

SLOVENSKÁ TECHNICKÁ UNIVERZITA V BRATISLAVE
Fakulta chemickej a potravinárskej technológie
Oddelenie informatizácie a riadenia procesov
Ústav informatizácie, automatizácie a matematiky
Radlinského 9, 812 37 Bratislava



Ing. Tomáš Hirmajer

DYNAMICKÁ OPTIMALIZÁCIA PROCESOV S HYBRIDNOU DYNAMIKOU

Dizertačná práca

na získanie vedecko-akademickej hodnosti
philosophiae doctor

v odbore doktorandského štúdia:
28–30–9 Chemické inžinierstvo a riadenie procesov

špecializácia:
Riadenie procesov

školiteľ:
Prof. Dr. Ing. Miroslav Fikar

Bratislava, 2006

Abstrakt

V dizertačnej práci sa zaoberáme dynamickou optimalizáciou procesov opísanou skupinami diferenciálnych rovníc, ktoré sa v určitých časových momentoch prepínajú. Podmienky prepnutia sa menia v závislosti od charakteru procesu. Tieto systémy sa vo všeobecnosti označujú ako hybridné. V praxi existuje veľké množstvo procesov, ktoré charakterizuje zmena operačných fáz. Či už ide o procesy s prepínaním dynamiky na základe jednoduchšej logickej podmienky, ako napríklad zmena matematického opisu pri zásobníkoch kvapaliny z bez interakcie na s interakciou, alebo sa jedná o zložitejšie vsádzkové a polovsádzkové procesy s chemickou reakciou, ktoré sú typické pre farmaceutický priemysel, pre výrobu polymérov, biotechnológiu, alebo pre procesy nitrifikácie a denitrifikácie prebiehajúce v čističkách odpadových vôd.

V práci je prezentovaný numerický prístup k riešeniu problémov dynamickej optimalizácie hybridných systémov, pomocou ktorého je možné problém dynamickej optimalizácie pretransformovať na problém statickej optimalizácie – nelineárne programovanie (NLP). Tento problém je potom možné riešiť niektorou gradientovou metódou za použitia optimalizačného algoritmu typu SQP (postupné kvadratické programovanie) na získanie optimálnych hodnôt. Preto na začiatku práce sa venujeme odvodeniu podmienok optimality na základe variačného počtu a s uvažovaním podmienky prepnutia. Tieto podmienky boli potrebné pre odvodenie gradientov účelovej funkcie a obmedzení na základe adjugovaných rovníc. Výhody a nevýhody prezentovaného prístupu oproti bežne používaným citlivostným rovnicami a metódam konečných diferencií sú tiež obsiahnuté v práci.

V ďalšej časti práce je ukázaný algoritmus riešenia, ktorý je následne aplikovaný na niektoré zariadenia v procesnom priemysle. Konkrétne dva zásobníky kvapaliny, ktorých umiestnenie je v rôznej výške, čo vedie k zmiešanému matematickému opisu. Je uvažovaný problém minimalizácie času pre jednu a viacero vstupných veličín a tiež problém LQ riadenia. Metóda je aplikovaná aj na dvojstupňový chemický reaktor, v ktorom v určitom časovom momente dochádza k pridaniu jednej zložky, čo vedie k zmene matematického opisu. Úlohou je maximalizovať množstvo produktu pri splnených podmienkach na minimálnu koncentráciu želaného produktu a maximálny koncový čas. Reaktor je pôvodne riešený pomocou citlivostných rovníc, čo vedie k zaujímavému porovnaniu riešenia s adjugovanými rovnicami, kde na základe charakteru prístupu sme mohli meniť počet intervalov, čím sme zlepšovali výsledné riešenie bez výraznej straty rýchlosti vzhľadom na celkový čas riešenia.

Abstract

This dissertation work deals with dynamic optimization processes which are described by sets of differential equations changed in the switching time. The switching conditions which occur depend on the process character. These systems in general are called as hybrid.

A large number of processes are characterized by the change of the operational phases. The switching conditions can be given on the basis of the single logical condition, *e.g.* tanks with and without interaction. On the other hand, the processes with chemical reactions are more complicated and are typical *e.g.* for the production of fine chemicals, specialties (pharmaceuticals), polymers, biotechnology or for wastewater treatment, where nitrification/denitrification process takes place.

This dissertation work presents a numerical approach to solve dynamic optimization problems of hybrid systems. The dynamic optimization problem is transformed into the static optimization problem, which is called non-linear programming (NLP). Then it is possible to solve the problem with one of the gradient-based optimization methods. The gradient computational algorithm to obtain optimal control profiles is of a SQP (successive quadratic programming) type. The conditions of the optimality are derived in the third chapter of this work. These conditions based on the variational method consider the switching structure and they are necessary for the derivation of the adjoint equations. The advantages and drawbacks of the presented method are compared with the sensitivity equations approach.

In the next part of the dissertation work is shown the algorithm solution, which is applied on some chemical engineering processes. First, the problem of a hybrid coupled tanks in different vertical position is considered. The minimum time problem for one or more control variables and the LQ cost problem are solved. Secondly, a two stage reactor system with chemical reactions is considered. The aim of the optimization is to get a maximum amount of the desired component not later than at final time subject to a constraint that the final concentration of the desired component should be higher than, or equal to a desired value. The reactor was initially solved with the sensitivity equations approach, what gives an interesting opportunity to compare with the adjoint approach, where increased number of time intervals do not change the number of differential equations comparing to the originally applied method. It follows that the difference in computational time of the algorithm increases which is the main drawback of this method.

Predslov

Predkladaná dizertačná práca pozostáva z nasledujúcich kapitol

Kapitola 1: Úvod

Kapitola 2: Prehľad metód dynamickej optimalizácie

Kapitola 3: Riešenie problémov optimálneho riadenia hybridných systémov

Kapitola 4: Optimálne riadenie zásobníkov kvapaliny

Kapitola 5: Optimálne riadenie dvojstupňového chemického reaktora

Kapitola 6: Záver a perspektívy

Materiál použitý v kapitole 3 bol z časti publikovaný na konferencii

T. Hirmajer, M. Fikar a K. Calík. Computations of sensitivity coefficients for dynamic systems. V *Proceedings of the 15th International Conference Process Control'05*, Štrbské Pleso, High Tatras, Slovakia, CDROM 209f, 2005.

Materiál použitý v kapitole 4 bol podrobne opísaný v technickej správe

T. Hirmajer a M. Fikar. *Optimal Control of a Hybrid Dynamical System: Two Coupled Tanks*. Department of Information Engineering and Process Control, FCFT SUT, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia, 2005.

a publikovaný v nasledujúcich príspevkoch

T. Hirmajer a M. Fikar. Dynamic optimization of a hybrid coupled tanks system. *Journal of Electrical Engineering*, 57(3):167–172, 2006.

T. Hirmajer a M. Fikar. Optimálne riadenie systémov s hybridnou dynamikou. *AT&P Journal*, 12(12):81–84, 2005.

T. Hirmajer a M. Fikar. Optimal control of a hybrid coupled tanks system. V R. Trappl, redaktor, *Cybernetics and Systems 2006*, Austrian Society for Cybernetic Studies, Freyung 6/6, A-1010 Vienna, Austria, diel 1, strany 41-45, 2006.

Materiál použitý v kapitole 5 bol podrobne opísaný v technickej správe

T. Hirmajer a M. Fikar. *Optimal Control of a Hybrid Dynamical System: Two-stage Reactor System*. Department of Information Engineering and Process Control, FCFT SUT, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia, 2006.

a publikovaný v nasledujúcich príspevkoch

T. Hirmajer a M. Fikar. Optimal control of a two-stage reactor system, *Chemical Papers*, 60(5):381–387, 2006.

T. Hirmajer a M. Fikar. Optimálne riadenie sústavy chemických reaktorov. *AT&P Journal*, 13(11):69–72, 2006.

T. Hirmajer a M. Fikar. Optimal control of a two-stage reactor system. V *Proceedings of the 7th International Scientific – Technical Conference Process Control’06*, University of Pardubice, Kouty nad Desnou, Czech Republic, CDROM AR021, 2006.

"Where shall I begin, please your Majesty?" he asked.

"Begin at the beginning", the king said, gravely, "and go on until you come to the end: then stop."

Lewis Carroll
"Alice in Wonderland"

Touto cestou by som chcel poďakovať školiteľovi Prof. Dr. Ing. Miroslavovi Fikarovi za odborné vedenie počas doktorandského štúdia, ako aj za cenné rady, podnety a pripomienky, ktoré mi rozšírili rozhľad nielen v danej problematike, ale aj z iných oblastí, a tak v nemalej miere prispeli skompletizovať predkladanú dizertačnú prácu.

Súčasne moja vďaka patrí aj ďalším pracovníkom Ústavu informatizácie, automatizácie a matematiky (UIAM), ktorí svojimi cennými radami, pripomienkami a postojmi tiež prispeli k vytvoreniu priaznivých podmienok pre realizáciu predkladanej dizertačnej práce.

Poďakovanie patrí aj mojej rodine za prečítanie a gramatickú korekciu práce, ako aj za vytvorenie vhodných podmienok pre doktorandské štúdium. Nakoniec, ale nie najmenej, by som tiež chcel poďakovať priateľke za trpezlivosť, pomoc a podporu počas doktorandského štúdia. Bez podpory týchto ľudí by dané štúdium bolo len veľmi ťažko realizovateľné.

Tomáš Hirmajer
Bratislava, Slovensko

Práca bola napísaná v L^AT_EXu, posledná úprava – 19. januára 2007

Obsah

| | |
|--|-------------|
| Zoznam obrázkov | ix |
| Zoznam tabuliek | xi |
| Zoznam symbolov a skratiek | xiii |
| 1 Úvod | 19 |
| 1.1 Základné myšlienky | 20 |
| 1.1.1 Prečo je dôležitá optimálna výroba | 20 |
| 1.1.2 Priemyselné prostredie, priemyselná prax | 21 |
| 1.1.3 Cieľ riadenia | 22 |
| 1.1.4 Charakteristika optimálneho riadenia | 23 |
| 1.2 Cieľ dizertačnej práce | 23 |
| 1.3 Hlavné črty dizertačnej práce | 23 |
| 2 Prehľad metód dynamickej optimalizácie | 25 |
| 2.1 Hybridné systémy | 26 |
| 2.2 Definícia systému a účelovej funkcie | 27 |
| 2.3 Analytické metódy | 30 |
| 2.3.1 Dynamické programovanie | 30 |
| 2.3.2 Pontrjaginov princíp minima/maxima | 32 |
| 2.3.3 Variačný počet | 33 |
| 2.4 Numerické metódy | 34 |
| 2.4.1 Nepriame metódy | 34 |
| Iterácia hraničnej podmienky | 35 |
| Iterácia vektora riadenia | 36 |
| 2.4.2 Priame metódy | 37 |
| Sekvenčná metóda | 37 |

| | |
|--|-----------|
| Simultánná metóda | 38 |
| 3 Riešenie problémov optimálneho riadenia | 43 |
| 3.1 Parametrizácia vektora riadenia | 43 |
| 3.2 Spojité riadenie po úsekoch | 44 |
| 3.3 Definícia optimalizovaných premenných | 45 |
| 3.4 Formulácia problému | 45 |
| 3.5 Definícia obmedzení na trajektóriu | 46 |
| 3.6 Metódy výpočtu gradientov | 49 |
| 3.7 Odvodenie gradientov z podmienok optimality | 51 |
| 3.7.1 Definícia nespojitosti a podmienky prepnutia | 52 |
| 3.7.2 Úprava gradientov vzhľadom na čas | 55 |
| 3.8 Algoritmus riešenia | 56 |
| 3.8.1 Implementácia algoritmu riešenia | 57 |
| 3.8.2 Integrácia adjugovaných rovníc | 57 |
| 4 Dva zásobníky kvapaliny | 59 |
| 4.1 Model | 59 |
| 4.2 Definícia problému | 60 |
| 4.2.1 Problém minimalizácie času | 60 |
| 4.2.2 Problém LQ riadenia | 62 |
| 4.3 Odvodenie gradientov | 62 |
| 4.4 Dosaiahnuté výsledky | 63 |
| 4.4.1 Problém minimalizácie času | 63 |
| Optimálne riadenie s viacerými riadiacimi veličinami | 63 |
| Optimálne riadenie s jednou riadiacou veličinou | 63 |
| 4.4.2 Problém LQ riadenia | 63 |
| 5 Dvojstupňový chemický reaktor | 69 |
| 5.1 Proces | 69 |
| 5.2 Model | 70 |
| 5.3 Definícia problému | 71 |
| 5.4 Odvodenie gradientov | 72 |
| 5.5 Dosaiahnuté výsledky | 72 |
| 6 Záver a perspektívy | 79 |
| 6.1 Prínosy dizertačnej práce | 80 |
| Publikácie autora | 83 |
| Literatúra | 85 |

Zoznam obrázkov

| | | |
|-----|--|----|
| 2.1 | Priebeh stavových veličín pre pevný koncový čas a koniec | 28 |
| 2.2 | Priebeh stavových veličín pre pevný koncový čas a voľný koniec | 28 |
| 2.3 | Priebeh stavových veličín pre voľný koncový čas a pevný koniec | 28 |
| 2.4 | Priebeh stavových veličín pre voľný koncový čas aj koniec | 28 |
| 2.5 | Geometrická interpretácia úlohy optimálneho riadenia s pevným koncovým časom aj koncom | 29 |
| 2.6 | Geometrická interpretácia Bellmanovho princípu optimality v úlohách optimálneho riadenia | 31 |
| 3.1 | Ukážka parametrizácie vektora riadenia a priebeh stavových veličín pre 6 fixných časových intervalov | 44 |
| 3.2 | Grafická interpretácia algoritmu riešenia | 58 |
| 4.1 | Zásobníky kvapaliny | 59 |
| 4.2 | Simulácia zásobníkov kvapaliny s konštantným prietokom | 61 |
| 4.3 | Priebeh dynamiky s optimálnym riadením pre problém minimalizácie času pri použití viacerých riadiacich veličín | 65 |
| 4.4 | Optimálny profil riadenia pre problém minimalizácie času pri použití viacerých riadiacich veličín | 65 |
| 4.5 | Priebeh dynamiky s optimálnym riadením pre problém minimalizácie času pri použití jednej riadiacej veličiny | 66 |
| 4.6 | Optimálny profil riadenia pre problém minimalizácie času pri použití jednej riadiacej veličiny | 66 |
| 4.7 | Výška hladiny v druhom zásobníku pre LQ problém s rôznymi hodnotami váhového koeficienta | 67 |
| 4.8 | Optimálny profil riadenia pre LQ problém pri rôznych hodnotách váhového koeficienta r | 67 |

| | | |
|-----|--|----|
| 5.1 | Dvojstupňový chemický reaktor | 69 |
| 5.2 | Optimálne stavové trajektórie zložiek A, B, C | 74 |
| 5.3 | Optimálne stavové trajektórie zložiek D, E, F | 75 |
| 5.4 | Optimálny profil riadenia pre 6 diskretizovaných intervalov | 75 |
| 5.5 | Optimálny profil riadenia pre 10 diskretizovaných intervalov | 76 |
| 5.6 | Optimálny profil riadenia pre 20 diskretizovaných intervalov | 76 |
| 5.7 | Priebeh účelovej funkcie pre 6 diskretizovaných intervalov v závislosti od počtu iterácií | 77 |
| 5.8 | Priebeh účelovej funkcie pre 6 diskretizovaných intervalov v závislosti od času so zaznamenaným časom prepnutia t_s | 77 |

Zoznam tabuliek

| | | |
|-----|---|----|
| 2.1 | Klasifikácia numerických metód dynamickej optimalizácie | 40 |
| 2.2 | Porovnanie optimalizačných metód | 41 |
| 5.1 | Vplyv zväčšujúceho sa počtu časových intervalov P na hodnotu účelovej funkcie J_0 | 74 |

Zoznam symbolov a skratiek

Kurzívou vytlačené písmená označujú skalárne veličiny.

Príklad: čas – t , skalárna funkcia – f

Kurzívou a tučne vytlačené malé písmená označujú stĺpcové vektory. Riadkové vektory sú označené operátorom transpozície.

Príklad: stĺpcový vektor – \boldsymbol{x} , riadkový vektor – \boldsymbol{x}^T

Kurzívou a tučne vytlačené veľké písmená označujú matice.

Príklad: matica – \boldsymbol{I}

Kvôli zjednodušeniu zápisu je niekedy vynechaná závislosť vektoru od času.

Príklad: vektor $\boldsymbol{x}(t)$ je označený ako \boldsymbol{x}

Symboly

| | |
|------------------|--|
| \boldsymbol{a} | vektorový koeficient |
| a_1 | skalárny koeficient |
| a_2 | skalárny koeficient |
| \boldsymbol{b} | vektorový koeficient |
| \boldsymbol{c} | vektorový koeficient |
| \boldsymbol{f} | vektor stavových rovníc |
| F | podintegrálna funkcia účelovej funkcie alebo obmedzení |
| g | obmedzenie stavových veličín typu rovnosť, alebo nerovnosť |
| g_i | podmienka prepnutia dynamiky |
| G | zložka účelovej funkcie alebo obmedzení, ktorá závisí od konečných podmienok |
| H | Hamiltonova funkcia |

| | | |
|-----------|--|-----|
| I | jednotková matica | |
| J | účelová funkcia, alebo obmedzenie | |
| k | celkový počet obmedzení | |
| k_e | počet obmedzení typu rovnosť | |
| k_i | počet obmedzení typu nerovnosť | |
| K | počet prvkov ortogonálnej kolokácie | |
| L | integrálna časť gradientov | |
| n_p | rozmer vektora parametrov | |
| n_q | celkový počet iterácií systému | |
| n_u | rozmer vektora riadiacich veličín | |
| n_x | rozmer vektora stavových veličín | |
| N | stupeň polynómu | |
| p | vektor nezávislých parametrov | |
| P | celkový počet intervalov | |
| P_j | Lagrangeov polynóm | |
| t | čas | min |
| t_P | koncový čas | min |
| t_s | čas prepnutia dynamiky | min |
| u | vektor riadenia | |
| \bar{u} | optimalizačná premenná úsekovej konštanty riadenia | |
| w | kladný váhový kolokačný koeficient | |
| x | vektor stavov | |

Symbols – zásobník kvapaliny

| | | |
|----------|--|----------------------------|
| F | prierez plochy zásobníkov | m^2 |
| h | vertikálna vzdialenosť medzi zásobníkmi | m |
| h^s | ustálená výška hladiny v zásobníkoch | m |
| h_2^w | žiadaná výška kvapaliny v druhom zásobníku v koncovom čase | m |
| k_{11} | konštanta pre prvý zásobník | $m^{2,5} \text{ min}^{-1}$ |
| k_{22} | konštanta pre druhý zásobník | $m^{2,5} \text{ min}^{-1}$ |
| q^s | ustálený prietok kvapaliny do zásobníkov | $m^3 \text{ min}^{-1}$ |
| r | kladný váhový koeficient | |
| u/q | prietok kvapaliny do zásobníkov | $m^3 \text{ min}^{-1}$ |
| x/h | výška hladiny v zásobníkoch | m |

Symbols – dvojstupňový chemický reaktor

| | | |
|-------------|---|--|
| c_B^s | koncentrácia pridanej zložky B v čase prepnutia | mol m^{-3} |
| c_D^w | požadovaná minimálna koncentrácia zložky D v koncovom čase | mol m^{-3} |
| $k_1(T)$ | prvá rýchlostná konštanta | $\text{m}^3 \text{mol}^{-1} \text{min}^{-1}$ |
| $k_2(T)$ | druhá rýchlostná konštanta | min^{-1} |
| S | množstvo pridanej zložky B po prvej reakčnej fáze s koncentráciou c_B^s | m^3 |
| u/T | teplotný profil v reaktore počas prvej reakčnej fázy | K |
| V_1 | počiatočný objem zložky A vlozenej do prvého chemického reaktora | m^3 |
| V_2 | celkový objem zmesi vlozenej do druhého chemického reaktora | m^3 |
| x/c_{A-F} | koncentrácia zložky A–F | mol m^{-3} |

Grécke písmená

| | |
|--------------|--|
| ψ, ϕ | Lagrangeov polynóm |
| Γ | Lagrangeova funkcia |
| ∇ | gradientová diferenciacia |
| Δ | časová diferenciacia |
| Δ | nespojitosť stavového vektora v čase prepnutia |
| σ | odchýlka |
| λ | vektor Lagrangeových multiplikátorov |

Dolný index

| | |
|-----|---------------------|
| 0 | hodnota na začiatku |
| i | i -tý prvok |
| j | j -tá funkcia |

Horný index

| | |
|-----|------------------------------|
| – | hodnota pred časom prepnutia |
| + | hodnota po čase prepnutia |
| * | optimálna hodnota |
| max | horné ohraničenie |
| min | dolné ohraničenie |

Skratky

| | |
|-----|---|
| BCI | Boundary Condition Iteration – iterácia hraničnej podmienky |
|-----|---|

| | |
|-------|--|
| CVP | Control Vector Parametrization – parametrizácia vektora riadenia |
| CVI | Control Vector Iteration – iterácia vektora riadenia |
| DAE | Differential Algebraic Equations – diferenciálno algebraické rovnice |
| DSM | Direct Shooting Method – priama nastreľovacia metóda |
| IVP | Initial Value Problem – problém počiatkovej hodnoty |
| NLP | Non-Linear Programming – nelineárne programovanie |
| NLPQL | Non-Linear Programming Quadratic Line search – implementácia SQP algoritmu do programovacieho jazyka Fortran |
| NR | Newton-Raphson method – Newton Raphsonova metóda |
| OC | Orthogonal Collocation – ortogonálna kolokácia |
| ODE | Ordinary Differential Equations – diferenciálne rovnice |
| PMP | Pontryagin's Principle of Minimum – Pontrjaginov princíp minima |
| QL | Quasi-Linearization Method – kvázi linearizačná metóda |
| QN | Quasi-Newtonian method – kvázi Newtonova metóda |
| SD | Steepest Descent method – metóda najstrmšieho spádu |
| SQP | Successive Quadratic Programming – postupné kvadratické programovanie |
| TPBVP | Two Point Boundary Value Problem – dvojbodovo ohraničený problém |

Úvod

Optimalizačné problémy sa vyskytujú v každom obore ľudskej činnosti. Každodenne riešime veľké množstvo problémov, ako niečo môžeme previesť najlepším spôsobom. Optimalizačný problém vznikne v situáciách, keď je potrebné vybrať (zvoliť, rozhodnúť) nejaký variant riešenia. Inými slovami sa snažíme vybrať riešenie, ktoré je pre nás v nejakom zmysle najvýhodnejšie. Hľadaním najlepšej varianty riešenia vznikne optimalizačný problém, ktorý môže byť riešený rôznymi optimalizačnými metódami. Aby sme mohli optimalizačný problém matematicky formulovať, je potrebné vytvoriť matematický model situácie – vytvoriť systém.

Postup spočíva vo vytvorení matematickej formulácie daného optimalizačného problému, matematického modelu situácie a v konečnom vytvorení systému. Záverečná fáza spočíva v porovnávaní rôznych variant riešenia a vo vybraní najlepšieho dostupného riešenia na základe počiatočných podmienok. Je jasné, že porovnávať rôzne varianty riešenia môžeme iba na základe simulačného modelu, v reálnej rozhodovacej situácii to nie je možné. Stále však musíme mať na pamäti, že model reálnej situácie (reálneho objektu) je vždy zjednodušený.

Najzákladnejšie problémy, s ktorými sa môžeme stretnúť pri optimalizácii daného procesu sú nasledovné

- matematický model, s ktorým pracujeme pri simuláciách, neopisuje verne skutočnú situáciu, pretože je zjednodušený,
- model, ktorý opisuje skutočnú situáciu, je veľmi ťažko matematicky opísateľný,
- voľba kritéria, na základe ktorého vyberáme najlepšiu variantu riešenia, je subjektívna,
- často je potrebné podľa výsledkov upresňovať model a modifikovať kritérium.

Prechod z reálneho optimalizačného problému k matematickému modelu je veľmi dôležitý a podstatne ovplyvňuje využiteľnosť výsledkov. Optimálne riešenie je také riešenie, pre ktoré neexistuje riešenie lepšie. My sa budeme zaoberať problémami optimalizácie hybridných dynamických systémov, to je systémov, ktorých premenné sú závislé od času a v ktorých v určitom časovom momente dochádza k zmene matematického opisu.

Procesy s prepínaním dynamiky hrajú dôležitú úlohu nielen v procesnom priemysle, ale aj v bežnom živote, kde na základe jednoduchých logických podmienok sme schopní opísať zmenu správania. Tieto systémy sa vo všeobecnosti označujú ako hybridné.

Medzi hybridné systémy patria napríklad vsádzkové a polovsádzkové procesy, ktoré hrajú dôležitú úlohu pri spracovaní a výrobe v chemickom a farmaceutickom priemysle. Táto výroba zahŕňa širokú rozmanitosť chemických a farmaceutických produktov, polymérov, biotechnológií, alebo špeciálnych zlúčenín, ktoré sú najmä charakteristické pre farmaceutický priemysel. Finančná náročnosť používaného materiálu býva len zriedka nízka. Preto je potrebné navrhnuť optimálne spracovanie materiálu a adekvátne využitie zariadenia, v ktorom dochádza k výrobe (navrhnutie optimálnej doby spracovania, teplotný profil, ...).

Na tomto mieste sa stretávame s pojmom optimalizácia, ktorý v posledných desaťročiach nadobudol veľký význam. Súčasne vývoj počítačov a ich hrubá sila výpočtov odštartovala záujem o dynamickú optimalizáciu a simuláciu chemických procesov, ktoré sú náročnejšie na výpočet, pretože sú iteratívneho charakteru. Tieto procesy sú dynamicky modelované použitím diferenciálno algebraických rovníc (DEA), ktoré opisujú dynamické správanie systému, ako aj materiálovú bilanciu.

