화일

Fig 1. Temperature Profiles

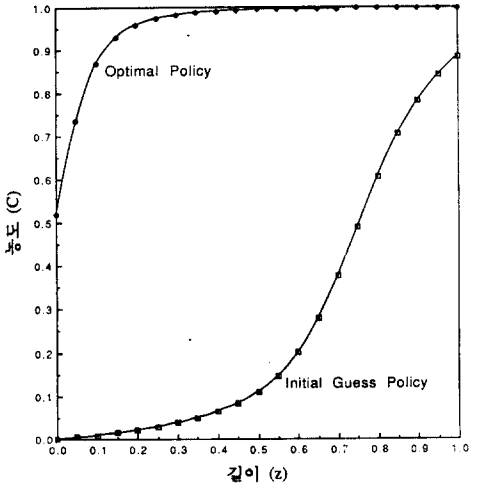

그림 2. 농도 프로화일

Fig 2. Concentration Profiles