Preto našim cieľom v prvých kapitolách je bližšie sa zoznámiť s metódami prístupov k riešeniu daného optimalizačného problému pomocou analytických a numerických metód. Odvodíme si podmienky optimality na základe variačného počtu a s uvažovaním podmienky prepnutia, z ktorých vychádzajú rovnice pre výpočet gradientov pomocou adjungovaných rovníc. Budeme uvažovať priamu numerickú metódu, ktorá parametrizuje vektor riadenia, a preto je označená ako sekvenčná metóda. Tiež si ukážeme spôsob ako z formulácie problému prejdeme na riešenie daného problému numerickými metódami s daným optimalizačným algoritmom, ktorý aplikujeme na niektoré zariadenia v procesnom priemysle. V závere je dané riešenie vyhodnotené a porovnané s inými gradientovými metódami.

1.1 Základné myšlienky

1.1.1 Prečo je dôležitá optimálna výroba

V poslednom období, kedy požiadavka na efektivitu chemických zariadení neustále rastie, bolo potrebné zmeniť postup a celkovú výťažnosť výroby. Napríklad v minulosti preferované kontinuálne chemické reaktory boli nahradené polovsádzkovými chemickými reak-

tormi (Srinivasan a kol. 2003). Je to spôsobené tým, že veľké množstvo vedľajších medziproduktov pre inú výrobu je vyrobených ešte pred dokončením prvej fázy výroby. K zvýšeniu výťažnosti prispelo aj optimálne nastavenie parametrov počas výroby.

Pri plánovaní priebehu výroby v chemických zariadeniach je potrebné brať do úvahy určité hľadiská. Tieto pozostávajú nielen vo vytvorení rozličných matematických a štatistických prístupov, ale aj vo vhodnom výbere daného zariadenia, v ktorom treba zohľadniť nasledujúce body

- konštrukcia - výber vhodného typu zariadenia, počet a dĺžka jednotlivých častí,
- objem výroby - zohľadnenie požadovaných podmienok z výroby, nastavenie parametrov výroby tak, aby bola splnená požiadavka množstva a kvality,
- plánovanie - nastavenie vhodných časových sekvencií pre každú operáciu s ohľadom na kvalitu produktov,
- priebeh procesu - zaistiť výrobu s ohľadom na zvolené priority. Väčšinou je to bezpečnosť, kvalita produktov a celková efektivita.

Pri hľadaní optimálneho priebehu výroby je potrebné vybrať vhodný model výroby, stanoviť vstupné podmienky vzhľadom na riadenie, poznať počiatočný a plánovaný koncový stav. Riešenie tohto problému pozostáva v správnom určení počiatočných podmienok a obmedzení.

1.1.2 Priemyselné prostredie, priemyselná prax

Hlavne v chemickom a farmaceutickom priemysle bolo až donedávna dôležité množstvo výroby, pretože zisky sa úmerne zvyšovali s veľkosťou produkcie. Postupom času, ako spoločnosť požadovala za dôležité aj iné faktory, ako je napríklad kvalita produktov, bezpečnosť, vplyv na ekológiu, použitie zdraviu nezávadných zdrojov (nedodržiavanie týchto faktorov je čoraz viac sankcionované), bolo dôležité zamerať sa na celkovú optimalizáciu výroby.

Zamestnanci zodpovední za výrobu si predstavujú pod pojmom optimalizácia vždy niečo iné. Definovanie účelovej funkcie je často subjektívne. Napríklad pracovník v riadení vidí pod pojmom optimalizácia použitie väčšieho množstva čistých látok a na základe modelu nastavenie jednej, alebo viacerých riadiacich premenných. Na druhej strane chemik si pod pojmom optimalizácia predstavuje zjednodušenie chemických reakcií, nájdenie vhodného rozpúšťadla či katalyzátora. Je to dané tým, že zariadenia chemických výrob sú zložité systémy a pri riadení sa stretáva viacero odborníkov.

Pre vyriešenie reálneho optimalizačného problému pomocou jeho matematického modelu a kritéria optima je často potrebné podľa výsledkov spresňovať model a modifikovať kritérium. Čiže ide o opakované riešenie rôznych variant optimalizačného problému a jeho overovanie na základe simulácie a porovnávanie s realitou.

1.1.3 Cieľ riadenia

Riadenie zariadení chemických výrob môže byť rôzne. Ciele a operačné stratégie môžu byť vybrané tak, aby sa prioritne sledovalo napríklad množstvo, kvalita a počas celého procesu boli k dispozícii on-line údaje z procesu. Aspektov, ktoré vplyvajú na riadenie je veľa, spomeňme iba tie najdôležitejšie:

- Bezpečnosť je prvoradý faktor vzhľadom na to, že väčšina chemických reakcií v chemických reaktoroch je exotermická. Nebezpečná situácia môže nastať napríklad pri nesledovanej akumulácii reaktantov, ako výsledok nevhodne zvoleného teplotného profilu chemického reaktora. Pri špeciálnych reakciách, kedy sa snažíme zosyntetizovať chemikálie alebo polyméry, pri ktorých kinetiku celkom nepoznáme, môžu nastať nežiaduce chemické reakcie, ktoré môžu mať nebezpečný priebeh.
- Kvalita produktov. Požiadavky na kvalitu produktov sú špeciálne prísne u materiálov akými sú napríklad polyméry, alebo produkty farmaceutického priemyslu, kde existuje veľký potenciál pre optimalizáciu počas vývoja v laboratóriu. Optimalizácia operačných parametrov je striktno zakázaná počas produkcie. S ohľadom na kvalitu výroby, priemysel stále preferuje tvrdenie, že konečná koncentrácia nezreagovaných zlúčenín je bezvýznamná (množstvo je menšie ako stanovená tolerancia). Zabezpečiť kvalitu produktov a vyvarovať sa produkcii neželaných látok je dôležité pri dodržiavaní stále prísnejších regulácií.
- Plánovanie. Vhodným naplánovaním výroby dosiahneme minimalizáciu množstva zásob, čo vedie k čiastkovej maximalizácii výroby. Aby sme čo najviac dbali na ekologické požiadavky a bezpečnosť, množstvo výrob je testovaných aj v laboratórnych podmienkach. Počas experimentu sa údaje zozbierajú on-line, ktoré následne spracovávame a hľadáme tak optimálne podmienky pre danú výrobu.

Medzi ďalšie aspekty s nižšou prioritou patrí napríklad:

- Produktivita. Zvyšovanie produktivity procesu, množstva materiálu, ktorý chceme vyrobiť za jednotku času, je vždy vítané. Veľmi dôležité je posúdiť efektivitu vzhľadom na celkovú výrobu, nie iba čiastkovú. Treba brať do úvahy viaceré faktory, ako napríklad synchronizáciu paralelných operácií pred tým, ako začne ďalšia fáza výroby. Častokrát percentuálne malé zvýšenie produktivity nie je natoľko efektívne, aby sa prešlo z jednoduchého riadenia na sofistikované riadenie, alebo zložitú optimalizačnú stratégiu.
- Flexibilita. Využiť zariadenie danej výrobné jednotky tak, aby výroba bola čo najviac flexibilná a pružne reagovala na dopyt trhu.

1.1.4 Charakteristika optimálneho riadenia

Pri implementácii optimálneho riadenia sa môžeme najbežnejšie stretnúť s týmito skutočnosťami:

- Veľa optimalizačných úloh je riešených tak, že sa nastavujú najlepšie konštanty pre operačné podmienky. Na určenie najlepšej konštantnej úrovne je potrebné vyriešiť optimalizačnú úlohu.
- V prípade dvoch manipulovaných veličín vidíme malé výkonnostné zlepšenie vzniknuté zo simultánneho manipulovania dvoch vstupov v porovnaní s udržiavanou „vhodnou“ konštantnou hodnotou.
- Obmedzenia hrajú veľmi dôležitú úlohu v riešení problémov optimálneho riadenia, pretože vo veľa prípadoch optimálne riešenie leží na danom obmedzení. Dôležité je pochopiť, ktorými podmienkami je určené optimálne riešenie, na ktorom obmedzení leží.

1.2 Cieľ dizertačnej práce

Cieľom predkladanej dizertačnej práce je ukázať možnosti riešenia problémov dynamickej optimalizácie pre systémy, v ktorých dochádza k zmene matematického opisu. Cieľ môžeme rozdeliť do nasledujúcich bodov

- ukázať možné prístupy k riešeniu problémov dynamickej optimalizácie,
- navrhnúť spôsob a algoritmus riešenia daného optimalizačného problému hybridných systémov pomocou metódy parametrizácie vektora riadenia,
- implementovať daný algoritmus do programovacieho jazyka FORTRAN 77,
- aplikovať danú metódu na rôzne problémy procesného priemyslu.

1.3 Hlavné črty dizertačnej práce

Dizertačná práca pozostáva okrem úvodnej a záverečnej kapitoly aj z ďalších kapitol, v ktorých sa postupne dostávame z teórie o dynamickej optimalizácii k aplikácii na jednotlivé príklady procesného priemyslu. Obsah týchto kapitol je nasledovný

Kapitola 2. Prehľad metód dynamickej optimalizácie

Táto kapitola sa zaoberá prístupom k dynamickej optimalizácii pomocou analytických a numerických metód. V analytických metódach sú odvodené základné podmienky optimality pre jednoduché príklady spolu s ich vzájomným vzťahom medzi dynamickým programovaním, Pontrjaginovým princípom minima a variačným počtom. Ďalej sú opísané priame a nepriame numerické metódy dynamickej optimalizácie spolu s ich výhodami a nevýhodami.

Kapitola 3. Riešenie problémov optimálneho riadenia hybridných systémov

V tejto časti dizertačnej práce je ukázaná parametrizácia vektora riadenia, formulácia problému a rôznych typov obmedzujúcich podmienok. Tiež sa venujeme možným spôsobom deterministického riešenia gradientov účelovej funkcie a obmedzení. Je ukázaná transformácia pôvodného problému dynamickej optimalizácie na statický optimalizačný problém. Následne sú z podmienok optimality na základe variačného počtu odvodené gradienty pomocou adjugovaných rovníc pre hybridné systémy podľa jednotlivých optimalizovaných premenných účelovej funkcie a obmedzenia. V záverečnej časti tejto kapitoly je ukázaný algoritmus riešenia danej optimalizačnej metódy s implementáciou v programovacom jazyku FORTRAN 77.

Kapitola 4. Optimálne riadenie zásobníkov kvapaliny

V tejto kapitole sa zaoberáme optimálnym riadením dvoch zásobníkov kvapaliny, v ktorých v určitom časovom momente dochádza k zmene matematického opisu z bez interakcie na s interakciou. Podmienka prepnutia je splnená, ak výška hladiny v druhom zásobníku dosiahne dno prvého zásobníka. V závere kapitoly sú ukázané riadiace profily pre rôzny počet diskretizovaných intervalov a pre rôzne zadefinované problémy. Konkrétne ide o problém minimalizácie času pre jednu a viaceré riadiace veličiny a problém LQ riadenia.

Kapitola 5. Optimálne riadenie dvojstupňového chemického reaktora

Ide o optimalizáciu dvojstupňového chemického reaktora, ktorý je v počiatkovej fáze opísaný jednou skupinou diferenciálnych rovníc a po prídavku jedného z reaktantov v určitom časovom momente inou skupinou diferenciálnych rovníc. Podmienka zmeny matematického opisu je v tomto prípade daná časom, kedy reaktor prejde do izotermického stavu (na hranici predposledného a posledného optimalizovaného intervalu). Pôvodný chemický reaktor a problém dynamickej optimalizácie riešený pomocou citlivostných rovníc je ukázaný v [Vassiliadis a kol. \(1994\)](#).

Prehľad metód dynamickej optimalizácie

Veľa procesov v procesnom priemysle je stále riadených metódou pokus-omyl, ktorá je viac-menej postavená na skúsenosti operátora. Opakom k tomuto heuristickému prístupu je model postavený na riadení a optimalizácii, ktorý umožňuje viac efektívny prístup. Vzhľadom na zvyšujúcu sa prísnosť environmentálnych zákonov je našou úlohou sa zamerať a klásť dôraz na minimalizáciu požadovaných zdrojov zásob akými sú napríklad materiály, alebo energia. Aby sme dosiahli tento cieľ, čiže aby sme aplikovali optimálne riadenie na dané zariadenie v procesnom priemysle, je potrebné jednotlivé parametre buď analyticky odvodiť (napríklad pomocou Pontrjaginovho princípa minima (PMP)), alebo numericky získať (napríklad parametrizáciou vektora riadenia (CVP)).

Na riešenie daných optimalizačných problémov existuje niekoľko prístupov. Ak optimalizovaný proces je opísaný lineárnou a logickou formuláciou po úsekoch konštantnou, potom existujú dostatočne výkonné algoritmy v oblasti prediktívneho riadenia ([Bemporad a Morari 1999](#), [Le Lann a kol. 1999](#), [Chen a kol. 2003](#), [Cannon 2004](#), [Özkan a Kothare 2006](#)).

Ak uvažujeme plne nelineárny proces, potom pôvodný problém dynamickej optimalizácie môže byť aproximovaný na viac zjednodušenú formu. Jeden prístup je úplná diskretizácia stavových a riadiacich veličín pomocou ortogonálnej kolokácie (OC). Takéto formulácie sú ukázané napríklad v prácach [Cuthrell a Biegler \(1987\)](#), [Logsdon a Biegler \(1989\)](#), [Loeblein a kol. \(1997\)](#), [Avraam a kol. \(1998\)](#), [Biegler a kol. \(2002\)](#). Tento prístup je univerzálny a vhodný na použitie pre spojité, alebo diskrétne prípady ([Avraam a kol. 1998](#)), avšak veľkosť výsledného nelineárneho problému môže byť príliš veľká.

Iná možnosť je ponechať stavovú veličinu spojitú a aproximovať iba riadiacu veličinu ako po úsekoch spojitú konštantu, alebo použitím vyššieho stupňa aproximácie. Tento prístup je označovaný ako parametrizácia vektora riadenia (CVP). Hoci s touto metódou sú určité problémy, hlavne v hybridných systémoch s neznámou sekvenciou prepnutia ([Feehery 1998](#)), z celkového hľadiska je považovaná za veľmi dôveryhodnú a akceptovanú.

Existujú rôzne formulácie CVP závislé na spôsobe prístupu k výpočtu gradientov účelovej funkcie a obmedzenia (Rosen a Luus 1991). V prácach Caracotsios a Stewart (1985), Vassiliadis a kol. (1994), Galán a Barton (1998) je formulovaný systém citlivostných rovníc a gradienty sú počítané priamo z ich riešenia. V práci Balsa-Canto a kol. (2001) sú použité druhé derivácie citlivostných rovníc spolu s mriežkovým algoritmom pre získanie lepšieho výsledného riešenia. Výhoda týchto prístupov spočíva v jednoduchšej formulácii problému a integrácii naraz stavových aj citlivostných rovníc. Nevýhoda tejto metódy spočíva vo veľkom množstve vygenerovaných diferenciálnych rovníc, pretože každá optimalizovaná premenná vytvorí skupinu diferenciálnych rovníc s rozmerom veľkosti stavov optimalizovaného procesu.

Iná možnosť, ktorá je použitá v tejto práci, je výpočet gradientov NLP na základe optimálnej teórie riadenia použitím adjugovaných rovníc (Goh a Teo 1988, Ruban 1997, Schlegel a Marquardt 2004). Modifikovaný postup s adjugovanými rovnicami a s adaptívnou mriežkou bol použitý v práci Schlegel a kol. (2005). Výhoda tejto metódy spočíva v tom, že množstvo diferenciálnych rovníc, ktoré sa musia integrovať, nezáleží od počtu optimalizovaných premenných, ale od počtu obmedzení. Na druhú stranu výpočet a implementácia adjugovaných rovníc oproti citlivostným rovniciam je zložitejšia. Keď uvažujeme systém s veľkým množstvom stavových rovníc a malým počtom obmedzení, prístup k výpočtu gradientov pomocou adjugovaných rovníc má výhodu oproti bežne používaným citlivostným rovniciam, ako uvidíme v ďalších kapitolách.

Iný spôsob získania gradientov je využiť stochastické metódy (Carrasco a Banga 1997), akými sú napríklad metóda simulovaného žihania, alebo prístup pomocou neurónových sietí. Skúsenosti ukazujú, že aj tieto metódy sú aplikovateľné a svojou rýchlosťou postačujúce pre menšie problémy s dostatočnou presnosťou.

2.1 Hybridné systémy

Hybridné systémy sú opísané rôznymi reakčnými fázami, ktoré sa prepínajú na základe určitých podmienok prepnutia – prepínací algoritmus. S týmto algoritmom sa môžeme napríklad stretnúť pri vsádzkových a polovsádzkových procesoch (Barton a kol. 2000, Schlegel a Marquardt 2006), ktoré sú používané pri rôznych chemických výrobách farmaceutického priemyslu, polymérov, biotechnológii, . . . Veľa prác sa zaoberalo celkovým zlepšením produktivity, a tým aj efektivity výroby (Bonvin 1998, Srinivasan a kol. 2003, Abel a Marquardt 2003). Iné použitie prepínacieho algoritmu je ukázané napríklad pri čistení odpadovej vody (Zhao a kol. 1994, 1995, Lin a Cheng 2001), kde sa prepína vo vhodných časových okamihoch proces nitrifikácie a denitrifikácie (Isaacs 1997, Coelho a kol. 2000), pri optimálnom riadení zásobníka kvapaliny (Manon a kol. 2002) a pri mnohých iných procesoch.

Môžeme povedať, že tieto systémy vykazujú hybridné správanie, ktoré charakterizuje kombinácia spojitého riadenia s diskretnými stavovými zmenami. Tieto procesy sú mode-

lované skupinami diferenciálnych a algebraických rovníc, ktoré sa v čase prepnutia menia. Systémy, ktoré vykazujú hybridné správanie sú obťažnejšie na riadenie a optimalizáciu, pretože v čase prepnutia sa uvažuje zmena operačného režimu (proces zmiešavania plynov), alebo uskutočnenie určitých akcií (pridanie určitého množstva zložky pre nárast produkcie).

Charakteristickým znakom týchto procesov je ich dynamická povaha. Z toho dôvodu modelovanie a optimalizácia si vyžaduje použitie rôznych optimalizačných procedúr, pri ktorých celková efektivita môže byť vylepšená v porovnaní s pôvodným prístupom.

Hlavný rozdiel medzi analytickými a numerickými metódami (Vemuri 2004), ktoré sú prezentované v ďalšej podkapitole je ten, že analytickými metódami sme schopní vyjadriť dané riešenie priamo pomocou vzťahu, oproti numerickým metódam, ktoré sú iteratívneho charakteru a výsledné riešenie získavajú pomocou porovnávania určitého kritéria kvality v každej iterácii s predchádzajúcou iteráciou. Algoritmus skončí, ak výsledné riešenie spĺňa dopredu zadefinovanú presnosť optimalizácie. Treba povedať, že väčšina reálnych problémov je analyticky veľmi ťažko odvoditeľná, preto numerické metódy, ktoré daný problém vhodne aproximujú, majú veľký význam.

2.2 Definícia systému a účelovej funkcie

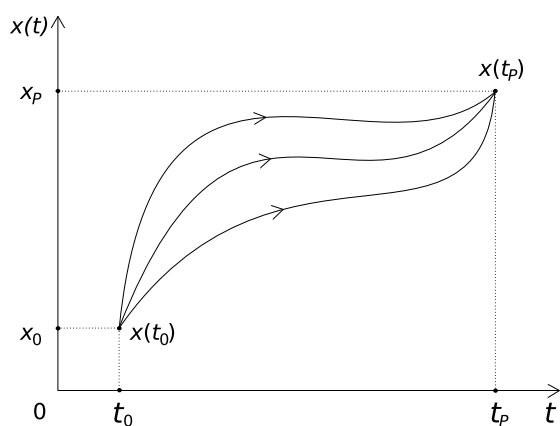
Uvažujme systém, ktorý je vo všeobecnom tvare opísaný nasledujúcou diferenciálnou rovnicou

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}_i(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t), \mathbf{p}), \quad t_{i-1} \leq t \leq t_i, \quad i = \overline{1, P} \quad (2.1)$$

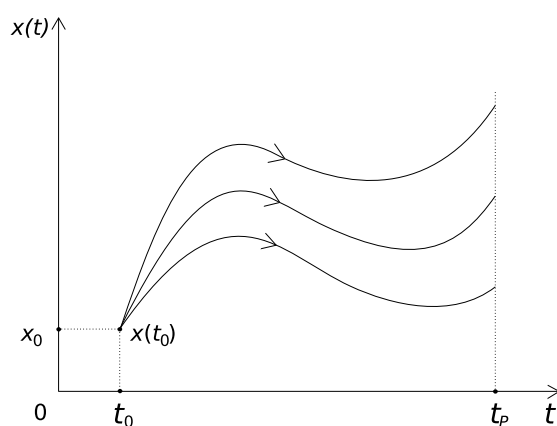
s počiatočnými podmienkami $\mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0$. Systém sa skladá z n_x rozmerného vektora stavových veličín $\mathbf{x}(t)$, n_u rozmerného vektora riadiacich veličín $\mathbf{u}(t)$ a nakoniec n_p rozmerného vektora nezávislých parametrov \mathbf{p} . V jednotlivých úsekoch predpokladáme spojito diferencovateľný systém. V hraniciach, alebo v čase prepnutia je systém nespojitý.

Pre daný počiatočný stav a prípustné riadenie $\mathbf{u}(t)$ riešením stavovej rovnice (2.1) získame prípustnú stavovú trajektóriu $\mathbf{x}(t)$. Ľubovoľný stav $\mathbf{x}(t)$, ktorý je možno dosiahnúť za koncový čas, sa nazýva dosiahnuteľný. Pokiaľ ide o koncové podmienky, t.j. koncový čas t_P a koncový stav $\mathbf{x}(t_P)$, ktorý musí byť dosiahnuteľný, môže sa jednať o jednu z kombinácií, ktoré sú ukázané na obrázkoch 2.1–2.4 (Brunovský 1980, Mikleš a Hutla 1986, Štecha 1999, Víteček a Vítečková 2002). Potom hovoríme o pevnom, respektíve voľnom koncovom čase a o pevnom, respektíve voľnom konci.

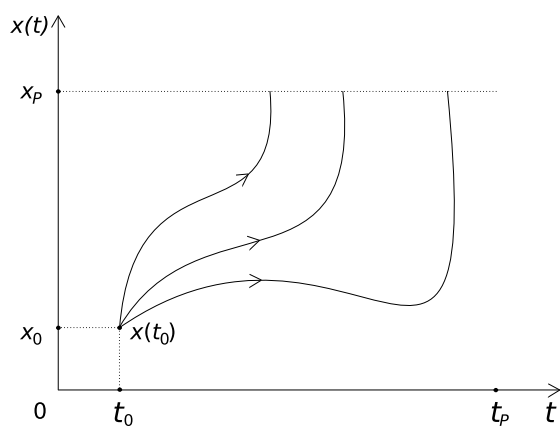
Geometrická interpretácia úlohy optimálneho riadenia s pevným koncovým časom a koncom je ukázaná na obrázku 2.5. Úloha optimálneho riadenia na základe obrázku 2.5 spočíva v tom, že zo všetkých prípustných trajektórií $\mathbf{x}(t)$, ktoré začínajú v počiatočnom časovom okamihu t_0 a v počiatočnom stave \mathbf{x}_0 s príslušným vektorom riadenia \mathbf{u} s danými ohraničeniami je potrebné vybrať takú optimálnu stavovú trajektóriu \mathbf{x}^* s príslušným optimálnym



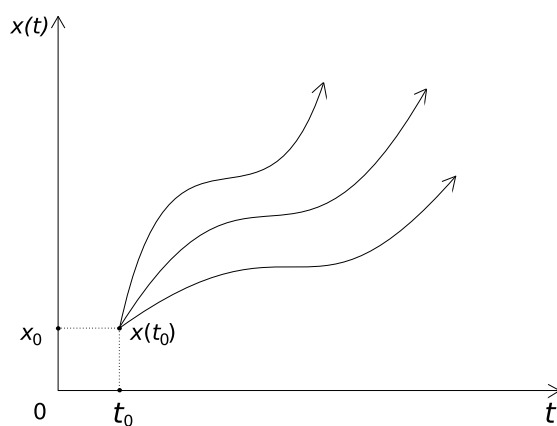
Obrázok 2.1. Pevný koncový čas a koniec



Obrázok 2.2. Pevný koncový čas a voľný koniec



Obrázok 2.3. Voľný koncový čas a pevný koniec



Obrázok 2.4. Voľný koncový čas aj koniec

riadením \mathbf{u}^* , pre ktorú hodnota účelovej funkcie J nadobúda globálny extrém pri splnených obmedzujúcich podmienkach.

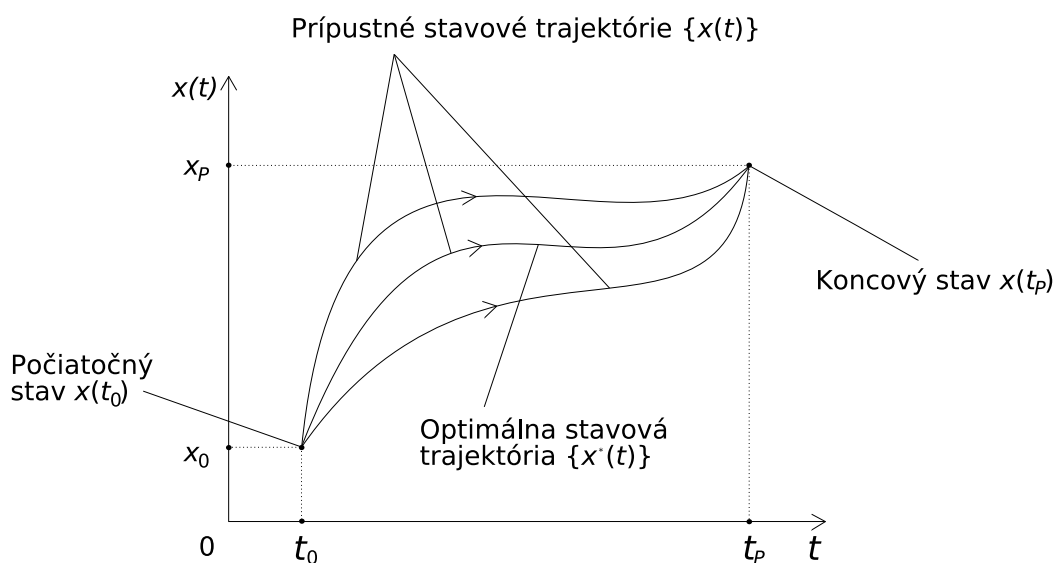
Okamihy označované t_s , počas ktorých dochádza k nahradeniu súboru rovníc iným súborom rovníc, sa volajú časy prepnutia a sú definované podmienkou

$$\mathbf{g}_i(t_i, \mathbf{x}(t_i^-), \mathbf{u}_i, \mathbf{p}) = \mathbf{0}, \quad i = \overline{1, P-1} \quad (2.2)$$

V čase prepnutia môže byť vektor $\mathbf{x}(t)$ nespojitý s prerušením v tvare

$$\mathbf{x}(t_i^+) = \mathbf{x}(t_i^-) + \mathbf{\Delta}_i(t_i, \mathbf{x}(t_i^-), \mathbf{u}_i, \mathbf{p}), \quad i = \overline{1, P-1} \quad (2.3)$$

kde $\mathbf{\Delta}_i$ je spojitá diferencovateľná funkcia a $\mathbf{x}(t_i^-)$, $\mathbf{x}(t_i^+)$ sú hodnoty vektora $\mathbf{x}(t_i)$ pred a po zámene. V rovnici (2.3) uvažujeme prídavné skoky, ktoré sa nachádzajú na spojitých stavových trajektóriách v bodoch t_i (ak $\mathbf{\Delta}_i = \mathbf{0}$, potom $\mathbf{x}(t)$ je spojitá v čase prepnutia t_i).



Obrázok 2.5. Geometrická interpretácia úlohy optimálneho riadenia s pevným koncovým časom aj koncom

Ďalej predpokladáme, že čas prepnutia t_s je rovný jednej hodnote t_i .

Účelová funkcia je definovaná vo všeobecnom Bolza tvare (Bryson a Ho 1975)

$$\min_{t_P, \mathbf{u}, \mathbf{p}} J = G(t_P, \mathbf{x}(t_P), \mathbf{u}(t_P), \mathbf{p}) + \int_{t_0}^{t_P} F(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t), \mathbf{p}) dt \quad (2.4)$$

kde J je hodnota funkcie, ktorá je minimalizovaná (funkcionál kvality dynamického systému), G zahŕňa podmienky vzhľadom na koncový čas a F zahŕňa podmienky vzhľadom na celý proces. Podobne, ako je zadaná účelová funkcia, sú zadané aj obmedzenia, ktoré musia byť splnené.

Okrem Bolza tvaru môže byť účelová funkcia zadaná v Lagrangeovom tvare

$$\min_{t_P, \mathbf{u}, \mathbf{p}} J = \int_{t_0}^{t_P} F(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t), \mathbf{p}) dt \quad (2.5)$$

alebo v Mayerovom tvare

$$\min_{t_P, \mathbf{u}, \mathbf{p}} J = G(t_P, \mathbf{x}(t_P), \mathbf{u}(t_P), \mathbf{p}) \quad (2.6)$$

Treba povedať, že všetky 3 tvary sú vzájomne ekvivalentné a prevoditeľné.

2.3 Analytické metódy

Je niekoľko rôznych prístupov k riešeniu problémov optimálneho riadenia analytickými metódami. Najvýznamnejšie sú:

- Dynamické programovanie
- Pontrjaginov princíp minima/maxima
- Variačný počet

2.3.1 Dynamické programovanie

Dynamické programovanie je veľmi všeobecná metóda riešenia najrôznejších optimalizačných úloh. Vychádza z Bellmanovho princípu optimality (Bellman 1957, Štecha 1999, Víteček a Vítečková 2002), ktorý predstavuje jednoduchú, nutnú podmienku optimality. Bellmanov princíp optimality môže byť sformulovaný nasledovne

„Optimálna trajektória má tú vlastnosť, že bez ohľadu na počiatočný stav a predchádzajúce riadenie, ďalšie riadenie musí zabezpečovať optimálnu trajektóriu vzhľadom na stav, ktorý bol dosiahnutý predchádzajúcim riadením.“

alebo ďalšou časťou formuláciou

„Optimálne riadenie nezávisí na „histórii“ riadeného podsystemu, ale je určené iba stavom v danom momente.“

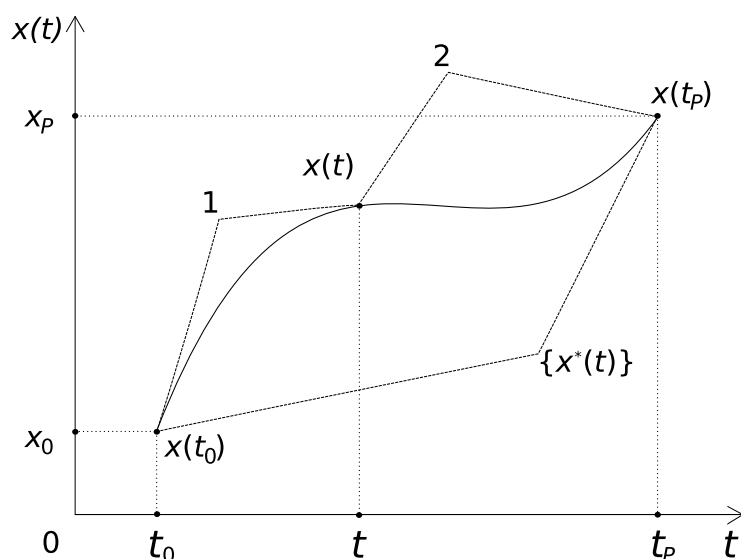
V súlade s princípom optimality platí (obrázok 2.6): ak je celá trajektória $\mathbf{x}^*(t)$ optimálna, potom čiastková trajektória (2) na intervale $[t, t_P]$ musí byť optimálna vzhľadom k počiatočnému stavu $\mathbf{x}(t)$, čo znamená, že druhá časť optimálnej trajektórie (2) musí byť sama optimálnou trajektóriou bez ohľadu na prvú časť trajektórie (1), ktorá končí v stave $\mathbf{x}(t)$, a ktorá je zároveň počiatočným stavom pre druhú časť optimálnej trajektórie (2).

Uvažujme nasledujúci spojitý problém optimálneho riadenia v Bolza tvare

$$J = G(t_P, \mathbf{x}(t_P)) + \int_{t_0}^{t_P} F(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t)) dt, \quad (2.7a)$$

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t)), \quad (2.7b)$$

$$\mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0 \quad (2.7c)$$



Obrázok 2.6. Geometrická interpretácia Bellmanovho princípu optimality v úlohách optimálneho riadenia

Predpokladáme, že zadefinovaný problém optimálneho riadenia (2.7) má riešenie. Uvažujme nasledujúcu funkciu, tiež nazývanú Bellmanovu, ktorá je definovaná nasledovne

$$v(t, \mathbf{x}(t)) = \min_{\mathbf{u}(t)} \left[G(t_P, \mathbf{x}(t_P)) + \int_t^{t_P} F(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t)) dt \right] \quad (2.8)$$

Diferenciácia (2.8) vedie k Bellmanovej parciálnej diferenciálnej rovnici

$$-\frac{\partial v}{\partial t} = \min_{\mathbf{u}(t)} \left[F(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t)) + \left(\frac{\partial v}{\partial \mathbf{x}(t)} \right)^T \mathbf{f}(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t)) \right] \quad (2.9)$$

ktorá musí vyhovovať hraničnej podmienke

$$v(t_P, \mathbf{x}(t_P)) = G(t_P, \mathbf{x}(t_P)) \quad (2.10)$$

Bellmanova parciálna diferenciálna rovnica (2.9) spolu s hraničnou podmienkou (2.10) reprezentujú nevyhnutné podmienky pre získanie minima pri definovanom probléme optimálneho riadenia (2.7).

Substitúciou riadiacej veličiny za optimálnu riadiacu veličinu \mathbf{u}^* v Bellmanovej parciálnej diferenciálnej rovnici (2.9) vedie k formulácii rovnice, ktorá sa tiež nazýva Hamilton-

Jacobi-Bellmanova parciálna diferenciálna rovnica

$$-\frac{\partial v}{\partial t} = F(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}^*(t)) + \left(\frac{\partial v}{\partial \mathbf{x}(t)} \right)^T \mathbf{f}(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}^*(t)) \quad (2.11)$$

Pri riešení problému optimálneho riadenia je vhodné definovať nasledujúcu Hamiltonovu funkciu

$$H \left(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t), \frac{\partial v}{\partial \mathbf{x}(t)} \right) = F(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t)) + \left(\frac{\partial v}{\partial \mathbf{x}(t)} \right)^T \mathbf{f}(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t)) \quad (2.12)$$

a po substitúcii (2.12) do (2.9), Bellmanova parciálna diferenciálna rovnica nadobudne tvar

$$-\frac{\partial v}{\partial t} = \min_{\mathbf{u}(t)} H \left(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t), \frac{\partial v}{\partial \mathbf{x}(t)} \right) \quad (2.13)$$

2.3.2 Pontrjaginov princíp minima/maxima

Pontrjaginov princíp minima/maxima (PMP) (Pontryagin a kol. 1962) predstavuje veľmi účinný prístup pri riešení úloh optimálneho riadenia. Pomocou PMP je možné riešiť aj veľmi zložité úlohy s obmedzením riadiacich aj stavových veličín. Medzi princípom minima a dynamickým programovaním, ktoré predstavujú dva odlišné prístupy, existuje určitá blízka súvislosť, ktorá sa často využíva na získanie základných vzťahov princípu minima.

Na získanie prepojenia medzi dynamickým programovaním a PMP uvažujme už spomínaný problém optimálneho riadenia (2.7) a označme parciálnu deriváciu $\left(\frac{\partial v}{\partial \mathbf{x}} \right)$ ako adjugovanú premennú $\boldsymbol{\lambda}(t)$. Hamiltonová funkcia potom nadobudne tvar

$$H(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}) = F(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}) + \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{f}(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}) \quad (2.14)$$

Bellmanova parciálna diferenciálna rovnica (2.13) nadobúda po substitúcii nasledovný tvar

$$-\frac{\partial v}{\partial t} = \min_{\mathbf{u}(t)} H(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}) \quad (2.15)$$

V rovnici (2.15) uvažujme optimálne riadenie a z dôvodu prehľadnosti ho nebudeme spolu s ostatnými premennými označovať hviezdíčkou.

Diferenciáciou ľavej a pravej strany výrazu $\left(\frac{\partial v}{\partial \mathbf{x}} \right) = \boldsymbol{\lambda}(t)$ podľa \mathbf{x} oddelene dostaneme

$$-\frac{\partial^2 v}{\partial \mathbf{x} \partial t} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{x}} + \frac{\partial^2 v}{\partial \mathbf{x}^2} \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{\lambda}}, \quad (2.16)$$

$$\dot{\boldsymbol{\lambda}} = \frac{\partial^2 v}{\partial \mathbf{x}^2} \dot{\mathbf{x}} + \frac{\partial^2 v}{\partial t \partial \mathbf{x}} \quad (2.17)$$

Z uvedeného vyplývajú kanonické diferenciálne rovnice reprezentujúce princíp minima

$$\dot{\mathbf{x}} = \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{\lambda}}, \quad (2.18a)$$

$$\dot{\boldsymbol{\lambda}}(t) = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{x}} \quad (2.18b)$$

Nevyhnutné podmienky pre problém prezentovaného optimálneho riadenia (2.7), využívajúc Pontrjaginov princíp minima, môžu byť sformulované nasledovne

- podmienka optimality pre riadiace veličiny

$$0 = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{u}}, \quad t \in [t_0, t_P] \quad (2.19)$$

- definovanie adjugovaných premenných

$$\dot{\boldsymbol{\lambda}}(t) = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{x}}, \quad t \in [t_0, t_P] \quad (2.20)$$

- koncové podmienky pre adjugované premenné

$$\boldsymbol{\lambda}(t_P) = \frac{\partial G}{\partial \mathbf{x}(t_P)} \quad (2.21)$$

Záverom môžeme povedať, že pokiaľ úloha optimálneho riadenia má riešenie, potom Hamiltonova funkcia (2.14) musí mať globálne minimum podľa riadenia, t.j.

$$H^* = \min_{\mathbf{u}(t)} H(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}) \quad (2.22)$$

a tiež musia platiť kanonické rovnice (2.18).

2.3.3 Variačný počet

Variačný počet a jeho základné vzťahy sú získané z Bellmanovej parciálnej diferenciálnej rovnice (Bellman 1957). Na rozdiel od dynamického programovania a Pontrjaginovho princípu minima je variačný počet viac špecifický a aplikovateľný pre určité problémy optimálneho riadenia, v ktorých môže byť dosiahnuté riešenie rýchlejšie a jednoduchšie.

Klasický problém variačného počtu pre obmedzenie (2.7b) vyplýva z Euler-Lagrangeovej diferenciálnej rovnice

$$\frac{\partial \Gamma}{\partial \mathbf{x}} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \Gamma}{\partial \dot{\mathbf{x}}} \right) = 0 \quad (2.23)$$

kde Γ je Lagrangeova funkcia definovaná nasledovne

$$\Gamma(t, \mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}, \mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}) = F(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}) + \boldsymbol{\lambda}^T [\mathbf{f}(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}) - \dot{\mathbf{x}}] \quad (2.24)$$

Nevyhnutné podmienky optimality pre prezentovaný problém optimálneho riadenia (2.7) využívajúc Euler-Lagrangeove diferenciálne rovnice, môžu byť sformulované nasledovne

- podmienka optimality pre riadiace veličiny

$$0 = \frac{\partial \Gamma}{\partial \mathbf{u}}, \quad t \in [t_0, t_P] \quad (2.25)$$

- definovanie adjugovaných premenných

$$\dot{\boldsymbol{\lambda}}(t) = -\frac{\partial \Gamma}{\partial \mathbf{x}}, \quad t \in [t_0, t_P] \quad (2.26)$$

- koncové podmienky pre adjugované premenné

$$\boldsymbol{\lambda}(t_P) = \frac{\partial G}{\partial \mathbf{x}(t_P)} \quad (2.27)$$

2.4 Numerické metódy

Väčšina problémov, s ktorými sa stretneme, je analyticky veľmi ťažko riešiteľná, a preto je potrebné použiť na ich riešenie numerické techniky. Numerické metódy optimalizácie prístupné v literatúre sa hlavne zaoberajú riešením systému rovníc a formulácií optimalizačnej stratégie. Väčšina metód sa vzájomne od seba líši rozdielnym prístupom k riešeniu vyššie spomenutých problémov.

Dynamické programovanie reprezentované Bellmanovou parciálnou diferenciálnou rovnicou prvého rádu je v podstate neriešiteľné z dôvodu silnej nelinearity, trochu lepšie je na tom formulácia TPBVP (dvojbodovo ohraničený problém). Z toho dôvodu je potrebné použiť numerické metódy na získanie riešenia. Treba povedať, že základný algoritmus pre TPBVP je veľmi podobný pre všetky prezentované numerické metódy, ktoré na základe prístupu môžeme rozdeliť do dvoch hlavných skupín:

- nepriame metódy
- priame metódy

2.4.1 Nepriame metódy

Táto trieda optimalizačných metód je založená na teórii optimálneho riadenia. Ako bolo spomenuté v kapitole 2.3, sú tri základné stratégie klasifikované na základe optimálnej

teórie riadenia a to variačný počet vyvinutý Eulerom (1744), princíp minima vyvinutý Pontrjaginom (1962) a dynamické programovanie vyvinuté Bellmanom (1957). Všetky tri stratégie sa za určitých predpokladov dajú vzájomne odvodiť. O tom, kto prišiel ako prvý s teóriou optimálneho riadenia boli veľké diskusie. V súčasnosti sa prvenstvo pripisuje Pontrjaginovi a jeho skupine, ktorí prví dali rigorózný dôkaz veľmi všeobecnej verzii teórie optimálneho riadenia.

Môžeme povedať, že úlohou nepriamych metód je riešenie TPBVP, teda nepriame riešenie problému dynamickej optimalizácie. Medzi nepriame metódy patrí iterácia hraničnej podmienky (BCI) a iterácia vektora riadenia (CVI).

Na základe PMP, problém minimalizácie funkcionálu J môže byť pretransformovaný na problém minimalizácie Hamiltonovej funkcie

$$\min_{\mathbf{u}} H(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}) = F(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}) + \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{f}(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}) \quad (2.28a)$$

vzhľadom na

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}), \quad (2.28b)$$

$$\mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0, \quad (2.28c)$$

$$\dot{\boldsymbol{\lambda}}(t) = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{x}}, \quad (2.28d)$$

$$\boldsymbol{\lambda}^T(t_P) = \frac{\partial G}{\partial \mathbf{x}(t_P)} \quad (2.28e)$$

kde na základe podmienok optimality $H_{\mathbf{u}} = \left(\frac{\partial H}{\partial \mathbf{u}}\right) = 0$ môžeme zdefinovať nasledujúcu rovnicu

$$\frac{\partial H}{\partial \mathbf{u}} = \frac{\partial F}{\partial \mathbf{u}} + \boldsymbol{\lambda}^T \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{u}} = 0 \quad (2.29)$$

Iterácia hraničnej podmienky

V metóde nazývanej BCI (iterácia hraničnej podmienky), je interval hodnôt odhadovaný a aktualizovaný na základe numerickej stratégie iteračným spôsobom. Výpočet končí, ak výsledok získaný z integrácie počiatočnej odhadovanej hodnoty splňa dopredu zadané koncové podmienky. V tejto metóde je optimalizačný problém pretransformovaný na riešenie systému DAE. Riadiace veličiny sú vyjadrené analyticky vo vzťahu k stavovým a adjugovaným rovniciam – $\mathbf{u}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda})$. Volenými premennými sú hodnoty adjugovaných premenných v počiatočnom čase $\boldsymbol{\lambda}(t_0)$, ktoré sú vybrané za účelom zabezpečenia $\boldsymbol{\lambda}(t_P)$.

Základný algoritmus BCI metódy je nasledovný:

1. Analytické riešenie (2.29) za účelom získania $\mathbf{u}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda})$.

2. Zvolenie hodnoty adjugovaných premenných v počiatočnom čase $\lambda(t_0)$.
3. Dopredná integrácia stavových (2.28b) a adjugovaných rovníc (2.28d) za použitia známych hodnôt \mathbf{x}_0 , $\lambda(t_0)$ a $\mathbf{u}(\mathbf{x}, \lambda)$. Určenie adjugovaných premenných v koncovom čase $\lambda(t_P)$.
4. Otestovanie či koncové hodnoty adjugovaných premenných získaných v predchádzajúcom bode splňajú dopredu zadané koncové podmienky.
5. Aktualizovanie hodnôt $\lambda(t_0)$, napríklad metódou najstrmšieho spádu (SD) a opakovanie kroku 3–5 pokiaľ nie je zabezpečená konvergencia.

S nastreľovacou metódou je spojených niekoľko problémov (Murty a kol. 1980). Prvý z nich je, že systém môže vykazovať problémy v stabilite počas doprednej integrácie adjugovaných rovníc. Druhý problém sa týka dobrého počiatočného odhadu adjugovaných premenných, bez ktorého je výpočtovo veľmi zdĺhavé nájsť optimálne riešenie. Medzi ďalší problém patrí aj skutočnosť, že pri nespojitostiach v adjugovaných rovniciach dochádza k zlyhaniu prezentovanej metódy.

Iterácia vektora riadenia

Iterácia vektora riadenia (CVI) je ďalšia metóda na riešenie TPBVP. Môžeme ju označiť ako gradientovú metódu, pretože v tejto metóde nutné podmienky optimality zabezpečujú gradienty počas toho, ako sú optimalizované premenné aktualizované. Tento prístup sa podobá sekvenčnému prístupu v priamej metóde, avšak gradienty sú počítané pomocou rovnice (2.29) (Srinivasan a kol. 2003).

Základný algoritmus CVI metódy je nasledovný:

1. Zadefinovanie počiatočných hodnôt optimalizovaných premenných \mathbf{u} .
2. Integrácia stavových rovníc (2.28b) od počiatočného času t_0 po koncový čas t_P vzhľadom na (2.28c).
3. Výpočet adjugovaných premenných v koncovom čase (2.28e) a následná integrácia adjugovaných rovníc (2.28d) spätne z t_P po t_0 .
4. Výpočet gradientov vzhľadom na riadenie (2.29).
5. Použitie optimalizačného algoritmu pre aktualizáciu hodnôt optimalizovaných premenných – posunutie hodnoty optimalizovanej premennej na základe $(\frac{\partial H}{\partial \mathbf{u}})$. Opakovanie kroku 2–5 pokiaľ H nie je minimálne na základe rovnice (2.28a).

Hlavná výhoda gradientových metód spočíva v tom, že dobrý počiatočný odhad optimalizovaných premenných je výhodný, ale nie kritický pre konvergenciu. Charakteristickou črtou tejto metódy je pomalá konvergencia pre mnoho typov problémov ([Jaspan a Coull 1972](#), [Diwekar 1995](#)).

2.4.2 Priame metódy

V tejto triede optimalizačných metód sú vstupy parametrizované konečným počtom parametrov. Výsledný systém je potom spojený s optimalizačným algoritmom na základe SQP ([Jacoby a kol. 1972](#), [Ray a Szekely 1973](#), [Reklaitis a kol. 1983](#), [Edgar a kol. 2001](#)) za cieľom získania optimálnych hodnôt.

Priame optimalizačné metódy môžeme rozdeliť na základe toho, či sú rovnice dynamiky (2.28b) integrované explicitne, alebo implicitne na sekvenčné, alebo simultánne. V literatúre je možné nájsť aj iné priame metódy, medzi ktoré patrí napríklad priama nastreľovacia metóda (DSM) ([Bock a Platt 1984](#), [Bock a kol. 2000](#)).

Pri priamych metódach treba povedať, že kvalita získaného riešenia závisí od parametrizácie riadiaceho profilu a od vhodne zvolených počiatočných podmienok. Nájsť vhodné počiatočné podmienky je netriviálny problém.

Sekvenčná metóda

Sekvenčná metóda je tiež často nazývaná parametrizácia vektora riadenia (CVP) ([Ray 1981](#), [Gunter a kol. 1998](#)). Základ tejto metódy spočíva v parametrizácii riadenia obyčajne niekoľkými parametrami a v ponechaní pôvodných stavových rovníc v ODE/DAE (diferenciálne rovnice/diferenciálno algebraické rovnice) tvare. Väčšinou je použité riadenie po úsekoch, čím problém dynamickej optimalizácie pretransformujeme na problém statickej optimalizácie (NLP) ([Vassiliadis a kol. 1994](#)). Tento problém je potom možné riešiť gradientovou metódou za použitia optimalizačného algoritmu typu SQP ([Støren a Hertzberg 1995](#)) na nájdenie optimálnych hodnôt. Riešenie je iteračné a v každom kroku sa počíta hodnota účelovej funkcie pri splnených obmedzeniach. Výpočet spočíva v riešení gradientov účelovej funkcie a obmedzení vzhľadom na optimalizované premenné ODE/DAE systému pomocou deterministického prístupu, akým je napríklad metóda konečných diferencií, prístup pomocou adjugovaných a citlivostných rovníc, alebo pomocou stochastického prístupu, akým je napríklad metóda genetických algoritmov, neurónové siete, Výsledné riešenie je potom zlepšované každou iteráciou. Detailný algoritmus je podrobnejšie ukázaný v kapitole 3.8.

Treba povedať, že nájdené riešenie môže byť lokálneho charakteru, pretože globálne riešenie nemôže byť zaručené. V takom prípade je potrebné vhodne zmeniť počiatočné podmienky, alebo počet parametrizovaných riadiacich premenných. Iný spôsob je použiť metódy globálnej optimalizácie ([Famularo a kol. 1999](#), [Klepeis a Floudas 2000](#), [Singer 2004](#),

Barton a Lee 2004), ktoré sú však časovo náročnejšie na výpočet. Prehľad použitia metód globálnej optimalizácie za posledné obdobie je ukázaný napríklad v práci Floudas a kol. (2005).

Simultánna metóda

Simultánna metóda je často nazývaná úplne aproximačná metóda, alebo ortogonálna kolokácia (OC), v ktorej aproximujeme stavové aj riadiace veličiny použitím polynómu s volenými parametrami. Polynomická aproximácia nízkeho stupňa zabezpečí postačujúcu presnosť pri zachovaní akceptovateľného rozmeru NLP problému, ktorý sa rieši vhodným NLP solverom. Na rozdiel od CVP metódy, simultánna metóda nepotrebuje riešenie IVP (problém počiatkovej hodnoty) pri každej iterácii. Základný algoritmus pre simultánne metódy je možné nájsť v práci Cuthrell a Biegler (1989), alebo Srinivasan a kol. (2003).

Všeobecný problém a tiež algoritmus pre simultánnu metódu môže byť pre $t \in [t_0, t_P]$ sformulovaný nasledovne

$$\min_{\mathbf{u}(t)} \left[G(t_P, \mathbf{x}(t_P)) + \int_{t_0}^{t_P} F(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t)) dt \right] \quad (2.30)$$

vzhľadom na

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{f}(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t)), \quad (2.31)$$

$$\mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0, \quad (2.32)$$

$$\mathbf{g}(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t)) = \mathbf{0}, \quad (2.33)$$

$$\mathbf{g}(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t)) \leq \mathbf{0}, \quad (2.34)$$

$$\mathbf{x}^{\min}(t) \leq \mathbf{x}(t) \leq \mathbf{x}^{\max}(t), \quad (2.35)$$

$$\mathbf{u}^{\min}(t) \leq \mathbf{u}(t) \leq \mathbf{u}^{\max}(t) \quad (2.36)$$

1. Aproximácia stavových veličín a vstupov použitím štandardnej kolokačnej metódy.

$$\mathbf{x}_{K+1}(t) = \sum_{j=0}^K \mathbf{x}_{ij} \phi_j(t), \quad \text{kde } \phi_j(t) = \prod_{k=0, j}^K \left(\frac{t - t_{ik}}{t_{ij} - t_{ik}} \right), \quad (2.37)$$

$$\mathbf{u}_K(t) = \sum_{j=1}^K \mathbf{u}_{ij} \psi_j(t), \quad \text{kde } \psi_j(t) = \prod_{k=1, j}^K \left(\frac{t - t_{ik}}{t_{ij} - t_{ik}} \right), \quad (2.38)$$

$$\mathbf{x}_{K+1}(t_{ij}) = \mathbf{x}_{ij}, \quad \text{kde } i = \overline{1, P}, \quad (2.39)$$

$$\mathbf{u}_K(t_{ij}) = \mathbf{u}_{ij} \quad (2.40)$$

kde K udáva počet prvkov ortogonálnej kolokácie.

2. Nahradenie aproximovaných stavov a vstupov v dynamickom modeli za cieľom získania algebraického vyjadrenia.

$$\mathbf{r}(t_{ik}) = \sum_{j=0}^K \mathbf{x}_{ij} \frac{\dot{\phi}_j(t_{ik})}{\Delta t_i} - \mathbf{f}(t_{ik}, \mathbf{x}_{ik}, \mathbf{u}_{ik}) = 0, \quad k = \overline{1, K} \quad (2.41)$$

3. Nahradenie aproximovaného dynamického modelu v danom probléme.

$$\min_{\Delta t_i, \mathbf{x}_{ij}, \mathbf{u}_{ij}} \left[G(t_P, \mathbf{x}(t_P)) + \sum_{i=1}^P \sum_{j=1}^K w_{ij} F(\Delta t_i, \mathbf{x}_{ij}, \mathbf{u}_{ij}) \right] \quad (2.42)$$

vzhľadom na

$$\mathbf{x}_{10} - \mathbf{x}_0 = 0, \quad (2.43)$$

$$\mathbf{x}_{i0} - \mathbf{x}_{K+1}^{i-1}(t_i) = 0, \quad i = \overline{2, P}, \quad (2.44)$$

$$\mathbf{x}_P - \mathbf{x}_{K+1}^P(t_{P+1}) = 0, \quad (2.45)$$

$$\mathbf{r}(t_{ik}) = 0, \quad i = \overline{1, P}, \quad k = \overline{1, K}, \quad (2.46)$$

$$\sum_{i=1}^P \Delta t_i = t_P, \quad (2.47)$$

$$\mathbf{u}_i^{\min} \leq \mathbf{u}_K^i(t_i) \leq \mathbf{u}_i^{\max}, \quad i = \overline{1, P}, \quad (2.48)$$

$$\mathbf{u}_i^{\min} \leq \mathbf{u}_K^i(t_{i+1}) \leq \mathbf{u}_i^{\max}, \quad (2.49)$$

$$\Delta t_i^{\min} \leq \Delta t_i \leq \Delta t_i^{\max}, \quad (2.50)$$

$$\mathbf{u}_{ij}^{\min} \leq \mathbf{u}_K(t_{ij}) \leq \mathbf{u}_{ij}^{\max}, \quad i = \overline{1, P}, \quad j = \overline{1, K}, \quad (2.51)$$

$$\mathbf{x}_{ij}^{\min} \leq \mathbf{x}_{K+1}(t_{ij}) \leq \mathbf{x}_{ij}^{\max}, \quad i = \overline{1, P}, \quad j = \overline{0, K}, \quad (2.52)$$

$$\mathbf{g}(t_{ij}, \mathbf{x}_{ij}, \mathbf{u}_{ij}) = \mathbf{0}, \quad (2.53)$$

$$\mathbf{g}(t_{ij}, \mathbf{x}_{ij}, \mathbf{u}_{ij}) \leq \mathbf{0} \quad (2.54)$$

4. Zvolenie t_i použitím metódy ortogónálnej kolokácie.
5. Riešenie problému, ktorý vznikne v kroku 3 vzhľadom na zvolené t_i v kroku 4 použitím NLP solveru typu SQP. Detailné odvodenie je možné nájsť napríklad v diplomovej práci Čížniar (2005).

Hlavná výhoda simultánnej metódy je tá, že aproximované optimálne riešenie môže byť získané z veľmi zlých počiatočných podmienok. Na druhú stranu hlavná nevýhoda navrhovaného prístupu spočíva vo vytvorení rozsiahleho problému statickej optimalizácie (neznámych parametrov), ktorý môže obsahovať veľký počet lokálnych miním. V takom prípade je obtiažne nájsť globálne minimum.

| | | | |
|--------------------|-------------------|-------------------------|---|
| Numerické riešenie | | Formulácia problému | |
| Stavové veličiny | Riadiace veličiny | Priame metódy | Nepriame metódy postavené na PMP |
| Parametrizované | Parametrizované | Simultánny prístup (OC) | Parametrizácia stavových a adjugovaných rovníc (NR ² , QL ³) |
| Spojité | Parametrizované | Sekvenčný prístup (CVP) | Gradientové metódy (CVI), nastreľovacie metódy (BCI) |

Tabuľka 2.1. Klasifikácia numerických metód dynamickej optimalizácie

Záverom môžeme povedať, že charakteristická črta gradientových algoritmov s parciálnou deriváciou prvého rádu¹ je, že vykazujú veľké zlepšenie v prvých krokoch iterácie, avšak majú pomalú konvergenciu v blízkosti optimálneho riešenia.

V tabuľke 2.1 môžeme vidieť klasifikáciu numerických metód dynamickej optimalizácie spolu s navrhnutými stratégiami riešenia a tabuľka 2.2 ukazuje porovnanie prezentovaných optimalizačných metód na základe rozličnej charakteristiky.

¹maticu prvých parciálnych derivácií funkcie označujeme ako Jakobiho matica

²Newton Raphsonova metóda

³kvázi linearizačná metóda

| Charakteristika | Priame metódy | | Nepriame metódy |
|----------------------|--|--|--|
| | Sekvenčná metóda | Simultánna metóda | Nastreľovacia metóda |
| Princíp | Riadiace veličiny sú parametrizované | Riadiace a stavové veličiny sú parametrizované | Lagrangeove multiplikátory sú parametrizované a počiatočné hodnoty pre volené parametre sú odhadované (parametrizácia je závislá od použitej metódy) |
| Stratégia riešenia | DAE systém je riešený optimalizačným programom s ODE solverom | DAE systém je prekonvertovaný na NLP, ktorý je väčšinou riešený pomocou SQP | DAE systém je riešený použitím metódy najstrmšieho zosťupu, alebo pomocou QN metódy |
| Presnosť riešenia | Daná metóda je typu „feasible“, čo dáva záruku presnosti, avšak je závislá od parametrizovaného riadenia | Daná metóda je typu „infeasible“ čo znamená, že presnosť nie je zaručená | Presnosť závisí na dobrých počiatočných odhadoch pre adjuované premenné |
| Sila daného prístupu | Implementácia je jednoduchá a priamočiara | Aproximované optimálne riešenie môže byť získané zo zlých počiatočných odhadov | Optimálne riešenie je vždy zabezpečené, pretože potrebné podmienky optimality sú zabezpečené v každom kroku algoritmu |
| Rýchlosť konverencie | Veľmi pomalá, spôsobená celkovým výpočtom, ktorý sa v každom kroku iterácie opakuje | Rýchla v porovnaní s ostatnými dvoma metódami | Pomalá, spôsobená komplexivitou v riešení DAEs |
| Integrácia systému | Presná a časovo náročná | Aproximovaná a rýchla | Presná, pomalá a komplexná |
| Výpočtová náročnosť | Riešenie dynamických rovníc, kedy riadiace veličiny nie sú v optime | Kompromis medzi aproximáciou a presnosťou | Obsiahla symbolická manipulácia potrebná pri odvodeniach a riešeníach TPBVP |

Tabuľka 2.2. Porovnanie optimalizačných metód

Riešenie problémov optimálneho riadenia hybridných systémov

3.1 Parametrizácia vektora riadenia

V metóde, ktorá je nazvaná parametrizácia vektora riadenia, je riadiaci profil parametrizovaný obvykle niekoľkými parametrami a stavové rovnice majú pôvodný ODE/DAE tvar ako môžeme vidieť na obrázku 3.1. Môže sa zdať, že parametrizácia úsekovej konštanty riadenia môže byť nepresná v určitých situáciách a to je dôvod, prečo nemôžeme aproximovať celkom blízko k pôvodnej spojitej trajektórii (Fikar a Latifi 2001). Preto musí existovať dostatočný počet vhodne rozdelených časových intervalov P . Vznikne tak komplexný NLP problém, ktorý obsahuje mnohé lokálne minimá, ku ktorým dané riešenie konverguje. Každý parametrizačný problém môže byť preformulovaný na problém s úsekovými konštantami riadenia. Zoberme napríklad úsekové lineárne riadenie vo forme

$$u(t) = a_1 + a_2 t \quad (3.1)$$

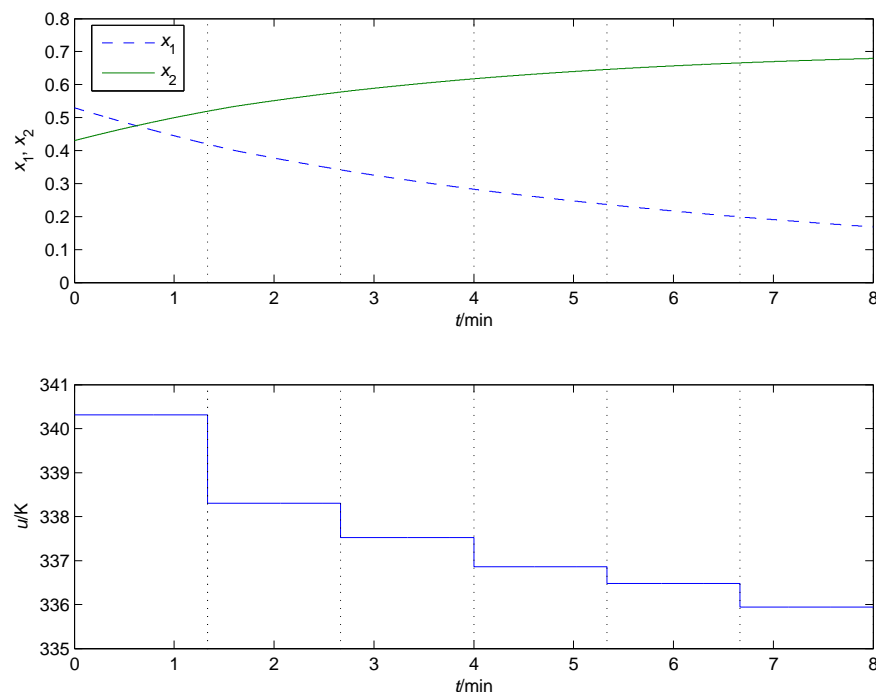
z ktorého je zrejmé, že koeficienty a_1 , a_2 môžu byť použité ako riadiace veličiny. Následne ich môžeme nahradiť s u_1 a u_2 , kedy rovnica (3.1) nadobudne nasledovný tvar

$$\mathbf{u}(t) = u_1 + u_2 t \quad (3.2)$$

Iný typ parametrizácie je pomocou Lagrangeových polynómov, ktoré sú definované ako

$$P_j(t) = \prod_{i=0, j}^N \left(\frac{t - t_i}{t_j - t_i} \right) \quad (3.3)$$

kde N je stupeň polynómu $P_j(t)$. Časové intervaly t_i sú väčšinou vypočítané ako korene



Obrázok 3.1. Ukážka parametrizácie vektora riadenia a priebeh stavových veličín pre 6 fixných časových intervalov

Legendreových polynómov.

Parametrizácia riadenia potom nadobudne tvar

$$\mathbf{u}(t) = \sum_{j=1}^N \bar{u}_j \psi_j(t), \quad \text{kde } \psi_j(t) = \prod_{i=1, j}^N \left(\frac{t - t_i}{t_j - t_i} \right) \quad (3.4)$$

kde \bar{u}_i je optimalizovaná premenná úsekovkej konštanty riadenia. Výhoda použitia Lagrangeových polynómov je daná skutočnosťou, že

$$u(t_i) = \bar{u}_i \quad (3.5)$$

a tak koeficienty \bar{u}_j majú podstatný fyzikálny význam. To je užitočné pri určení ich ohraničení, ktoré sú také isté ako v pôvodnom riadení.

3.2 Spojité riadenie po úsekoch

V štandardnom prístupe sú riadiace veličiny pozdĺž časových intervalov stanovené nezávisle. Sú však situácie, kedy je požiadavka, aby celková riadiaca trajektória ostala spojitá.

Existujú dva možné prístupy:

1. Pridáme obmedzenia na riadiace veličiny pozdĺž časových hraníc vo forme

$$\mathbf{u}(t_i^-) = \mathbf{u}(t_i^+) \quad (3.6)$$

Týmto vytvoríme $P - 1$ obmedzení typu rovnosť (pre každú hodnotu \mathbf{u}). Keď tieto obmedzenia neobsahujú stavy, systém prídavných rovníc sa nevytvára. Avšak, samotný NLP program môže mať problémy s konvergenciou spôsobené veľkým počtom obmedzení typu rovnosť.

2. Pre každý prvok riadiaceho vektora pridáme novú stavovú premennú, ktorá bude znamenať riadenie. Jej počiatočná hodnota musí byť optimalizovaná (riadenie v čase t_0) a jej derivácia rovná derivácii aproximovaného riadenia. Predpokladajme napríklad parametrizáciu lineárneho riadenia v tvare $u_i = a_1 + b_i t$. Nová stavová diferenciálna rovnica je potom daná nasledovne

$$\dot{x}^u = b_i, \quad x(t_0) = a_1 \quad (3.7)$$

kde x^u nahradí riadenie u v rovniciach systému a účelovej funkcii. Optimalizovanými premennými sú potom b_1, \dots, b_P, a_1 – smer a počiatočná hodnota.

3.3 Definícia optimalizovaných premenných

V kapitole 3.1 bola ukázaná parametrizácia vektora riadenia na konštantné úseky, pre ktoré je potrebné vo väčšine prípadov zadefinovať horné aj dolné ohraničenia. Preto pre vektor optimalizovaných premenných, ktorý má tvar

$$\mathbf{y}^T = (\Delta t_1, \dots, \Delta t_P, \mathbf{u}_1^T, \dots, \mathbf{u}_P^T, \mathbf{p}^T) \quad (3.8)$$

zadefinujeme nasledujúce ohraničenia

$$\Delta t_i \in [\Delta t_i^{\min}, \Delta t_i^{\max}], \quad (3.9)$$

$$\mathbf{u}_i \in [\mathbf{u}_i^{\min}, \mathbf{u}_i^{\max}], \quad (3.10)$$

$$\mathbf{p}_i \in [\mathbf{p}_i^{\min}, \mathbf{p}_i^{\max}] \quad (3.11)$$

3.4 Formulácia problému

Trajektória riadenia môže byť rozdelená na konštantné úseky, čím sa pôvodný problém dynamickej optimalizácie prevedie na problém statickej optimalizácie (NLP). Optimalizačný

problém je potom definovaný nasledovne

$$\min_{\mathbf{y}} J_0(\mathbf{y}) \quad (3.12)$$

s obmedzujúcimi podmienkami

$$J_j(\mathbf{y}) = 0, \quad j = \overline{1, k_e}, \quad (3.13)$$

$$J_j(\mathbf{y}) \geq 0, \quad j = k_e + \overline{1, k_i} \quad (3.14)$$

kde k je celkový počet obmedzujúcich podmienok, pretože $k = k_e + k_i$. Na získanie hodnôt J_j musí byť systém stavových rovníc a integrálnych tvarov funkcií F_j integrovaný v hraniciach od t_0 po t_P . Následne sú vypočítané gradienty optimalizovaných veličín \mathbf{y} vzhľadom na účelovú funkciu a obmedzenia. Ak optimalizované veličiny nie sú závislé od stavov \mathbf{x} , gradienty sa získajú priamym spôsobom. V opačnom prípade je potrebné použiť jeden z postupov, ktorý je bližšie ukázaný v nasledujúcej kapitole 3.5.

3.5 Definícia obmedzení na trajektóriu

Väčšina riešených problémov dynamickej optimalizácie, s ktorými sa stretávame, majú za-definované obmedzenia. Definícia príslušného obmedzenia je v tvare rovnosti, alebo nerovnosti (Feehery a Barton 1998, Aziz a Mujtaba 2002), tak ako môžeme vidieť v nasledujúcich rovniciach

$$\mathbf{g}(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{p}) = \mathbf{0}, \quad t \in \langle t_0, t_P \rangle, \quad (3.15)$$

$$\mathbf{g}(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{p}) \geq \mathbf{0}, \quad t \in \langle t_0, t_P \rangle \quad (3.16)$$

kde vo všeobecnosti je veľmi obtiažne prejsť uspokojivo celý časový interval. Je niekoľko metód, venujúcich sa týmto obmedzeniam, ktoré ich odstraňujú, alebo transformujú na tvar rovnice 2.4. Avšak, je dôležité použiť iba také transformácie, ktoré predstavujú diferencovateľné správanie.

Pri riešení problémov dynamickej optimalizácie sa môžeme stretnúť s nasledujúcimi typmi obmedzení (Goh a Teo 1988, Chen a Hwang 1990):

(i) Nekonečno rozmerná podmienka rovnosti

$$g(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{p}) = 0, \quad t \in [\tau_1, \tau_2], \quad t_0 \leq \tau_1 < \tau_2 \leq t_P \quad (3.17)$$

(ii) Nekonečno rozmerná podmienka nerovnosti

$$g(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{p}) \geq 0, \quad t \in [\tau_1, \tau_2], \quad t_0 \leq \tau_1 < \tau_2 \leq t_P \quad (3.18)$$

(iii) Podmienka rovnosti s obmedzeniami na vnútorné body

$$g(\tau, \mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{p}) = 0, \quad \tau \in [t_0, t_P] \quad (3.19)$$

(iv) Podmienka nerovnosti s obmedzeniami na vnútorné body

$$g(\tau, \mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{p}) \geq 0, \quad \tau \in [t_0, t_P] \quad (3.20)$$

(v) Podmienka rovnosti na koncový bod

$$g(t_P, \mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{p}) = 0 \quad (3.21)$$

(vi) Podmienka nerovnosti na koncový bod

$$g(t_P, \mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{p}) \geq 0 \quad (3.22)$$

Problém s danými obmedzeniami je potrebné riešiť na základe jednotne zadaného algoritmu na počítanie gradientov. Na dosiahnutie tohto cieľa je potrebné obmedzenia (3.17–3.22) previesť na kanonický funkcionál typu, ako je ukázaný v rovnici (2.4), v ktorom j definuje typ obmedzenia

$$J_j = G_j(t_P, \mathbf{x}(t_P), \mathbf{u}(t_P), \mathbf{p}) + \int_{t_0}^{t_P} F_j(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t), \mathbf{p}) dt \quad (3.23)$$

kde hodnoty G_j a F_j patriace k rôznym typom obmedzeniam (3.17–3.22) sú definované nasledovne:

(i) Nekonečno rozmerná podmienka rovnosti

$$G_j = 0, \quad F_j = \sigma [g(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{p})]^2, \quad J_j = 0 \quad (3.24)$$

(ii) Nekonečno rozmerná podmienka nerovnosti

$$G_j = 0, \quad F_j = \sigma \min[0, g(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{p})], \quad J_j = 0 \quad (3.25)$$

alebo mierne modifikovaná podmienka

$$G_j = 0, \quad F_j = \sigma \min[0, g(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{p})]^2, \quad J_j = 0 \quad (3.26)$$

Výhoda oproti prístupu, ktorý bol opísaný v rovnici (3.25), je kvadratická eliminácia,

a z toho dôvodu väčšia penalizácia malých odchýlok. Nevýhoda spočíva v trochu menšej realizovateľnosti v danej oblasti (v skutočnosti nie veľmi významná).

(iii) Podmienka rovnosti s obmedzeniami na vnútorné body

$$G_j = g(\tau, \mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{p}), \quad F_j = 0, \quad J_j = 0 \quad (3.27)$$

(iv) Podmienka nerovnosti s obmedzeniami na vnútorné body

$$G_j = g(\tau, \mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{p}), \quad F_j = 0, \quad J_j \geq 0 \quad (3.28)$$

(v) Podmienka rovnosti na koncový bod

$$G_j = g(t_P, \mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{p}), \quad F_j = 0, \quad J_j = 0 \quad (3.29)$$

(vi) Podmienka nerovnosti na koncový bod

$$G_j = g(t_P, \mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{p}), \quad F_j = 0, \quad J_j \geq 0 \quad (3.30)$$

kde σ je nastaviteľný váhový koeficient, použitý na zlepšenie numerickej presnosti. V skutočnosti, hodnota váhového koeficienta závisí od toho, ako je medziriešenie vzdialené od optimálneho riešenia. Na začiatku počítačových iterácií môže byť koeficient nastavený na veľkú hodnotu, napríklad 50 a postupne ako sa riešenie blíži k optimálnemu znižovať čo možno na najmenšiu hodnotu.

Na základe definovaných obmedzení potom platí:

- pre obmedzenia typu (i) a (ii)

$$H_j(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{p}, \boldsymbol{\lambda}) = F_j(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{p}) + \boldsymbol{\lambda}_j^T \mathbf{f}(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{p}), \quad (3.31)$$

$$\dot{\boldsymbol{\lambda}}_j(t) = -\frac{\partial H_j}{\partial \mathbf{x}}, \quad (3.32)$$

$$\boldsymbol{\lambda}_j(t_P) = \mathbf{0} \quad (3.33)$$

- pre obmedzenia typu (iii) a (iv)

$$H_j(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{p}, \boldsymbol{\lambda}) = \boldsymbol{\lambda}_j^T \mathbf{f}(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{p}), \quad (3.34)$$

$$\dot{\boldsymbol{\lambda}}_j(t) = -\frac{\partial H_j}{\partial \mathbf{x}}, \quad (3.35)$$

$$\boldsymbol{\lambda}_j(t_P) = \mathbf{0}, \quad (3.36)$$

$$\boldsymbol{\lambda}_j^T(t_i^-) = \boldsymbol{\lambda}_j^T(t_i^+) + \frac{\partial G_j}{\partial \mathbf{x}^T(t_i)}, \quad i = \overline{1, P-1} \quad (3.37)$$

- pre obmedzenia typu (v) a (vi)

$$H_j(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{p}, \boldsymbol{\lambda}) = \boldsymbol{\lambda}_j^T \mathbf{f}(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{p}), \quad (3.38)$$

$$\dot{\boldsymbol{\lambda}}_j(t) = -\frac{\partial H_j}{\partial \mathbf{x}}, \quad (3.39)$$

$$\boldsymbol{\lambda}_j(t_P) = \frac{\partial G_j}{\partial \mathbf{x}(t_P)} \quad (3.40)$$

Diskretizácia obmedzení a zabezpečenie ich splnenia iba v určitých bodoch, ako môžeme vidieť v rovniciach 3.19 a 3.20, je pre solver ľahšie riešiteľná, ako spojitú zabezpečenie daných podmienok na celom intervale. Môžu však nastať situácie, hlavne pri probléme minimalizácie času, kedy k správne riešeniu týmto prístupom nedospejeme. Prezentovaný spôsob sa hlavne používa pri prediktívnom riadení, kedy časy nie sú optimalizované a malá odchýlka v obmedzeniach môže byť tolerovaná.

3.6 Metódy výpočtu gradientov

Gradienty tvoria základ výpočtu v algoritme dynamickej optimalizácie a deterministicky môžu byť získané nasledujúcimi spôsobmi:

- **konečnou diferenciou** – systém (2.1) je integrovaný n_q krát a vždy jedna optimalizovaná hodnota z vektora (3.8) je trochu posunutá. Po integrácii môžeme vypočítať gradienty pomocou vzťahu

$$\nabla_{y_i} J_j = \frac{J_j(y_1, \dots, \Delta y_i, \dots, y_{n_q}) - J_j(\mathbf{y})}{\Delta y_i}, \quad j = \overline{0, k} \quad (3.41)$$

kde k je počet obmedzení.

- **adjugovanými rovnicami** – prístup pomocou adjugovaných rovníc pre hybridné systémy je podrobne opísaný v kapitole 3.7, a preto v tejto chvíli sa nebudeme zaoberať jeho odvodením. Algoritmus riešenia pre vybrané problémy procesného priemyslu

ako aj priame odvodenie gradientov optimalizovaných premenných daných problémov je ukázaný v kapitolách (4–5).

- **citlivostnými rovnicami** – pri tejto metóde sa používajú citlivostné rovnice. Tieto rovnice získame diferenciáciou (2.1) podľa optimalizovaných parametrov

$$\dot{s}_{u_{ij}}(t) = \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{u}_{ij}^T} \right) = \frac{\partial \mathbf{f}_i}{\partial \mathbf{x}^T} s_{u_{ij}} + \frac{\partial \mathbf{f}_i}{\partial \mathbf{u}^T}, \quad (3.42)$$

$$\dot{s}_{\mathbf{p}}(t) = \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{p}^T} \right) = \frac{\partial \mathbf{f}_i}{\partial \mathbf{x}^T} s_{\mathbf{p}} + \frac{\partial \mathbf{f}_i}{\partial \mathbf{p}^T} \quad (3.43)$$

kde $s_{u_{ij}}$, $s_{\mathbf{p}}$ sú citlivostné koeficienty. V tomto prípade pre jednoduchosť uvažujme systém, v ktorom nedochádza k zmenám matematického opisu (pri výpočte gradientov potom platí $\mathbf{f}_1 = \mathbf{f}_i$ pre $i = \overline{2, P}$).

Keď sú citlivosti $s(t)$ určené, nasleduje priame vypočítanie gradientov na základe kritéria optimalizácie (2.4)

$$\nabla_{u_{ij}} J = \sum_{i=1}^P \frac{\partial G}{\partial \mathbf{x}^T(t_i^-)} s_{u_{ij}} + \sum_{i=1}^P \frac{\partial G}{\partial \mathbf{u}_i^T} + \int_{t_0}^{t_P} \left(\frac{\partial \mathbf{f}_i}{\partial \mathbf{x}^T} s_{u_{ij}} + \frac{\partial \mathbf{f}_i}{\partial \mathbf{u}^T} \right) dt, \quad (3.44)$$

$$\nabla_{\mathbf{p}} J = \sum_{i=1}^P \frac{\partial G}{\partial \mathbf{x}^T(t_i^-)} s_{\mathbf{p}} + \frac{\partial G}{\partial \mathbf{p}^T} + \int_{t_0}^{t_P} \left(\frac{\partial \mathbf{f}_i}{\partial \mathbf{x}^T} s_{\mathbf{p}} + \frac{\partial \mathbf{f}_i}{\partial \mathbf{p}^T} \right) dt \quad (3.45)$$

V prístupe pomocou citlivostných rovníc (Srinivasan a kol. 2003) pre každý prvok vektora \mathbf{u} a parametra \mathbf{p} sú stavové rovnice (2.1) použité na výpočet hodnoty účelovej funkcie a obmedzení v koncovom čase. Algoritmus je potom nasledovný:

1. Parametrizácia riadenia a parametrov použitím konečného počtu optimalizovaných premenných.
2. Počiatočný odhad optimalizovaných premenných.
3. Dopredná integrácia stavových (2.1) a citlivostných rovníc (3.42), (3.43) od počiatočného po koncový čas.
4. Výpočet hodnoty účelovej funkcie a obmedzení (2.4).
5. Riešenie problému dynamickej optimalizácie SQP, aktualizovanie hodnôt optimalizovaných premenných na základe gradientov (3.44), (3.45). Opakovanie kroku 3–5 pokiaľ hodnota účelovej funkcie pri splnených podmienkach nie je minimálna.

Podrobne odvodené gradienty pre hybridné systémy pomocou citlivostných rovníc sú ukázané napríklad v dizertačnej práci [Feehery \(1998\)](#).

Každý prístup k výpočtu gradientov má svoje špecifiká. Tieto prístupy sú porovnané napríklad v práci [Rosen a Luus \(1991\)](#). Ak pokladáme pri výbere gradientovej metódy za dôležitý faktor „jednoduchosť“ programovania, potom metóda konečných diferencií je najvhodnejšia, pretože nevyžaduje výpočet derivácií systému podľa \mathbf{x} a \mathbf{u} . Metódy konečných diferencií a riešenie problému pomocou citlivostných rovníc si vyžadujú riešiť veľké množstvo diferenciálnych rovníc. Toto veľké množstvo diferenciálnych rovníc vyplýva z toho, že máme integrovať skoro identický súbor rovníc pre každú NLP premennú. Naproti tomu, keď použijeme riadenie po konštantných úsekoch s dostatočne veľkým počtom úsekov P , je často používaný prístup pomocou adjugovaných rovníc, pretože počet integrovaných rovníc nezávisí od veľkosti hodnoty P , ale od počtu obmedzujúcich podmienok. Samozrejme, výber najlepšej metódy závisí od typu problému. Do algoritmu riešenia je potom efektívne implementovať aspoň dve z vyššie uvedených metód na výpočet gradientov. Obyčajne sa volí metóda konečných diferencií, ktorá je ľahšia na implementáciu v kombinácii s adjugovanými, alebo citlivostnými rovnicami.

3.7 Odvodenie gradientov z podmienok optimality

V tejto časti dizertačnej práce, sa venujeme odvodeniu podmienok optimality na základe variačného počtu pri uvažovaní podmienky prepnutia. Následne sú z podmienok optimality odvodené gradienty pre optimalizované premenné na základe adjugovaných rovníc, ktoré sú potrebné pri výpočte v sekvenčnom prístupe.

Najskôr budeme uvažovať problém funkcionálu J . Funkcionál zadaný v tvare (2.4) doplníme obmedzeniami na základe dynamiky systému (2.1) na nasledovný tvar

$$J = G + \int_{t_0}^{t_P} (F + \boldsymbol{\lambda}^T (\mathbf{f} - \dot{\mathbf{x}})) dt \quad (3.46)$$

kde použitím Hamiltoniánu H

$$H(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{p}, \boldsymbol{\lambda}) = F + \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{f} \quad (3.47)$$

sa môže predchádzajúca rovnica upraviť na

$$J = G + \sum_{i=1}^P \int_{t_{i-1}^+}^{t_i^-} (H - \boldsymbol{\lambda}^T \dot{\mathbf{x}}) dt \quad (3.48)$$

kde t_i^- znamená čas pred $t = t_i$ a t_i^+ čas po $t = t_i$. Posledná časť v integráli môže byť

integrovaná po častiach, pretože platí

$$\frac{d(\boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{x})}{dt} = \frac{d\boldsymbol{\lambda}^T}{dt} \mathbf{x} + \boldsymbol{\lambda}^T \frac{d\mathbf{x}}{dt} \quad (3.49)$$

čo vedie k nasledovnému vyjadreniu

$$J = G + \sum_{i=1}^P \int_{t_{i-1}^+}^{t_i^-} (H + \dot{\boldsymbol{\lambda}}^T \mathbf{x}) dt + \sum_{i=1}^P (\boldsymbol{\lambda}^T(t_{i-1}^+) \mathbf{x}(t_{i-1}^+) - \boldsymbol{\lambda}^T(t_i^-) \mathbf{x}(t_i^-)) \quad (3.50)$$

Podmienky optimality pre náš problém, ako už bolo spomenuté, sa trochu líšia od pôvodného prístupu použitého v [Bryson a Ho \(1975\)](#) a z časti boli odvodené v práci [Ruban \(1997\)](#). Teraz urobme variáciu účelovej funkcie, variáciou optimalizovaných premenných δt_i , $\delta \mathbf{u}_i$, $\delta \mathbf{p}$ a variáciou premenných, ktoré sú jej funkciami $\delta \mathbf{x}(t_i)$, $\delta \boldsymbol{\lambda}$. Potom platí

$$\begin{aligned} \delta J = & \sum_{i=1}^P \frac{\partial G}{\partial t_i} \delta t_i + \sum_{i=1}^P \frac{\partial G}{\partial \mathbf{x}^T(t_i)} \delta \mathbf{x}(t_i) + \sum_{i=1}^P \frac{\partial G}{\partial \mathbf{u}_i^T} \delta \mathbf{u}_i + \frac{\partial G}{\partial \mathbf{p}^T} \delta \mathbf{p} \\ & + H(t_P^-) \delta t_P - H(t_0^+) \delta t_0 + \sum_{i=1}^{P-1} [H(t_i^-) - H(t_i^+)] \delta t_i \\ & + \boldsymbol{\lambda}^T(t_0^+) \delta \mathbf{x}(t_0) - \boldsymbol{\lambda}^T(t_P^-) \delta \mathbf{x}(t_P) + \sum_{i=1}^{P-1} [\boldsymbol{\lambda}^T(t_i^+) \delta \mathbf{x}(t_i^+) - \boldsymbol{\lambda}^T(t_i^-) \delta \mathbf{x}(t_i^-)] \\ & + \int_{t_0}^{t_P} \left[\left(\dot{\boldsymbol{\lambda}}^T + \frac{\partial H}{\partial \mathbf{x}^T} \right) \delta \mathbf{x} + \frac{\partial H}{\partial \mathbf{u}^T} \delta \mathbf{u} + \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}^T} \delta \mathbf{p} \right] dt \end{aligned} \quad (3.51)$$

kde bola uvažovaná skutočnosť, že $\delta \boldsymbol{\lambda} = \delta \dot{\boldsymbol{\lambda}} \delta t$.

3.7.1 Definícia nespojitosti a podmienky prepnutia

Budeme predpokladať, že vzťah medzi variáciou $\delta \mathbf{x}(t_i^+)$ a $\delta \mathbf{x}(t_i^-)$ je daný z rovnice prerušenia (2.3) a jej variáciou

$$\delta \mathbf{x}(t_i^+) = \delta \mathbf{x}(t_i^-) + \left(\frac{\partial \boldsymbol{\Delta}_i}{\partial t_i} \right) \delta t_i + \left(\frac{\partial \boldsymbol{\Delta}_i}{\partial \mathbf{x}_i^T(t_i^-)} \right) \delta \mathbf{x}(t_i^-) + \left(\frac{\partial \boldsymbol{\Delta}_i}{\partial \mathbf{u}_i^T} \right) \delta \mathbf{u}_i + \left(\frac{\partial \boldsymbol{\Delta}_i}{\partial \mathbf{p}^T} \right) \delta \mathbf{p} \quad (3.52)$$

Predpokladom pevného počiatočného času $\delta t_0 = 0$ a úpravou $\delta \mathbf{x}(t_0) = \left(\frac{\partial \mathbf{x}_0}{\partial \mathbf{p}^T} \right) \delta \mathbf{p}$ rovnica

(3.51) nadobudne tvar

$$\begin{aligned}
\delta J = & \left[\frac{\partial G}{\partial \mathbf{x}^T(t_P)} - \boldsymbol{\lambda}^T(t_P^-) \right] \delta \mathbf{x}(t_P) + \int_{t_0}^{t_P} \left(\dot{\boldsymbol{\lambda}}^T + \frac{\partial H}{\partial \mathbf{x}^T} \right) \delta \mathbf{x} dt \\
& + \sum_{i=1}^{P-1} \left[\frac{\partial G}{\partial \mathbf{x}^T(t_i)} + \boldsymbol{\lambda}^T(t_i^+) - \boldsymbol{\lambda}^T(t_i^-) + \boldsymbol{\lambda}^T(t_i^+) \left(\frac{\partial \boldsymbol{\Delta}_i}{\partial \mathbf{x}^T(t_i)} \right) \right] \delta \mathbf{x}(t_i) \\
& + \left[H(t_P^-) + \frac{\partial G}{\partial t_P} \right] \delta t_P + \sum_{i=1}^{P-1} \left[H(t_i^-) - H(t_i^+) + \frac{\partial G}{\partial t_i} + \boldsymbol{\lambda}^T(t_i^+) \left(\frac{\partial \boldsymbol{\Delta}_i}{\partial t_i} \right) \right] \delta t_i \\
& + \left[\sum_{i=1}^P \left[\frac{\partial G}{\partial \mathbf{u}_i^T} + \int_{t_{i-1}^+}^{t_i^-} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{u}_i^T} dt \right] + \sum_{i=1}^{P-1} \boldsymbol{\lambda}^T(t_i^+) \left(\frac{\partial \boldsymbol{\Delta}_i}{\partial \mathbf{u}_i^T} \right) \right] \delta \mathbf{u}_i \\
& + \left[\boldsymbol{\lambda}^T(t_0^+) \frac{\partial x_0}{\partial \mathbf{p}^T} + \frac{\partial G}{\partial \mathbf{p}^T} + \int_{t_0}^{t_P} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}^T} dt + \sum_{i=1}^{P-1} \boldsymbol{\lambda}^T(t_i^+) \left(\frac{\partial \boldsymbol{\Delta}_i}{\partial \mathbf{p}^T} \right) \right] \delta \mathbf{p} \tag{3.53}
\end{aligned}$$

V tejto chvíli je potrebné zdefinovať závislosť variácie prerušenia v čase t_i pri variácii $\mathbf{x}(t_i^-)$, \mathbf{u}_i a variácii parametrov \mathbf{p} , použitím rovnice (2.2). Závislosť variácie potom nadobudne tvar

$$\delta \mathbf{g}_i = \left(\frac{\partial \mathbf{g}_i}{\partial t_i} \right) \delta t_i + \left(\frac{\partial \mathbf{g}_i}{\partial \mathbf{x}_i^T(t_i^-)} \right) \delta \mathbf{x}_i(t_i^-) + \left(\frac{\partial \mathbf{g}_i}{\partial \mathbf{u}_i^T} \right) \delta \mathbf{u}_i + \left(\frac{\partial \mathbf{g}_i}{\partial \mathbf{p}^T} \right) \delta \mathbf{p} \tag{3.54}$$

kde úpravou predchádzajúcej rovnice získame nasledovný vzťah, vzhľadom na variáciu t_i

$$\delta t_i = - \left(\frac{\partial \mathbf{g}_i}{\partial t_i} \right)^{-1} \left(\frac{\partial \mathbf{g}_i}{\partial \mathbf{x}_i^T(t_i^-)} \right) \delta \mathbf{x}_i(t_i^-) - \left(\frac{\partial \mathbf{g}_i}{\partial t_i} \right)^{-1} \left(\frac{\partial \mathbf{g}_i}{\partial \mathbf{u}_i^T} \right) \delta \mathbf{u}_i - \left(\frac{\partial \mathbf{g}_i}{\partial t_i} \right)^{-1} \left(\frac{\partial \mathbf{g}_i}{\partial \mathbf{p}^T} \right) \delta \mathbf{p} \tag{3.55}$$

Zjednodušením rovnice (3.55) a zdefinovaním koeficientov \mathbf{a}_i , \mathbf{b}_i a \mathbf{c}_i dostaneme

$$\delta t_i = \mathbf{a}_i \delta \mathbf{x}_i(t_i^-) + \mathbf{b}_i \delta \mathbf{u}_i + \mathbf{c}_i \delta \mathbf{p}, \tag{3.56}$$

$$\mathbf{a}_i = - \left(\frac{\partial \mathbf{g}_i}{\partial t_i} \right)^{-1} \left(\frac{\partial \mathbf{g}_i}{\partial \mathbf{x}_i^T(t_i^-)} \right), \tag{3.57}$$

$$\mathbf{b}_i = - \left(\frac{\partial \mathbf{g}_i}{\partial t_i} \right)^{-1} \left(\frac{\partial \mathbf{g}_i}{\partial \mathbf{u}_i^T} \right), \tag{3.58}$$

$$\mathbf{c}_i = - \left(\frac{\partial \mathbf{g}_i}{\partial t_i} \right)^{-1} \left(\frac{\partial \mathbf{g}_i}{\partial \mathbf{p}^T} \right) \tag{3.59}$$

Roznásobením rovnice (3.53) s (3.56) a následnou úpravou získame tvar

$$\begin{aligned}
 \delta J = & \left[H(t_P^-) + \frac{\partial G}{\partial t_P} \right] \delta t_P + \left[\frac{\partial G}{\partial \mathbf{x}^T(t_P)} - \boldsymbol{\lambda}^T(t_P^-) \right] \delta \mathbf{x}(t_P) + \int_{t_0}^{t_P} \left(\dot{\boldsymbol{\lambda}}^T + \frac{\partial H}{\partial \mathbf{x}^T} \right) \delta \mathbf{x} dt \\
 & + \sum_{i=1}^{P-1} \left[H(t_i^-) - H(t_i^+) + \frac{\partial G}{\partial t_i} + \boldsymbol{\lambda}^T(t_i^+) \left(\frac{\partial \boldsymbol{\Delta}_i}{\partial t_i} \right) \right] \mathbf{a}_i \delta \mathbf{x}(t_i) \\
 & + \sum_{i=1}^{P-1} \left[\frac{\partial G}{\partial \mathbf{x}^T(t_i)} + \boldsymbol{\lambda}^T(t_i^+) - \boldsymbol{\lambda}^T(t_i^-) + \boldsymbol{\lambda}^T(t_i^+) \left(\frac{\partial \boldsymbol{\Delta}_i}{\partial \mathbf{x}^T(t_i)} \right) \right] \delta \mathbf{x}(t_i) \\
 & + \sum_{i=1}^{P-1} \left[\boldsymbol{\lambda}^T(t_i^+) \left(\frac{\partial \boldsymbol{\Delta}_i}{\partial \mathbf{u}_i^T} \right) + \left[H(t_i^-) - H(t_i^+) + \frac{\partial G}{\partial t_i} + \boldsymbol{\lambda}^T(t_i^+) \left(\frac{\partial \boldsymbol{\Delta}_i}{\partial t_i} \right) \right] \mathbf{b}_i \right] \delta \mathbf{u}_i \\
 & + \sum_{i=1}^P \left[\frac{\partial G}{\partial \mathbf{u}_i^T} + \int_{t_{i-1}^+}^{t_i^-} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{u}_i^T} dt \right] \delta \mathbf{u}_i \\
 & + \sum_{i=1}^{P-1} \left[\boldsymbol{\lambda}^T(t_i^+) \left(\frac{\partial \boldsymbol{\Delta}_i}{\partial \mathbf{p}^T} \right) + \left[H(t_i^-) - H(t_i^+) + \frac{\partial G}{\partial t_i} + \boldsymbol{\lambda}^T(t_i^+) \left(\frac{\partial \boldsymbol{\Delta}_i}{\partial t_i} \right) \right] \mathbf{c}_i \right] \delta \mathbf{p} \\
 & + \left[\boldsymbol{\lambda}^T(t_0^+) \frac{\partial x_0}{\partial \mathbf{p}^T} + \frac{\partial G}{\partial \mathbf{p}^T} + \int_{t_0}^{t_P} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}^T} dt \right] \delta \mathbf{p} \tag{3.60}
 \end{aligned}$$

V tomto momente vyberieme vektor $\boldsymbol{\lambda}$ zo zátvoriek, ktoré sú násobené variáciou stavu $\delta \mathbf{x}$. Získame tým nezávislosť δJ od $\delta \mathbf{x}$. Vektor Lagrangových multiplikátorov $\boldsymbol{\lambda}$ je potom definovaný nasledujúcimi diferenciálnymi rovnicami

$$\dot{\boldsymbol{\lambda}}(t) = - \frac{\partial H}{\partial \mathbf{x}} \tag{3.61}$$

s hraničnou hodnotou v bode t_P

$$\boldsymbol{\lambda}(t_P) = \frac{\partial G}{\partial \mathbf{x}(t_P)} \tag{3.62}$$

Podmienky nespojitosti v čase prepnutia dynamiky sú zadefinované ako

$$\begin{aligned}
 \boldsymbol{\lambda}^T(t_i^-) = & \boldsymbol{\lambda}^T(t_i^+) \left[I + \left(\frac{\partial \boldsymbol{\Delta}_i}{\partial \mathbf{x}^T(t_i)} \right) + \left(\frac{\partial \boldsymbol{\Delta}_i}{\partial t_i} \right) \mathbf{a}_i \right] \\
 & + \left[H(t_i^-) - H(t_i^+) + \frac{\partial G}{\partial t_i} \right] \mathbf{a}_i + \frac{\partial G}{\partial \mathbf{x}^T(t_i)}, \quad i = \overline{1, P-1} \tag{3.63}
 \end{aligned}$$

Ak bod prerušenia závisí explicitne na parametroch, potom $\mathbf{a}_i = 0$ a podmienky zámény

sú značne zjednodušené

$$\boldsymbol{\lambda}^T(t_i^-) = \boldsymbol{\lambda}^T(t_i^+) \left[I + \left(\frac{\partial \boldsymbol{\Delta}_i}{\partial \mathbf{x}^T(t_i)} \right) \right] + \frac{\partial G}{\partial \mathbf{x}^T(t_i)}, \quad i = \overline{1, P-1} \quad (3.64)$$

Konečný tvar variácie účelovej funkcie môžeme vyjadriť ako

$$\begin{aligned} \delta J = & \sum_{i=1}^{P-1} \left[\boldsymbol{\lambda}^T(t_i^+) \left(\frac{\partial \boldsymbol{\Delta}_i}{\partial \mathbf{u}_i^T} \right) + \left[H(t_i^-) - H(t_i^+) + \frac{\partial G}{\partial t_i} + \boldsymbol{\lambda}^T(t_i^+) \left(\frac{\partial \boldsymbol{\Delta}_i}{\partial t_i} \right) \right] \mathbf{b}_i \right] \delta \mathbf{u}_i \\ & + \sum_{i=1}^P \left[\frac{\partial G}{\partial \mathbf{u}_i^T} + \int_{t_{i-1}^+}^{t_i^-} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{u}_i^T} dt \right] \delta \mathbf{u}_i \\ & + \sum_{i=1}^{P-1} \left[\boldsymbol{\lambda}^T(t_i^+) \left(\frac{\partial \boldsymbol{\Delta}_i}{\partial \mathbf{p}^T} \right) + \left[H(t_i^-) - H(t_i^+) + \frac{\partial G}{\partial t_i} + \boldsymbol{\lambda}^T(t_i^+) \left(\frac{\partial \boldsymbol{\Delta}_i}{\partial t_i} \right) \right] \mathbf{c}_i \right] \delta \mathbf{p} \\ & + \left[\boldsymbol{\lambda}^T(t_0^+) \frac{\partial x_0}{\partial \mathbf{p}^T} + \frac{\partial G}{\partial \mathbf{p}^T} + \int_{t_0}^{t_P} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}^T} dt \right] \delta \mathbf{p} \\ & + \left[H(t_P^-) + \frac{\partial G}{\partial t_P} \right] \delta t_P \end{aligned} \quad (3.65)$$

Podmienky optimality vyplývajú priamo z poslednej rovnice. Je potrebné, aby všetky výrazy v zátvorkách boli rovné nule, pretože variácia účelovej funkcie v optime sa musí rovnať nule.

3.7.2 Úprava gradientov vzhľadom na čas

Z numerických dôvodov je lepšie optimalizovať zvlášť časové kroky t_i ako absolútnu hodnotu času. Z toho dôvodu sa musia gradienty vzhľadom na čas mierne modifikovať. Vzťah medzi absolútnym časom a daným časovým krokom je definovaný ako

$$t_1 = \Delta t_1, \quad (3.66)$$

$$t_2 = \Delta t_1 + \Delta t_2, \quad (3.67)$$

$$\vdots \quad (3.68)$$

$$t_P = \sum_{i=1}^P \Delta t_i \quad (3.69)$$

Konečnou úpravou získame nasledujúcu rovnicu

$$\frac{\partial J_j}{\partial \Delta t_i} = \sum_{r=1}^P \frac{\partial J_j}{\partial t_r} \frac{\partial t_r}{\partial \Delta t_i} \quad (3.70)$$

3.8 Algoritmus riešenia

V algoritme sa predpokladá účelová funkcia J_0 a k obmedzení, kde $j = \overline{1, k}$. Vektor optimalizovaných premenných \mathbf{y} obsahuje čas t_i , riadiace veličiny \mathbf{u}_i a parametre \mathbf{p} . Potom môže byť napísaný nasledujúci algoritmus:

1. Inicializácia rovníc potrebných na výpočet gradientov optimalizovaných premenných.
2. Integrácia systému (2.1) spolu s integrálnymi tvarmi F_j od $t = t_0$ po $t = t_P$. Reštart integrácie nastáva pri podmienkach zámeny (2.2) v čase t_s , pričom stavy môžu byť nespojité (2.3).
3. Cyklus pre $j = \overline{0, k}$
 - (a) Inicializácia adjugovaných premenných $\boldsymbol{\lambda}_j(t_P)$ podľa rovnice (3.62).
 - (b) Inicializácia nulových dočasných veličín $\mathbf{L}_{\mathbf{u},j}$ a $\mathbf{L}_{\mathbf{p},j}$. Tieto reprezentujú integračnú časť gradientov.
 - (c) Spätná integrácia adjugovaného systému (3.61) a dočasných premenných od $t = t_P$ po $t = t_0$. V prípade nespojitosti adjugovaných rovníc (3.63) reštartujeme integráciu a dynamiku v týchto bodoch.
 - (d) Vypočítame gradienty J_j vzhľadom na optimalizované premenné podľa rovnice 3.65.

Týmto spôsobom získame hodnoty J_j v druhom kroku a hodnoty gradientov v poslednom kroku. Gradienty vzhľadom na čas boli mierne modifikované, tak ako bolo ukázané v kapitole 3.7.2.

Treba zdôrazniť, že výpočet je iteračný (riešenie sa postupne zlepšuje), čo je dané charakteristikou metódy. Iterácia prebieha v algoritme riešenia od bodu dva po bod tri a končí pri dopredu zadanej presnosti optimalizácie. Iteračný výpočet prebieha pre účelovú funkciu a všetky obmedzenia. Grafická interpretácia algoritmu riešenia je zobrazená na obrázku 3.2. Toto je všetko, čo je potrebné vedieť pri riešení NLP problému.

Algoritmus bol vytvorený v programovacom jazyku FORTRAN 77 a je podrobne opísaný v nasledujúcej kapitole 3.8.1. Pri spätnej integrácii boli v programe implementované metódy na interpoláciu ukázané v kapitole 3.8.2.

3.8.1 Implementácia algoritmu riešenia

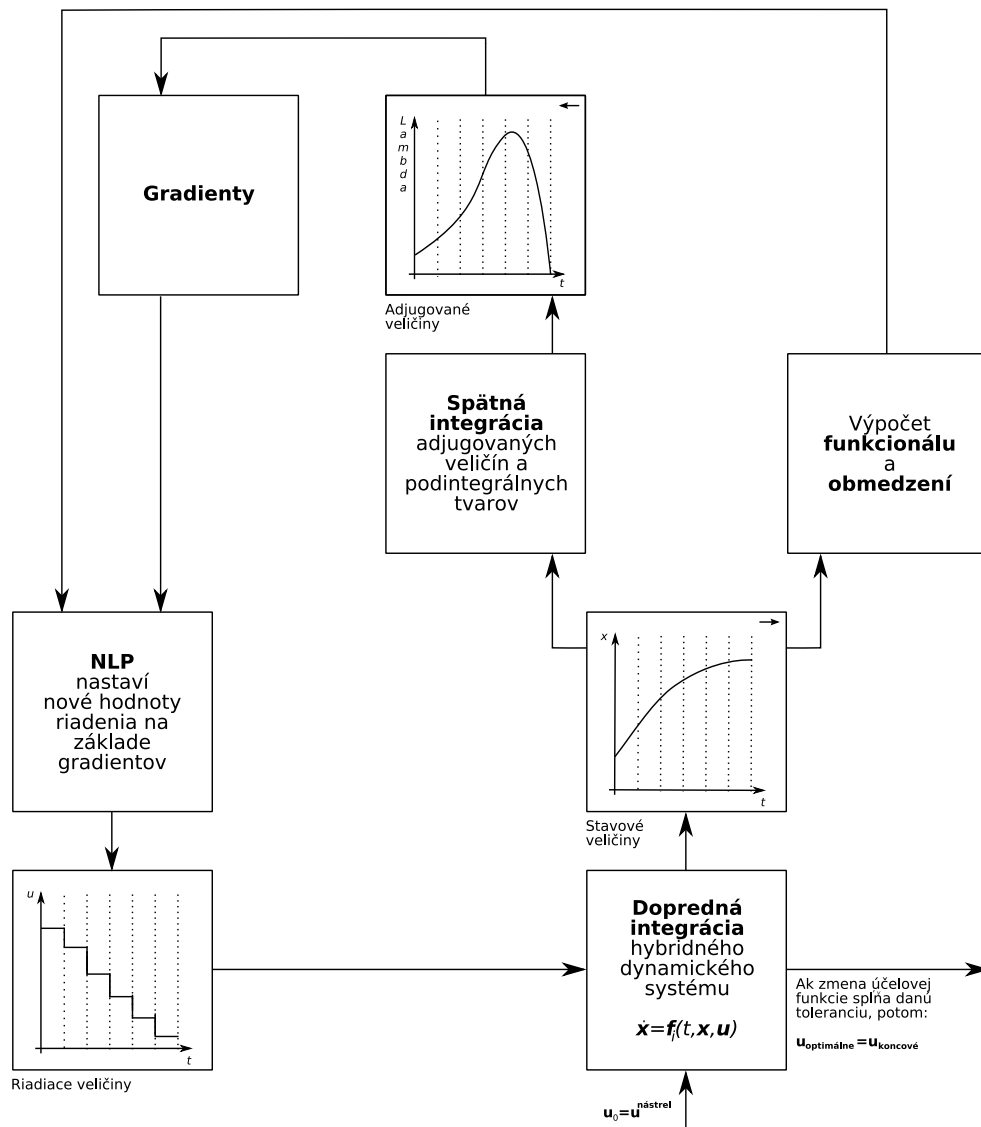
Prezentovaný algoritmus bol implementovaný v programovacom jazyku FORTRAN 77. Prvá časť programu obsahuje ODE solver pre doprednú a spätnú integráciu so schopnosťou prepnutia dynamiky v čase t_s (Petzold a Hindmarsh 1997). Druhá časť programu obsahuje modul, ktorý počíta gradienty a volá NLP solver NLPQL (Schittkowski 1981), pri ktorom dochádza k minimalizácii účelovej funkcie.

Na začiatku procesu užívateľ zadá počiatočné podmienky

- diferenciálne rovnice procesu a ich derivácie,
- účelovú funkciu, obmedzenia a ich gradienty,
- podmienky prepnutia dynamiky,
- počiatočné hodnoty, dolné a horné ohraničenia optimalizovaných premenných, počet intervalov a podintervalov.

3.8.2 Integrácia adjugovaných rovníc

Pri spätnom integrovaní adjugovaných rovníc je potrebné vedieť hodnotu stavových veličín $\mathbf{x}(t)$. V našom prípade program pri doprednej integrácii uloží hodnoty stavových veličín v dopredu nadefinovanej mriežke a pri spätnej integrácii tieto hodnoty interpoluje. Dva druhy interpolácií bolo zakomponovaných do programu: lineárna a kubická. Všetky príklady boli simulované použitím kubickej interpolácie.

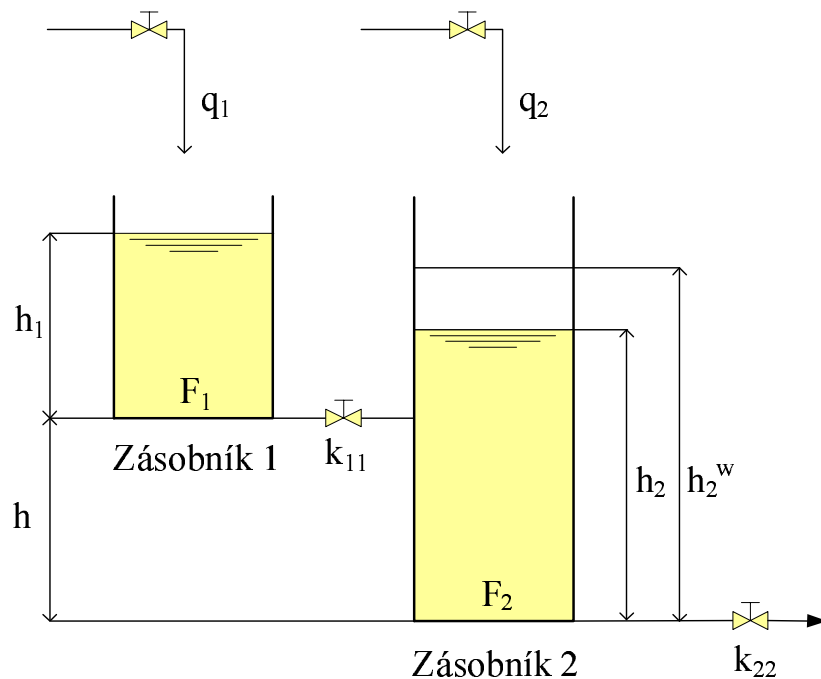


Obrázok 3.2. Grafická interpretácia algoritmu riešenia

Optimálne riadenie zásobníkov kvapaliny

4.1 Model

Pri modeli zásobníkov kvapaliny uvažujeme, že v zásobníkoch neprebíha chemická reakcia, kvapalina má konštantnú hustotu a steny zásobníkov sú kolmé.



Obrázok 4.1. Zásobníky kvapaliny

Predpokladajme nelineárny systém dvoch sériovo zapojených zásobníkov kvapaliny,

ktorý je zobrazený na obrázku 4.1 a je opísaný nasledovnými diferenciálnymi rovnicami

$$\mathbf{f}_1 = \frac{d\mathbf{x}}{dt} = \begin{cases} \frac{q_1}{F_1} - \frac{k_{11}\sqrt{h_1}}{F_1} \\ \frac{q_2}{F_2} + \frac{k_{11}\sqrt{h_1}}{F_2} - \frac{k_{22}\sqrt{h_2}}{F_2} \end{cases} \quad (4.1)$$

$$\mathbf{f}_2 = \frac{d\mathbf{x}}{dt} = \begin{cases} \frac{q_1}{F_1} - \frac{k_{11}\sqrt{h_1-(h_2-h)}}{F_1} \\ \frac{q_2}{F_2} + \frac{k_{11}\sqrt{h_1-(h_2-h)}}{F_2} - \frac{k_{22}\sqrt{h_2}}{F_2} \end{cases} \quad (4.2)$$

kde \mathbf{x} [m] je vektor stavových veličín, ktorý charakterizuje úroveň výšky hladiny kvapaliny v prvom a druhom zásobníku, \mathbf{u} [m³ min⁻¹] je vektor riadiacich veličín, ktorý charakterizuje prietok kvapaliny \mathbf{q} , parametre F_1, F_2 [m²] sú prierezové plochy zásobníkov, k_{11}, k_{22} [m^{2.5} min⁻¹] sú konštanty a h [m] je vertikálna vzdialenosť medzi zásobníkmi.

Ak výška kvapaliny v druhom zásobníku je menšia ako vertikálna vzdialenosť medzi zásobníkmi, ktorá je označená h , potom systém je opísaný rovnicou bez interakcie (4.1). V opačnom prípade systém opisuje rovnica s interakciou (4.2).

Podmienka pre zámenu dynamiky je daná rovnicou (zmena matematického opisu z \mathbf{f}_1 na \mathbf{f}_2 v čase prepnutia)

$$g_1 = h - h_2 = 0 \quad (4.3)$$

Konkrétne premenné optimalizácie s príslušnou hodnotou sú definované ako plochy $F_1 = 2,00$ m², $F_2 = 4,00$ m², konštanty $k_{11} = 1,75$ m^{2.5} min⁻¹, $k_{22} = 1,50$ m^{2.5} min⁻¹, vertikálna vzdialenosť medzi zásobníkmi $h = 0,40$ m, počiatočné výšky kvapaliny v zásobníkoch $h_1(t_0) = h_2(t_0) = 0,10$ m a žiadaná hodnota výšky kvapaliny v druhom zásobníku $h_2^w = 1,00$ m.

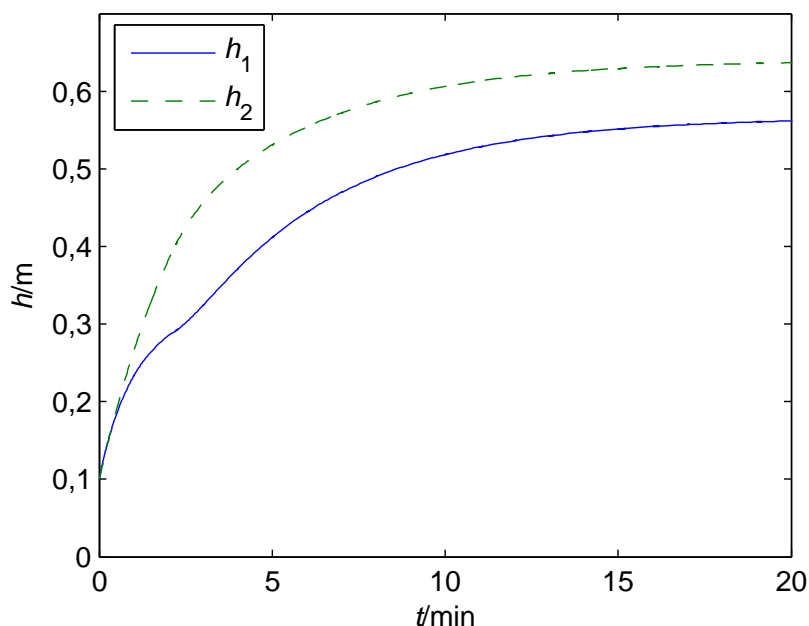
Počiatočné hodnoty optimalizovaných premenných sú definované ako $q_i = 1$ m³ min⁻¹, $\Delta t_i = 1$ min s ohraničeniami $q_i \in [0; 3]$ a $\Delta t_i \in [0,01; 10,00]$.

Na obrázku 4.2 je zobrazený priebeh výšky hladiny odsimulovaný s konštantnými počiatočnými hodnotami a s celkovým časom simulácie $t_P = 20,00$ min. Zmenu dynamiky je možné pozorovať v čase prepnutia $t_s = 2,19$ min.

4.2 Definícia problému

4.2.1 Problém minimalizácie času

Cieľom optimálneho riadenia pri danom probléme je dosiahnuť v minimálnom čase nový ustálený stav definovaný želanou výškou kvapaliny v druhom zásobníku. Účelová funkcia



Obrázok 4.2. Simulácia zásobníkov kvapaliny s konštantným prietokom

má potom nasledovný tvar

$$\min_{\Delta t_i, q} J_0 = t_P \quad (4.4)$$

kde t_P predstavuje koncový čas.

Daný optimalizačný problém je riešený vzhľadom na nasledujúce koncové obmedzenia

$$J_1 = h_2(t_P) - h_2^w = 0, \quad (4.5)$$

$$J_2 = \frac{dh_1(t_P)}{dt} = 0, \quad (4.6)$$

$$J_3 = \frac{dh_2(t_P)}{dt} = 0 \quad (4.7)$$

kde podmienka J_1 zabezpečí, že hladina kvapaliny v druhom zásobníku dosiahne žiadajú hodnotu h_2^w v koncovom čase t_P . Podmienky J_2 a J_3 zabezpečia, že ustálená hodnota kvapaliny v prvom a druhom zásobníku po dosiahnutí žiadanej hodnoty v čase t_P bude konštantná.

Vektor vstupného prietoku \mathbf{q} , ktorý obsahuje prietok q_1 a q_2 je zadefinovaný ako úseková konštanta. Optimalizačný problém potom spočíva v nájdení optimálneho času trvania jednotlivých časových intervalov a optimálnych hodnôt parametrizovaného vektora riadenia.

4.2.2 Problém LQ riadenia

Problém, s ktorým sa môžeme stretnúť pri LQ riadení a pevnom koncovom čase t_P , môže byť zadaný nasledujúcou rovnicou

$$\min_q J_0 = \int_{t_0}^{t_P} ((h_2 - h_2^s)^2 + r(q_1 - q_1^s)^2) dt \quad (4.8)$$

kde h_2^s je ustálená hodnota výšky hladiny v druhom zásobníku, q_1^s je ustálená hodnota prítoku do prvého zásobníka a r je kladný váhový koeficient. Pri všetkých simuláciách LQ problému sa predpokladá 15 konštantných úsekov o dĺžke $t_i = 1$ min.

Definícia obmedzení pre problém LQ riadenia je totožná ako v prípade problému minimalizácie času 4.2.1.

4.3 Odvodenie gradientov

Najskôr je potrebné trajektóriu riadenia rozdeliť na P po častiach konštantných úsekov (CVP), čím problém dynamickej optimalizácie pretransformujeme na problém statickej optimalizácie tak, ako je uvedené v kapitole 3.4, alebo napríklad v práci Fikar a Latifi (2001), kde autori neuvažovali podmienku prepnutia. Postup je založený na teórii optimálneho riadenia a variačného počtu. Pri výpočte gradientov účelovej funkcie a obmedzení vychádzame z rovnice (3.65), v ktorej väčšina členov má v tomto prípade nulovú hodnotu. Rovnice výpočtu gradientov pre problém minimalizácie času (4.2.1) a pre problém LQ riadenia (4.2.2) potom nadobudnú nasledovný tvar

$$\frac{\partial J_j}{\partial t_P} = H_j(t_P^-) + \frac{\partial G_j}{\partial t_P}, \quad (4.9)$$

$$\frac{\partial J_j}{\partial t_i} = H_j(t_i^-) - H_j(t_i^+) + \frac{\partial G}{\partial t_i}, \quad i = \overline{1, P-1}, \quad (4.10)$$

$$\frac{\partial J_j}{\partial \mathbf{u}_i} = \mathbf{L}_{\mathbf{u},j}(t_{i-1}) - \mathbf{L}_{\mathbf{u},j}(t_i), \quad i = \overline{1, P} \quad (4.11)$$

Na riešenie daného optimalizačného problému bol použitý modifikovaný algoritmus z kapitoly (3.8) s potrebnými gradientami optimalizovaných premenných (časové úseky t_i (4.9), (4.10) a vektor riadenia \mathbf{u}_i (4.11)).

4.4 Dosiahnuté výsledky

4.4.1 Problém minimalizácie času

Optimálne riadenie s viacerými riadiacimi veličinami

Bol uvažovaný problém, pri ktorom pomocou dvoch optimalizovaných vstupných prietokov do dvoch zásobníkov chceme v čo najkratšom čase dosiahnuť novú žiadanú ustálenú hodnotu výšky hladiny v druhom zásobníku. Na riadenie procesu boli použité 2 úseky s presnosťou optimalizácie 10^{-6} a integrácie 10^{-10} . Minimálna hodnota dosiahnutá v koncovom čase $t_P = 1,47$ min bola získaná po 8 NLP iteráciách. Na obrázku 4.3 je ukázaná optimálna stavová trajektória s odpovedajúcim riadením zobrazeným na obrázku 4.4.

Optimálne riadenie s jednou riadiacou veličinou

Vo viac realistickom prípade bola uvažovaná optimalizácia iba jednej riadiacej veličiny a to vstupného prietoku do prvého zásobníka. Bolo určených 8 časových intervalov s toleranciou optimalizácie a integrácie nastavenou na presnosť 10^{-4} a 10^{-12} .

V tomto prípade nájdený minimálny čas bol vyšší, konkrétne $t_P = 8,623$ min. Optimálna stavová trajektória je zobrazená na obrázku 4.5 s príslušným riadením na obrázku 4.6. Riadiaca veličina ukazuje typické dvojúrovňové správanie. Hoci bolo zvolených osem optimalizovaných intervalov, stačili tri: dva pre optimálne riadenie systému s dynamikou druhého rádu a jeden pre dosiahnutie nového ustáleného stavu.

4.4.2 Problém LQ riadenia

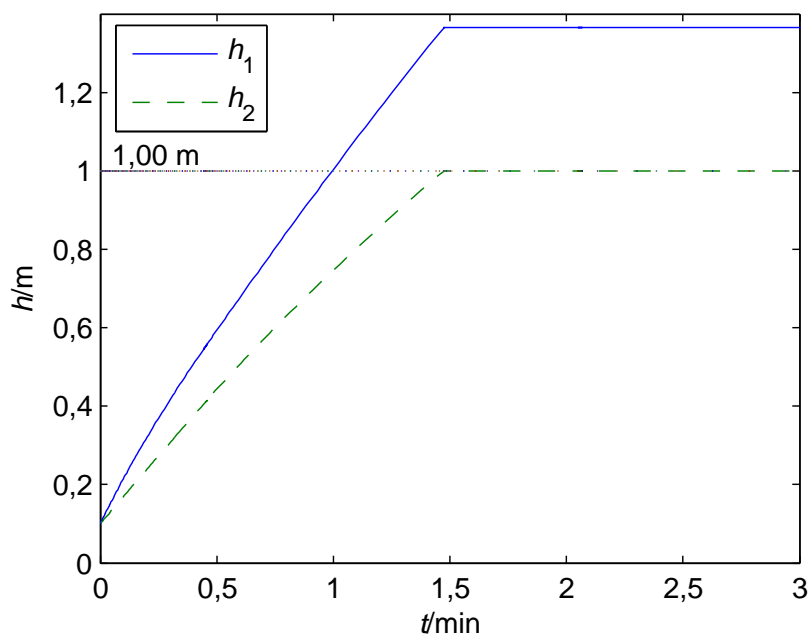
V tomto prípade bolo uvažovaných 15 časových intervalov, v ktorých trvanie bolo pevne nastavené na 1 minútu. Optimalizovaná bola iba riadiaca veličina do prvého zásobníka s presnosťou optimalizácie 10^{-5} a integrácie 10^{-12} . Analýza ustálených stavov určila ich nové hodnoty: $h_2^s = 1,00$ m, $q_1^s = 2,50$ m³ min⁻¹.

Pri danom probléme bola uvažovaná rozdielna veľkosť váhového koeficienta r . Optimálne stavové trajektórie sú zobrazené na obrázku 4.7 a riadenia na obrázku 4.8 pre rôzne hodnoty r . Znižovanie hodnoty r vedie k podobnému správaniu, ako bolo prezentované pri probléme minimalizácie času. Na druhej strane, zvyšovanie koeficientu r pôsobí na riadiacu veličinu iba s malou stratou výkonu. Optimálna hodnota účelovej funkcie pri uvažovanom váhovom koeficiente $r = 1$ bola 2,7517 po 7 NLP iteráciách.

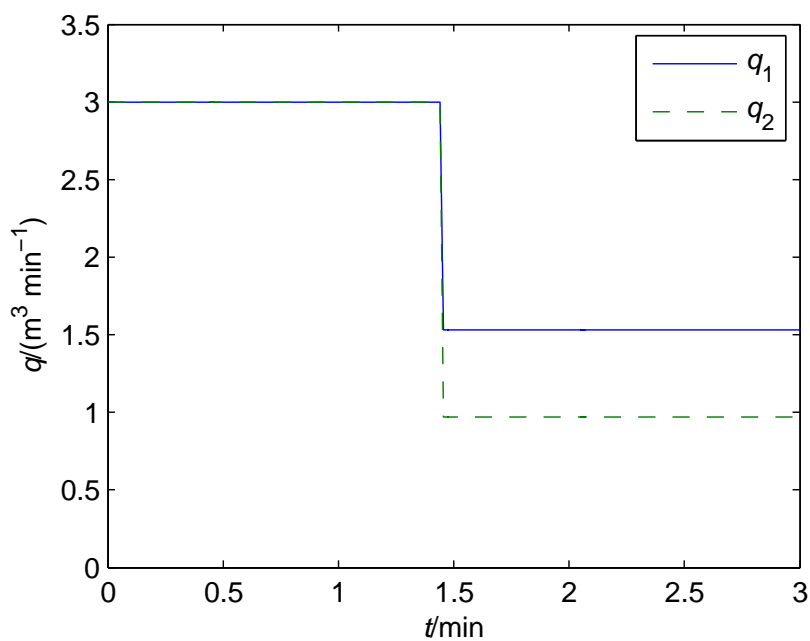
Na tomto príklade si ukážeme, že prístup pomocou adjugovaných rovníc má v určitých situáciach výhodu oproti prístupu pomocou citlivostných rovníc. Rozdiel v metódach v počte integrácií a tým aj celkovým časom výpočtu je zjavný hlavne v systémoch, ktoré majú veľký počet optimalizovaných premenných, malý počet obmedzení a naopak. V probléme LQ riadenia je celkový počet integrácií v jednej NLP iterácii 15 [3 rovnice v doprednej

integrácii (2 diferenciálne rovnice, 1 integrálna časť účelovej funkcie) a 4 krát 3 rovnice pri spätnej integrácii (2 adjugované rovnice, 1 integrálna časť Hamiltoniánu) – pre každé obmedzenie a účelovú funkciu]. Pomocou citlivostných rovníc je potrebné integrovať 30 diferenciálnych rovníc (počet stavov násobený počtom optimalizovaných premenných). Z toho vyplýva, že prístup pomocou adjugovaných rovníc je v tomto prípade rýchlejší a rozdiel v čase výpočtu sa s každou novou optimalizovanou veličinou iba zväčšuje. Toto všetko hovorí v prospech adjugovaných rovníc, ako môžeme vidieť aj v nasledujúcej kapitole s iným príkladom z oblasti procesného inžinierstva.

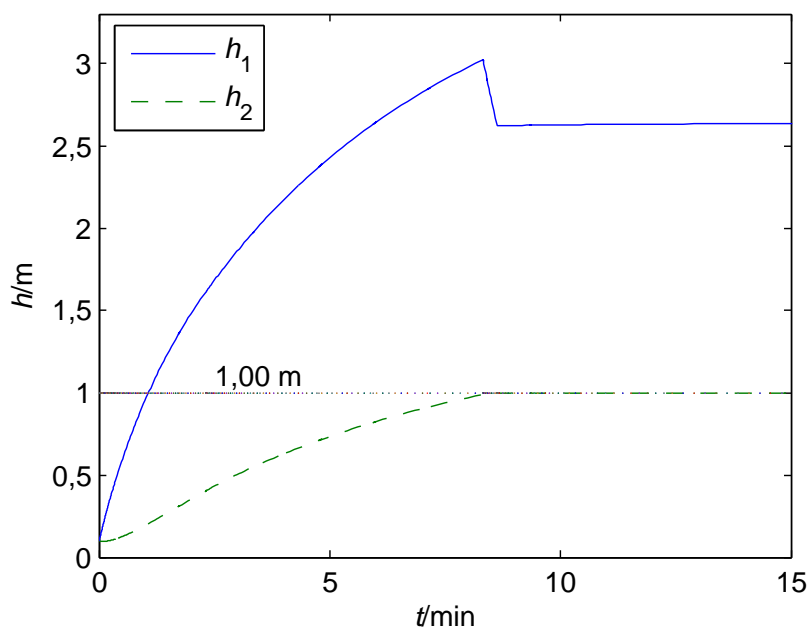
Podrobné odvodenia gradientov a popis prezentovaného systému dvoch zásobníkov kvapaliny sú ukázané v technickej správe [Hirmajer a Fikar \(2005\)](#).



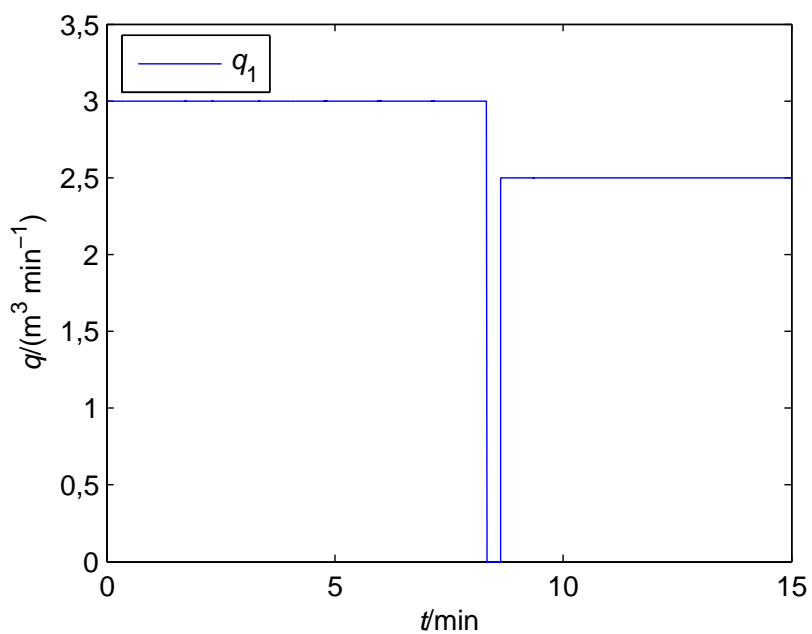
Obrázok 4.3. Priebeh dynamiky s optimálnym riadením pre problém minimalizácie času (4.4.1) pri použití viacerých riadiacích veličín



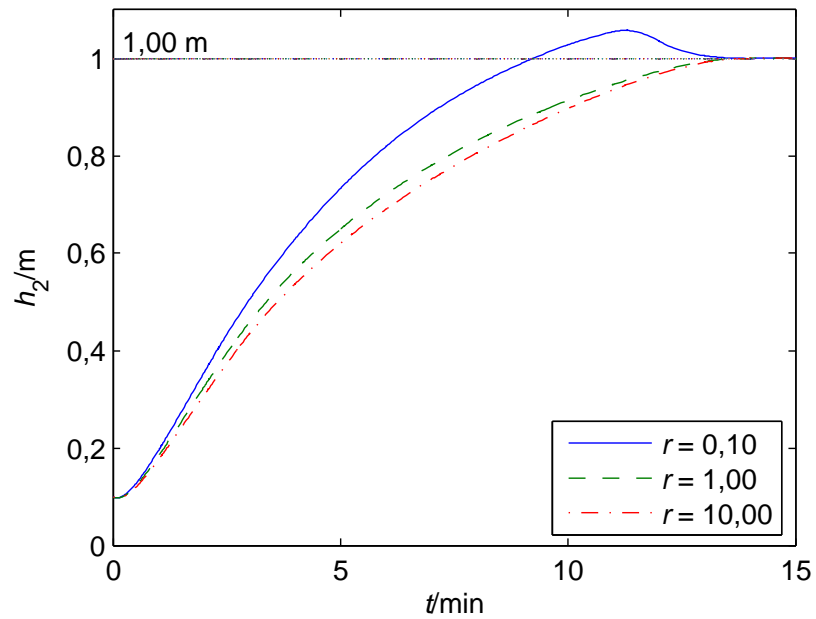
Obrázok 4.4. Optimálny profil riadenia pre problém minimalizácie času (4.4.1) pri použití viacerých riadiacích veličín



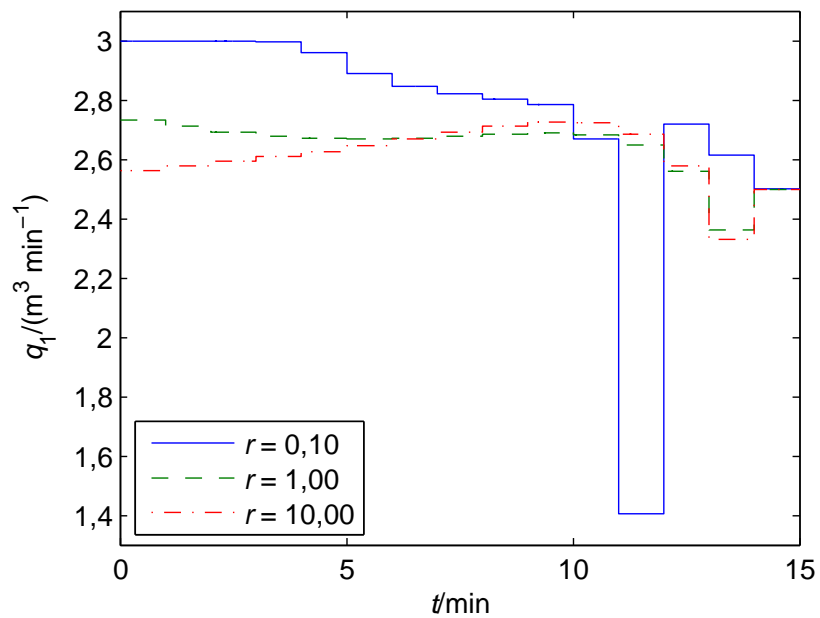
Obrázok 4.5. Priebek dynamiky s optimálnym riadením pre problém minimalizácie času (4.4.1) pri použití jednej riadiacej veličiny



Obrázok 4.6. Optimálny profil riadenia pre problém minimalizácie času (4.4.1) pri použití jednej riadiacej veličiny



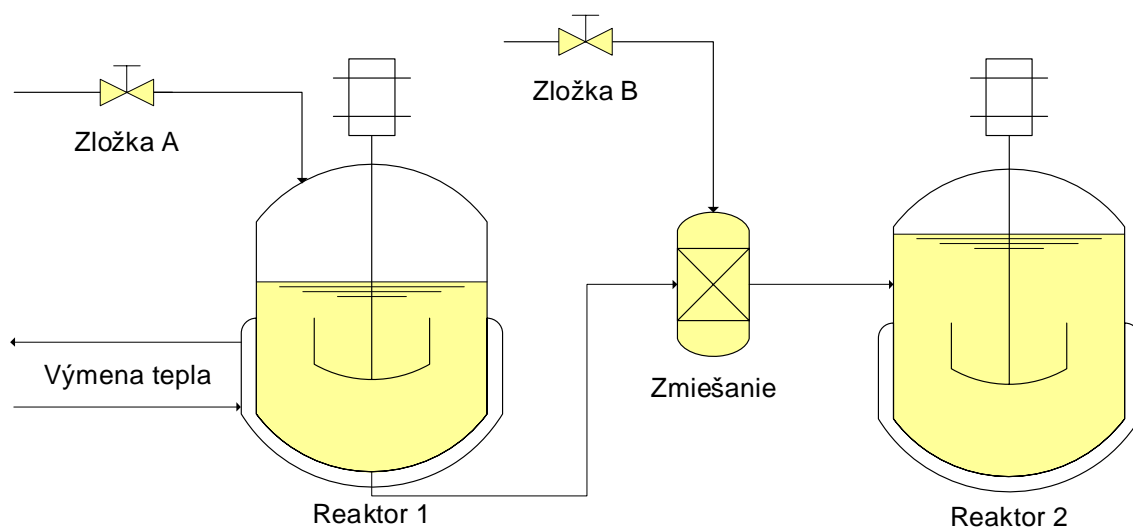
Obrázok 4.7. Výška hladiny v druhom zásobníku pre LQ problém (4.4.2) s rôznymi hodnotami váhového koeficienta r



Obrázok 4.8. Optimálny profil riadenia pre LQ problém (4.4.2) pri rôznych hodnotách váhového koeficienta r

Optimálne riadenie dvojstupňového chemického reaktora

5.1 Proces



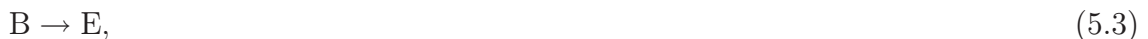
Obrázok 5.1. Dvojstupňový chemický reaktor

Predpokladajme nelineárny systém dvoch chemických reaktorov zobrazených na obrázku 5.1. Prvý chemický reaktor je na počiatku procesu naplnený objemom V_1 kvapalného roztoku zložky A o koncentrácii $c_A(t_0)$ a tuhým katalyzátorom. Ako riadiaca veličina pre prvú reakčnú fázu je použitá ohrevná cievka, ktorá zabezpečuje celkový teplotný priebeh.

Po skončení prvej chemickej reakcie



v čase t_s sa určité množstvo rozpusteného kvapalného roztoku zložky B o koncentrácii c_B^s pridá k produktu po prvej reakčnej fáze a táto zmes je vložená do druhého chemického reaktora, kde prebiehajú tieto 3 paralelné chemické reakcie



pri izotermických podmienkach (druhá reakčná fáza). Detailné informácie o procese sú ukázané v článku [Vassiliadis a kol. \(1994\)](#).

5.2 Model

Model chemického reaktora je postavený na predpoklade ideálneho miešania a ideálneho zmiešavania kvapalín. Na obrázku 5.1 je zobrazený dvojstupňový chemický reaktor, ktorý je opísaný nasledujúcou skupinou diferenciálnych rovníc (\mathbf{f}_1 a \mathbf{f}_2 pre fázu 1 a 2)

$$\mathbf{f}_1 = \frac{d\mathbf{x}}{dt} = \begin{cases} -2k_1(T)c_A^2 \\ k_1(T)c_A^2 - k_2(T)c_B \\ k_2(T)c_B \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{cases} \quad (5.5)$$

$$\mathbf{f}_2 = \frac{d\mathbf{x}}{dt} = \begin{cases} 0 \\ -0,02c_B - 0,05c_B - 0,00008c_B^2 \\ 0 \\ 0,02c_B \\ 0,05c_B \\ 0,00004c_B^2 \end{cases} \quad (5.6)$$

s kinetickými konštantami definovanými ako

$$k_1(T) = 0,0444e^{\frac{-2500}{T}}, \quad (5.7)$$

$$k_2(T) = 6889,0e^{\frac{-5000}{T}} \quad (5.8)$$

kde \mathbf{x} [mol m⁻³] je vektor stavových veličín, ktorý charakterizuje koncentráciu zložiek A–F, T [K] je teplotný profil prvej reakčnej fázy – riadiaca veličina \mathbf{u} a nakoniec rýchlostné konštanty $k_1(T)$ [m³ mol⁻¹ min⁻¹] a $k_2(T)$ [min⁻¹], ktoré charakterizujú rýchlosť chemických reakcií.

Proces zmiešavania v čase prepnutia t_s je opísaný nasledovnými chemickými rovnicami

$$V_2 c_A(t_s^+) = V_1 c_A(t_s^-), \quad (5.9)$$

$$V_2 c_B(t_s^+) = V_1 c_B(t_s^-) + S c_B^s, \quad (5.10)$$

$$V_2 c_C(t_s^+) = V_1 c_C(t_s^-) \quad (5.11)$$

a

$$V_2 = V_1 + S \quad (5.12)$$

kde V_1 [m³] je počiatkový objem zložky A vlozenej do prvého chemického reaktora, S [m³] je množstvo pridanej zložky B po prvej reakčnej fáze s koncentráciou c_B^s [mol m⁻³] a V_2 [m³] je celkový objem zmesi vlozenej do druhého chemického reaktora.

5.3 Definícia problému

Cieľom optimalizácie je dosiahnuť maximálne množstvo zložky D v koncovom čase t_P vzhľadom na obmedzenie koncovej koncentrácie, ktorá musí byť rovná alebo väčšia ako želaná hodnota c_D^w .

Optimalizovanými premennými sú teplotný profil prvej reakčnej fázy, celkové trvanie reakcií t_P a množstvo S zložky B pridanej v čase prepnutia fázy t_s .

Potom účelová funkcia nadobudne tvar

$$\max_{S, \Delta t_i, T[0, t_s]} J_0 = V_2 c_D(t_P) \quad (5.13)$$

vzhľadom na obmedzenia

$$J_1 = c_D(t_P) - c_D^w \geq 0, \quad (5.14)$$

$$J_2 = t_P - \sum_{i=1}^P \Delta t_i \geq 0 \quad (5.15)$$

kde c_D^w [mol m⁻³] je želaná minimálna hodnota koncentrácie zložky D v koncovom čase a t_P [min] je celkový čas oboch reakčných fáz.

Počiatkové hodnoty parametrov vstupujúcich do optimalizácie sú definované ako objem $V_1 = 0,1$ m³, počiatkové koncentrácie $c_A(t_0) = 2000$ mol m⁻³, $c_{B-F}(t_0) = 0$ mol m⁻³, koncen-

trácia pridanej zložky B $c_B^s = 600 \text{ mol m}^{-3}$, minimálna koncentrácia zložky D v koncovom čase $c_D^w = 150 \text{ mol m}^{-3}$ a maximálny čas oboch reakčných fáz $t_P = 180 \text{ min}$.

5.4 Odvodenie gradientov

Opäť, ako v predchádzajúcej kapitole aj teraz predpokladáme v jednotlivých úsekoch spojitý diferencovateľný systém (na hraniciach jednotlivých úsekoch a v čase prepnutia uvažujeme nespojitosť). Pri výpočte gradientov účelovej funkcie a obmedzení vychádzame z rovnice (3.65), v ktorej mnoho členov má aj v tomto prípade nulovú hodnotu. Rovnica výpočtu gradientov je potom zjednodušená na tvar

$$\frac{\partial J_j}{\partial t_P} = H_j(t_P^-) + \frac{\partial G_j}{\partial t_P}, \quad (5.16)$$

$$\frac{\partial J_j}{\partial t_i} = H_j(t_i^-) - H_j(t_i^+) + \frac{\partial G}{\partial t_i}, \quad i = \overline{1, P-1}, \quad (5.17)$$

$$\frac{\partial J_j}{\partial \mathbf{u}_i} = \mathbf{L}_{\mathbf{u},j}(t_{i-1}) - \mathbf{L}_{\mathbf{u},j}(t_i), \quad i = \overline{1, P}, \quad (5.18)$$

$$\frac{\partial J_j}{\partial \mathbf{p}^T} = \mathbf{L}_{\mathbf{p},j}^T(t_0) + \frac{\partial G_j}{\partial \mathbf{p}^T} + \sum_{i=1}^{P-1} \boldsymbol{\lambda}^T(t_i^+) \left(\frac{\partial \boldsymbol{\Delta}_i}{\partial \mathbf{p}^T} \right) \quad (5.19)$$

Na riešenie daného optimalizačného problému bol použitý modifikovaný algoritmus z kapitoly (3.8) s potrebnými gradientami optimalizovaných premenných (časové úseky t_i (5.16), (5.17), vektor riadenia \mathbf{u}_i (5.18) a parametre \mathbf{p} (5.19)).

5.5 Dosiahnuté výsledky

Pri danom optimalizačnom probléme sme uvažovali nad situáciou, kedy prvá reakčná fáza obsahovala $(P-1)$ časových intervalov a druhá reakčná fáza iba jeden interval. Počiatočné hodnoty optimalizovaných premenných boli zadefinované ako $\Delta t_i = 15 \text{ min}$, $u_i = 350 \text{ K}$, $S = 0, 1 \text{ m}^3$ s obmedzeniami na $u_i \in [298; 398]$ pre $t \in [t_0; t_s]$, $S \in [0; 0, 1]$ a $\Delta t_i \in [10; 100]$ pre $P = 6$, inak $\Delta t_i \in [1; 100]$. Tolerancia optimalizácie a integrácie bola nastavená na hodnotu 10^{-4} a 10^{-10} .

Optimálny profil koncentrácie zložiek A, B, C je zobrazený na obrázku 5.2 a zložiek D, E, F na obrázku 5.3. Príslušná trajektória riadenia pre $P = 6$ úsekov je ukázaná na obrázku 5.4.

Prvá a druhá podmienka zabezpečila, že koncová hodnota zložky D je 150 mol m^{-3} a optimálne trvanie procesu je 180 min.

Optimálna hodnota účelovej funkcie je 25, 54 mol, čo je v dobrej zhode s hodnotou, ktorá je uvedená v Vassiliadis a kol. (1994), kde koncová hodnota účelovej funkcie je 25, 55 mol

pre 6 intervalov. Priebeh účelovej funkcie vzhľadom na čas môžeme vidieť na obrázku 5.8.

Na obrázku 5.7 je ukázaný priebeh účelovej funkcie pre 6 diskretizovaných intervalov vzhľadom od počtu iterácií. Môžeme vidieť, že hodnota účelovej funkcie od 29 iterácie sa moc nemenní, čo je zapríčinené ustálovaním desatiného čísla pri presnosti optimalizácii, ktorá bola v tomto prípade nastavená na hodnotu 10^{-4} .

V tabuľke 5.1 sú ukázané výsledky optimalizácie pri zväčšujúcom sa počte časových intervalov. Obrázky 5.4, 5.5, a 5.6 ukazujú meniacu sa optimálnu trajektóriu riadenia so zväčšujúcim počtom týchto intervalov. Vidíme, že trajektória s narastajúcim počtom časových intervalov sa značne vyhladzuje. Hoci celkové zlepšenie hodnoty účelovej funkcie je iba malé, aj táto zmena môže mať pozitívny vplyv na finančný výsledok a to zvlášť keď želaný produkt je finančne náročný, alebo sa produkuje vo veľkom množstve.

Tabuľka 5.1 tiež ukazuje čas prepnutia t_s a množstvo pridaného objemu zložky B po prvej reakčnej fáze. Môžeme vidieť, že tieto dva parametre sa počas meniacich intervalov výrazne nemenia. Z toho dôvodu predpokladáme, že medzi obmedzujúcimi podmienkami typu nerovnosť, ktoré sú vo všetkých prípadoch aktívne a optimalizovanými parametrami môže byť určitá súvislosť. Konkrétne, že množstvo pridanej zložky B po prvej reakčnej fáze je prepojené s prvou podmienkou, ktorá hovorí o minimálnej koncentrácii zložky D v koncovom čase. Analogicky, čas prepnutia reakčnej fázy t_s je prepojený s druhou podmienkou, ktorá hovorí o koncovom čase procesu t_P .

Teraz si ukážme porovnanie prístupu adjugovaných rovníc oproti citlivostným rovniciam k riešeniu problému dynamickej optimalizácie. Chemický reaktor je opísaný 6 diferenciálnymi rovnicami a optimalizačný problém zahŕňa účelovú funkciu J_0 , jedno obmedzenie závislé od stavových veličín J_1 a druhé nezávislé od stavových veličín J_2 . Ak budeme uvažovať 6 intervalov, potom musí byť integrovaných 20 rovníc pre každú NLP iteráciu. Z toho 6 rovníc pri doprednej integrácii a 2 krát 7 rovníc pri spätnej integrácii (6 adjugovaných rovníc, 1 integrálna časť Hamiltoniánu) pre získanie gradientov vzhľadom na účelovú funkciu a obmedzenia. Prístup pomocou citlivostných rovníc si vyžaduje integrovať 72 diferenciálnych rovníc (počet stavov násobený počtom optimalizovaných premenných).

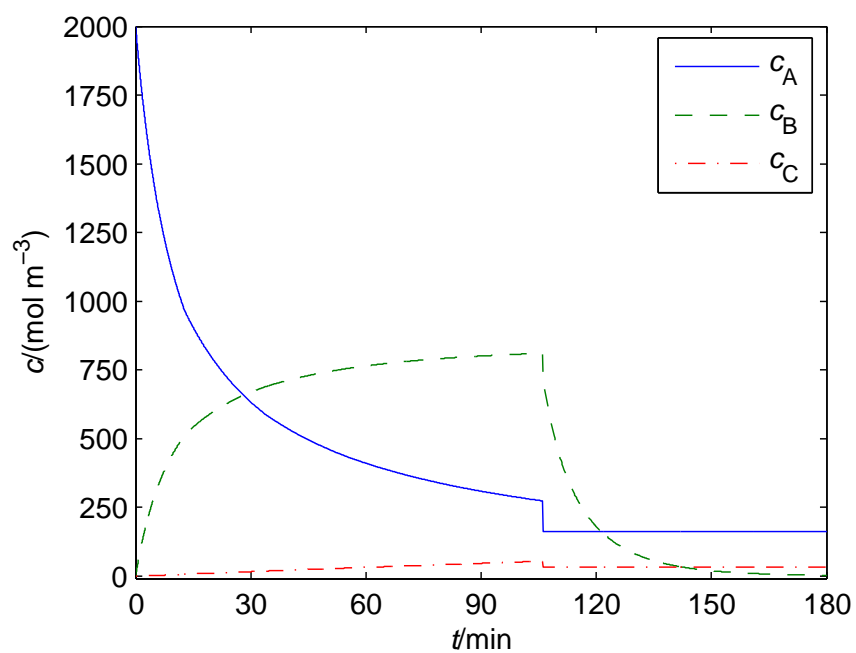
Na základe predchádzajúceho odstavca môžeme povedať, že ak počet časových intervalov narastá, potom rozdiel v počte integrácií tiež narastá v prospech adjugovaných rovníc. Z toho vyplýva, že celkový čas výpočtu pomocou adjugovaných rovníc bude značne menší oproti citlivostným rovniciam, pretože čas na integráciu diferenciálnych rovníc predstavuje viac ako 80% celkového času riešenia.

Opäť treba zdôrazniť, že CVP je priama metóda, ktorej riešenie je často lokálneho charakteru. Avšak v tomto prípade riadiace profily indikujú, že získané výsledky sú globálne.

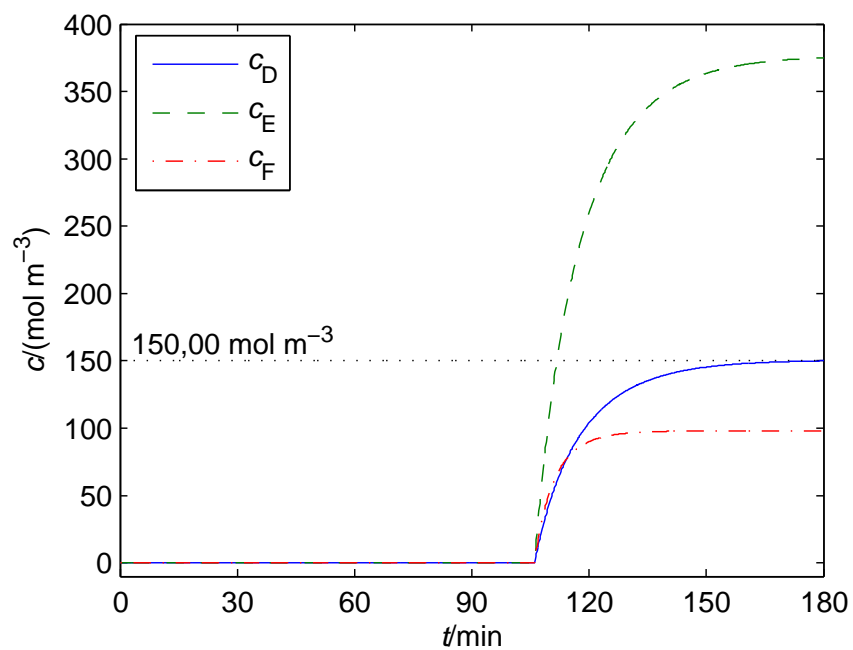
Podrobné odvodenia gradientov a popis prezentovaného systému dvojstupňového chemického reaktora sú ukázané v technickej správe [Hirmajer a Fikar \(2006\)](#).

| Počet intervalov, P | Počet iterácií, n_q | Čas prepnutia, t_s/min | Množstvo pridanej zložky B, S/m^3 | Účelová funkcia, J_0/mol |
|-----------------------|-----------------------|---------------------------------|--|-----------------------------------|
| 6 | 39 | 106,04 | 0,0702 | 25,5365 |
| 10 | 51 | 104,98 | 0,0705 | 25,5681 |
| 20 | 64 | 106,82 | 0,0705 | 25,5755 |

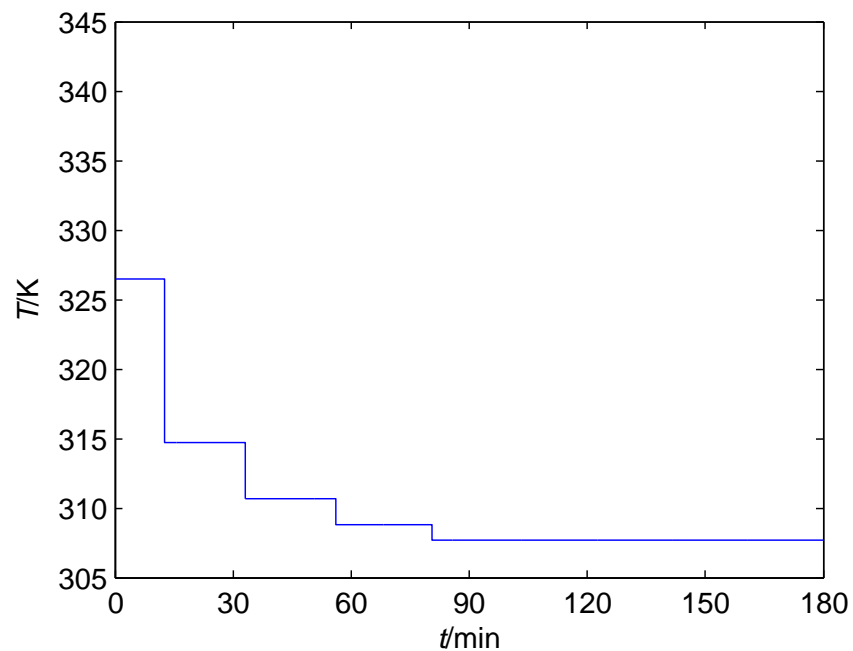
Tabuľka 5.1. Vplyv zväčšujúceho sa počtu časových intervalov P na hodnotu účelovej funkcie J_0



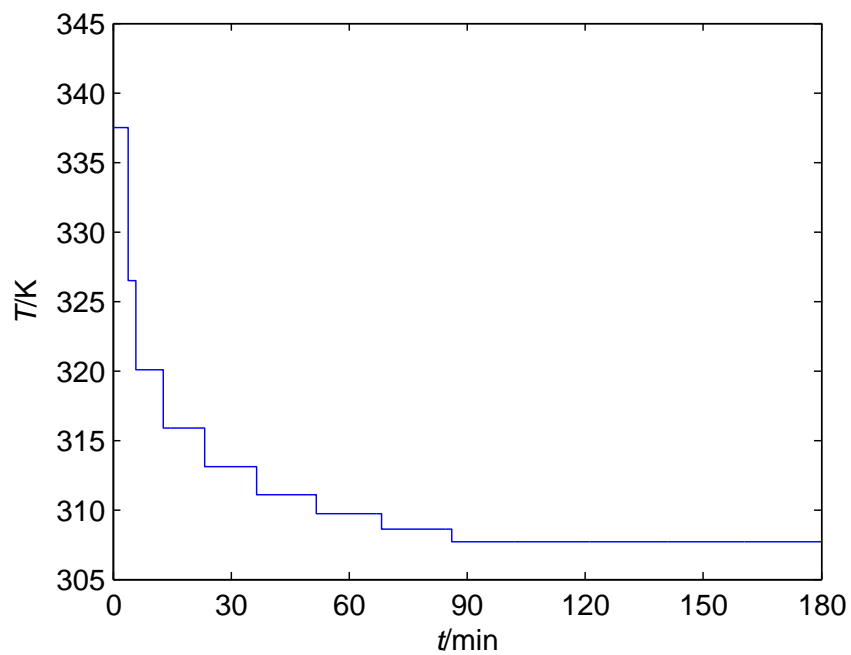
Obrázok 5.2. Optimálne stavové trajektórie zložiek A, B, C



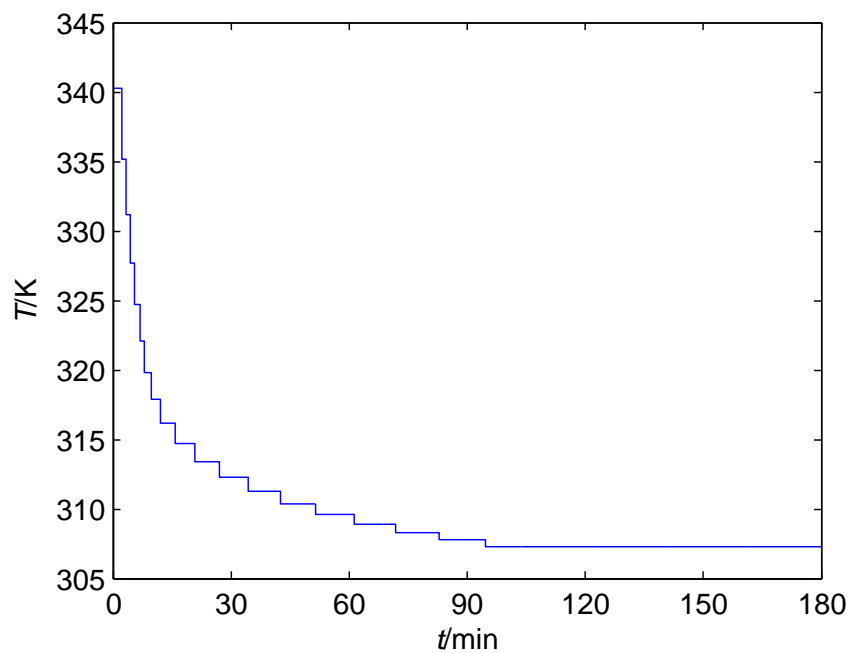
Obrázok 5.3. Optimálne stavové trajektórie zložiek D, E, F



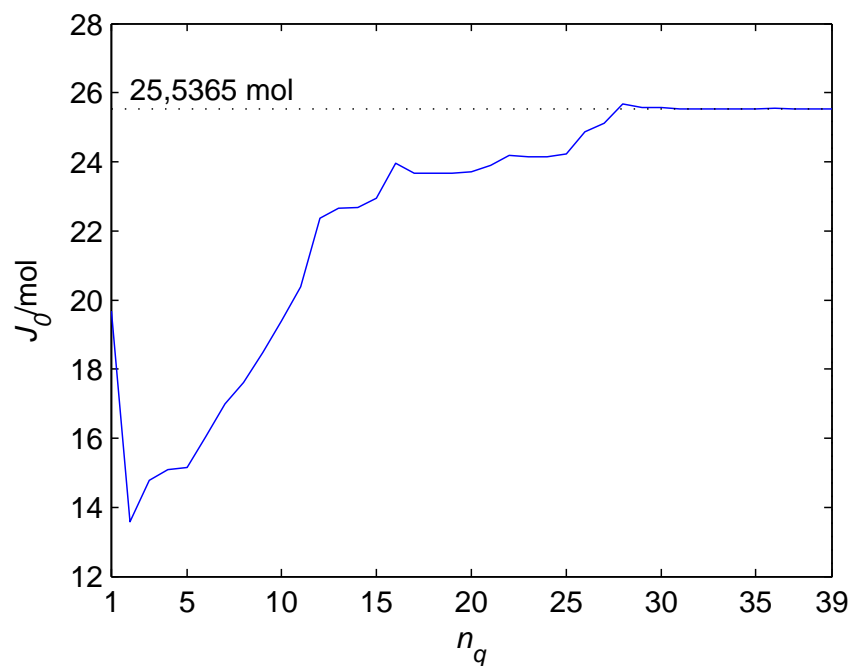
Obrázok 5.4. Optimálny profil riadenia pre 6 diskretizovaných intervalov



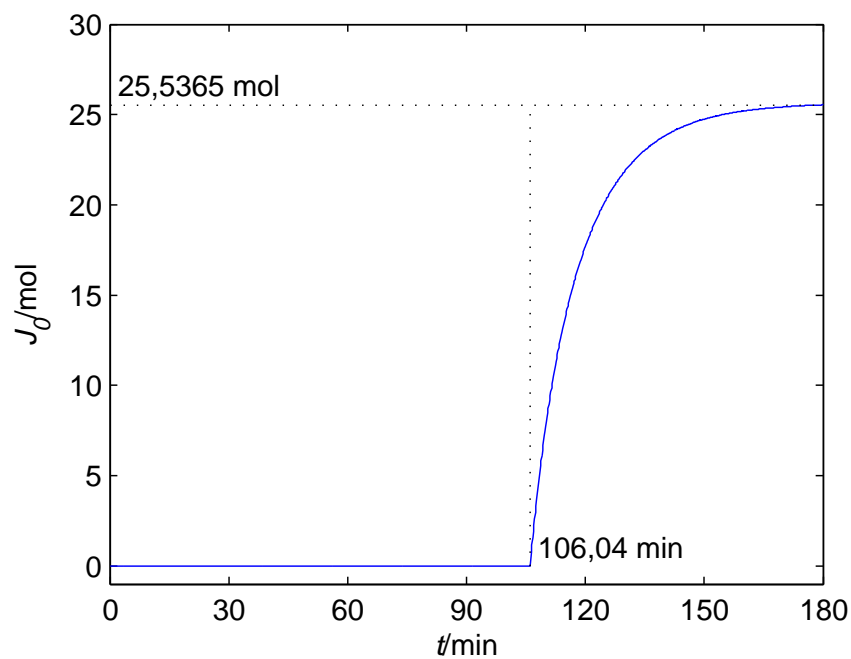
Obrázok 5.5. Optimálny profil riadenia pre 10 diskretizovaných intervalov



Obrázok 5.6. Optimálny profil riadenia pre 20 diskretizovaných intervalov



Obrázok 5.7. Priebeh J_0 pre 6 diskretizovaných intervalov v závislosti od počtu iterácií



Obrázok 5.8. Priebeh J_0 pre 6 diskretizovaných intervalov v závislosti od času so zaznamenaným časom prepnutia t_s

Záver a perspektívy

V dizertačnej práci sa zaoberáme dynamickou optimalizáciou vybraných zariadení z procesného priemyslu, v ktorých dochádza na základe určitých podmienok, ktoré nazývame podmienky prepnutia, k zmene operačných fáz. Cieľom bolo nájsť optimálne pracovné podmienky a riadiace profily, pri ktorých dochádza k prepnutiu zariadenia z jedného operačného módu do druhého tak, aby boli splnené zadané obmedzenia, či určité kritérium kvality.

Bol ukázaný numerický prístup k riešeniu problémov dynamickej optimalizácie, pri ktorom je možné problém dynamickej optimalizácie pretransformovať na problém statickej optimalizácie – nelineárne programovanie (NLP). Následne je daný problém riešený gradientovou metódou iteračným spôsobom, pri použití statického nelineárneho optimalizačného solveru typu SQP, v našom prípade solver NLPQL ([Schittkowski 1981](#)). Preto našou prvou úlohou bolo odvodiť podmienky optimality na základe variačného počtu a s uvažovaním podmienok prepnutia. Potrebné gradienty účelovej funkcie a obmedzení boli získané na základe odvodenej podmienky optimality a riešené priamou sekvenčnou metódou, pri ktorej je potrebné systém dopredne a spätne integrovať. V našom prípade bol použitý integrátor LSODAR ([Petzold a Hindmarsh 1997](#)). Program skončí svoj výpočet, ak dopredu nadefinovaná presnosť optimalizácie je splnená. Celý algoritmus je naprogramovaný v programovacom jazyku FORTRAN 77, ktorý je charakteristický rýchlosťou matematických operácií. Aj preto nájdenie optimálnej trajektórie trvalo maximálne iba pár minút pri presnosti, ktorá je zadaná v predchádzajúcich kapitolách.

Pri deterministickom výpočte gradientov potrebných v sekvenčnej metóde sú bežné tri prístupy. Jeden z nich je pomocou metódy konečných diferencií, ktorá je najrýchlejšie aplikovateľná, avšak poskytuje najmenšiu presnosť výpočtu gradientov. Pre túto vlastnosť sa často tento prístup tiež implementuje do optimalizačného programu spolu s inou metódou, na zabezpečenie a overenie správneho riešenia. Iný prístup, ktorý tvorí základ tejto práce, je prístup pomocou adjugovaných rovníc. Výhody a nevýhody daného prístupu sú

porovnané s posledným prístupom, ktorého základ tvoria citlivostné rovnice.

Na základe odsimulovaných príkladov môžeme povedať, že prístup pomocou adjugovaných rovníc má nevýhodu v podobe zložitejšej implementácii na výpočet gradientov a je nevhodný pre systémy s veľkým počtom obmedzujúcich podmienok, pretože každá obmedzujúca podmienka generuje systém rovníc, ktorý je potrebné integrovať. Avšak oproti citlivostným rovniciam, ktorých implementácia je ľahšia a rýchlejšia, prístup pomocou adjugovaných rovníc získava značnú časovú výhodu pri výpočte algoritmu, ak je nízky počet obmedzujúcich podmienok a veľký počet optimalizovaných premenných, pretože citlivostné rovnice pre každú optimalizovanú premennú generujú systém rovníc, ktorý je potrebné integrovať. Množstvo optimalizovaných premenných sa značne zväčšuje pri zväčšovaní počtu diskretizovaných intervalov, a tým aj zjemňovaním trajektórie riadenia, čo má väčšinou za následok zlepšovanie hodnoty účelovej funkcie, a tým aj želaný benefit.

Treba však zdôrazniť, že parametrizácia vektora riadenia je lokálna metóda, a preto pri výnimočných situáciách je potrebné vhodne meniť počiatočné podmienky, alebo počet parametrizovaných intervalov.

6.1 Prínosy dizertačnej práce

Najvýznamnejšie prínosy predloženej práce je možné zhrnúť do nasledujúcich bodoch

- prehľad a zhrnutie analytických a numerických metód dynamickej optimalizácie,
- detailné odvedenie gradientov pomocou adjugovaných rovníc na základe podmienok optimality získaných z variačného počtu a s uvažovaním podmienok prepnutia,
- detailný algoritmus riešenia problému nelineárneho programovania (NLP) pre hybridné systémy pomocou sekvenčnej metódy (CVP),
- implementácia algoritmu riešenia do programovacieho jazyka FORTRAN 77,
- aplikovanie metódy na vybrané zariadenia procesného priemyslu,
- vyhodnotenie získaných výsledkov a porovnanie výhod a nevýhod prístupu k riešeniu gradientov pomocou adjugovaných rovníc a bežne používaných citlivostných rovníc.

Záverom je možné konštatovať, že obsah predloženej dizertačnej práce, spracované postupy a výsledky v primeranej miere splnili vopred stanovené ciele a ukázali tak možnosť efektívnej aplikácie danej optimalizačnej metódy pre hybridné systémy, pretože pre veľa zariadení procesného priemyslu, tak ako bolo povedané v úvode, je charakteristická zmena operačných podmienok a následne aj zmena matematického opisu. S rozvojom výpočtovej techniky metóda nadobudla na popularite, pretože na základe počiatočných vstupov pri

predpoklade, že potrebný algoritmus a gradienty pre systém máme odvodené a naprogramované, vieme za krátky časový horizont získať optimálne hodnoty optimalizovaných premenných, a tým vieme odhadnúť správanie sa daného systému, či veľkosť produkcie.

Publikácie autora

Karentovaný časopis CC

1. **T. Hirmajer** a M. Fikar. Optimal control of a two-stage reactor system, *Chemical Papers*, 60(5):381–387, 2006.

Abstrahovaný časopis CA

1. **T. Hirmajer** a M. Fikar. Dynamic optimization of a hybrid coupled tanks system. *Journal of Electrical Engineering*, 57(3):167–172, 2006.

Nekarentovaný vedecký časopis

1. **T. Hirmajer** a M. Fikar. Optimálne riadenie sústavy chemických reaktorov. *AT&P Journal*, 13(11):69–72, 2006.
2. **T. Hirmajer** a M. Fikar. Optimálne riadenie systémov s hybridnou dynamikou. *AT&P Journal*, 12(12):81–84, 2005.

Článok na konferencii

- Zahraničná konferencia

1. **T. Hirmajer** a M. Fikar. Optimal control of a two-stage reactor system. V *Proceedings of the 7th International Scientific – Technical Conference Process Control'06*, University of Pardubice, Kouty nad Desnou, Czech Republic, CDROM AR021, 2006.
2. **T. Hirmajer** a M. Fikar. Optimal control of a hybrid coupled tanks system. V R. Trappl, redaktor, *Cybernetics and Systems 2006*, Austrian Society for Cybernetic Studies, Freyung 6/6, A-1010 Vienna, Austria, diel 1, strany 41-45, 2006.

3. Ľ. Čirka, M. Fikar, **T. Hirmajer** a M. Bakošová. On new trends in control engineering education at fcft stu. V *Proceedings of the 6th International Scientific – Technical Conference Process Control'04*, University of Pardubice, Kouty nad Desnou, Czech Republic, CDROM R015, 2004.
 4. **T. Hirmajer**, M. Fikar a K. Calík. Design of a library information system. V *Proceedings of the 6th International Scientific – Technical Conference Process Control'04*, University of Pardubice, Kouty nad Desnou, Czech Republic, CDROM AR196, 2004.
- Domáca konferencia
 1. Ľ. Čirka, D. Puna, **T. Hirmajer** a M. Fikar. Moodle: a software package for producing internet-based courses and web sites. V *Proceedings of the 15th International Conference Process Control'05*, Štrbské Pleso, High Tatras, Slovakia, CDROM 206f, 2005.
 2. **T. Hirmajer**, M. Fikar a K. Calík. Computations of sensitivity coefficients for dynamic systems. V *Proceedings of the 15th International Conference Process Control'05*, Štrbské Pleso, High Tatras, Slovakia, CDROM 209f, 2005.
 3. M. Fikar, Ľ. Čirka, **T. Hirmajer**, S. Katuščák a R. Tiňo. Information system for the project kniha.sk. V *Proceedings of the 15th International Conference Process Control'05*, Štrbské Pleso, High Tatras, Slovakia, CDROM 218f, 2005.
 4. K. Calík, J. Stopka, M. Fikar a **T. Hirmajer**. Modelling of heavy gas leakages to the air. V *31th International Conference of Slovak Society of Chemical Engineering'04*, Tatranské Matliare, Slovakia, diel 31, CD ROM 149, 2004.

Výskumná správa

1. **T. Hirmajer** a M. Fikar. *Optimal Control of a Hybrid Dynamical System: Two-stage Reactor System*. Department of Information Engineering and Process Control, FCFT SUT, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia, 2006.
2. **T. Hirmajer** a M. Fikar. *Optimal Control of a Hybrid Dynamical System: Two Coupled Tanks*. Department of Information Engineering and Process Control, FCFT SUT, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia, 2005.

Literatúra

- O. Abel a W. Marquardt. Scenario-integrated on-line optimisation of batch reactors. *Journal of Process Control*, 13:703–715, 2003.
- M. P. Avraam, N. Shah a C. C. Pantelides. Modelling and optimisation of general hybrid systems in the continuous time domain. *Computers and Chemical Engineering*, 22(1):S221–S228, 1998.
- N. Aziz a I. M. Mujtaba. Optimal operation policies in batch reactors. *Chemical Engineering Journal*, 85:313–325, 2002.
- E. Balsa-Canto, J. R. Banga, A. A. Alonso a V. S. Vassiliadis. Dynamic optimization of chemical and biochemical processes using restricted second-order information. *Computers and Chemical Engineering*, 25:539–546, 2001.
- P. I. Barton, J. R. Banga a S. Galán. Optimization of hybrid discrete/continuous dynamic systems. *Computers and Chemical Engineering*, 24(4):2171–2182, 2000.
- P. I. Barton a C. K. Lee. Design of process operations using hybrid dynamic optimization. *Computers and Chemical Engineering*, 28:955–969, 2004.
- R. Bellman. *Dynamic Programming*. Princeton University Press, Princeton, New Jersey, 1957.
- A. Bemporad a M. Morari. Control of systems integrating logic, dynamics, and constraints. *Automatica*, 35(3):407 – 427, 1999.
- L. T. Biegler, A. M. Cervantes a A. Wächter. Advances in simultaneous strategies for dynamic process optimization. *Chemical Engineering Science*, 57(4):575–593, 2002.
- H. G. Bock, M. Diehl, D. Leineweber a J. Schlöder. *Nonlinear Model Predictive Control*, díel 26, kapitola A direct multiple shooting method for real-time optimization of nonlinear dae processes, 245–267. Birkhauser, Basel, 2000.

- H. G. Bock a K. J. Platt. A multiple shooting algorithm for direct solution of optimal control problems. 242–247. Ifac, 9th IFAC World Congress, Budapest, 1984.
- D. Bonvin. Optimal operation of batch reactors - a personal view. *Journal of Process Control*, 8(5-6):355–368, 1998.
- P. Brunovský. *Matematická teória optimálneho riadenia*. SNTL - nakladatelství technické literatury, Praha, 1980.
- A. E. Bryson a Y. C. Ho. *Applied Optimal Control - Optimization, Estimation and Control*. Hemisphere Publishing corporation, Washington, 1975.
- M. Cannon. Efficient nonlinear model predictive control algorithms. *Annual Reviews in Control*, 28:229–237, 2004.
- M. Caracotsios a W. E. Stewart. Sensitivity analysis of initial value problems with mixed odes and algebraic equations. *Computers and Chemical Engineering*, 9:359–365, 1985.
- E. F. Carrasco a J. R. Banga. Dynamic optimization of batch reactors using adaptive stochastic algorithms. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 36:2252–2261, 1997.
- C. T. Chen a C. Hwang. Optimal control computation for differential-algebraic process systems with general constraints. *Chemical Engineering Communications*, 97:9–26, 1990.
- W. H. Chen, D. J. Ballance a P. J. Gawthrop. Optimal control of nonlinear systems: a predictive control approach. *Automatica*, 39:633–641, 2003.
- M. A. Z. Coelho, C. Russo a O. Q. F. Araújo. Optimization of a sequencing batch reactor for biological nitrogen removal. *Water Research*, 34(10):2809–2817, 2000.
- J. E. Cuthrell a L. T. Biegler. On the optimization of differential-algebraic process systems. *AIChE Journal*, 33(8):1257–1270, 1987.
- J. E. Cuthrell a L. T. Biegler. Simultaneous optimization and solution methods for batch reactor control profiles. *Computers and Chemical Engineering*, 13:49–62, 1989.
- U. M. Diwekar. *Batch distillation: simulation, optimal design and control*. Taylor and Francis, Washington, 1995.
- T. F. Edgar, T. A. Soderstrom a D. M. Himmelblau. A mixed integer optimization approach for simultaneous data reconciliation and identification of measurement bias. *Control Engineering Practice*, 9(8):869–876, 2001.

- D. Famularo, P. Pugliese a Y. D. Sergeyev. A global optimization technique for checking parametric robustness. *Automatica*, 35:1605–1611, 1999.
- W. F. Feehery a P. I. Barton. Dynamic optimization with state variable path constraints. *Computers and Chemical Engineering*, 22:1241–1256, 1998.
- W. F. Feehery. *Dynamic Optimization with Path Constraints*. Doktorská práca, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, MA, 1998.
- M. Fikar a M. A. Latifi. User's guide for FORTRAN dynamic optimisation code DYNO. Výskumná správa mf0201, LSGC CNRS, Nancy, France; SUT Bratislava, Slovak Republic, 2001.
- C. A. Floudas, I. G. Akrotirianakis, S. Garatzoulas, C. A. Meyer a J. Kallrath. Global optimization in the 21st century: Advances and challenges. *Computers and Chemical Engineering*, 29:1185–1202, 2005.
- S. Galán a P. I. Barton. Dynamic optimization of hybrid systems. *Computers and Chemical Engineering*, 22:183–190, 1998.
- C. J. Goh a K. L. Teo. Control parameterization: A unified approach to optimal control problems with general constraints. *Automatica*, 24(1):3–18, 1988.
- C. Guntern, A. H. Keller a K. Hungerbuhler. Economic optimization of an industrial semi-batch reactor applying dynamic programming. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 37(10):4017–4022, 1998.
- T. Hirmajer a M. Fikar. Optimal control of a hybrid dynamical system: Two coupled tanks. Výskumná správa, Department of Information Engineering and Process Control, FCFT SUT, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia, 2005.
- T. Hirmajer a M. Fikar. Optimal control of a hybrid dynamical system: Two-stage reactor system. Výskumná správa, FCFT SUT, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovak Republic, 2006.
- S. Isaacs. Automatic adjustment of cycle length and aeration time for improved nitrogen removal in an alternating activated sludge process. *Water Science and Technology*, 35(1):225–232, 1997.
- S. L. S. Jacoby, J. S. Kowalik a J. T. Pizzo. *Iterative methods for nonlinear optimization methods*. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1972.
- R. K. Jaspan a J. Coull. Trajectory optimization techniques in chemical reaction engineering 2. *AIChE Journal*, 18(4):867–869, 1972.

- J. L. Klepeis a C. A. Floudas. Deterministic global optimization and torsion angle dynamics for molecular structure prediction. *Computers and Chemical Engineering*, 24:1761–1766, 2000.
- M. V. Le Lann, M. Cabassud a G. Casamatta. Modeling, optimization and control of batch chemical reactors in fine chemical production. *Annual Reviews in Control*, 23:25–34, 1999.
- S. H. Lin a K. W. Cheng. A new sequencing batch reactor for treatment of municipal sewage wastewater for agricultural reuse. *Desalination*, 133(41-51), 2001.
- C. Loeblein, J. D. Perkins, B. Srinivasan a D. Bonvin. Performance analysis of on-line batch optimization systems. *Computers and Chemical Engineering*, 21:867–872, 1997.
- J. S. Logsdon a L. T. Biegler. Accurate solution of differential-algebraic optimization problem. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 28:1628–1639, 1989.
- P. Manon, C. V. Roubinet a G. Gilles. Optimal control of hybrid dynamical systems: application in process engineering. *Control Engineering Practice*, 10:133–149, 2002.
- J. Mikleš a V. Hutla. *Teória automatického riadenia*. Alfa, Bratislava, 1986.
- B. S. N. Murty, K. Gangiah a A. Husain. Performance of various methods in computing optimal control policies. *Chemical Engineering Journal*, 19(3):201–208, 1980.
- L. Özkan a M. V. Kothare. Stability analysis of a multi-model predictive control algorithm with application to control of chemical reactors. *Journal of Process Control*, 16:81–90, 2006.
- L. R. Petzold a A. C. Hindmarsh. LSODAR. Výskumná správa, Computing and mathematics research division, lawrence livermore national laboratory livermore, ca 94550, 1997.
- L. S. Pontryagin, V. G. Boltyanskii, R. V. Gamkrelidze a E. F. Mishchenko. *The Mathematical Theory of Optimal Processes*. John Wiley and Sons, New York, 1962.
- W. H. Ray a J. Szekely. *Process optimization*. John Wiley and Sons, New York, 1973.
- W. H. Ray. *Advanced Process Control*. Mc Graw Hill, New York, 1981.
- G. V. Reklaitis, A. Ravindran a K. M. Ragsdell. *Engineering optimization: methods and applications*. John Wiley and Sons, New York, 1983.
- O. Rosen a R. Luus. Evaluation of gradients for piecewise constant optimal control. *Computers and Chemical Engineering*, 15(4):273–281, 1991.

- A. I. Ruban. Sensitivity coefficients for discontinuous dynamic systems. *Computer and Systems Sciences International*, 36:536–542, 1997.
- K. Schittkowski. NLPQL: A new fortran implementation of a sequential quadratic programming algorithm for parallel computing. Výskumná správa, Department of Mathematics, University of Bayreuth, D - 95440 Bayreuth, Germany, 1981.
- M. Schlegel a W. Marquardt. Direct sequential dynamic optimization with automatic switching structure detection. DYCOPS 7, Cambridge, USA, 2004.
- M. Schlegel a W. Marquardt. Detection and exploitation of the control switching structure in the solution of dynamic optimization problems. *Journal of Process Control*, 16:275–290, 2006.
- M. Schlegel, K. Stockmann, T. Binder a W. Marquardt. Dynamic optimization using adaptive control vector parameterization. *Computers and Chemical Engineering*, 29:1731–1751, 2005.
- A. B. Singer. *Global Dynamic Optimization*. Doktorská práca, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, MA, 2004.
- B. Srinivasan, S. Palanki a D. Bonvin. Dynamic optimization of batch processes I. characterization of the nominal solution. *Computers and Chemical Engineering*, 27:1–26, 2003.
- S. Støren a T. Hertzberg. The sequential linear quadratic programming algorithm for solving dynamic optimization problems - a review. *Computers and Chemical Engineering*, 19:495–500, 1995.
- J. Štecha. *Optimální rozhodování a řízení*. Katedra řídicí techniky, Elektrotechnická Fakulta, Praha, 1999.
- V. S. Vassiliadis, R. W. H. Sargent a C. C. Pantelides. Solution of a class of multistage dynamic optimization problems. 1. problems without path constraints, 2. problems with path constraints. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 33(9):2111–2122, 2123–2133, 1994.
- M. Čižniar. *Dynamic optimisation of processes*. Diplomová práca, Faculty of chemical and food technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovak Republic, 2005.
- Y. J. Vemuri. *Real-time optimization of semi-batch reactors*. Doktorská práca, Department of Chemical Engineering, Florida, 2004.

-
- A. Vítěček a M. Vítěčková. *Optimální systémy řízení*. VŠB Technická Univerzita Ostrava, Ostrava, 1 vydanie, 2002.
- H. Zhao, S. H. Isaacs, H. Sørenberg a M. Kümmel. A novel control strategy for improved nitrogen removal in an alternating activated sludge process - Part II. Control development. *Water Research*, 28(3):535–542, 1994.
- H. Zhao, S. H. Isaacs, H. Sørenberg a M. Kümmel. An analysis of nitrogen removal and control strategies in an alternating activated sludge process. *Water Research*, 29(2):535–544, 1995.