

UNIVERSITA' DEGLI STUDI DI NAPOLI "FEDERICO II"

FACOLTA' DI INGEGNERIA

**DOTTORATO DI RICERCA IN INGEGNERIA CHIMICA,
DEI MATERIALI E DELLA PRODUZIONE**



**CONTROLLO ATTIVO DI REATTORI CHIMICI: OTTIMAZIONE,
SICUREZZA E CONTROLLO DI BIFORCAZIONI**

TESI DI DOTTORATO

Ing. PIETRO ALTIMARI

Comitato di tesi:

Prof. SILVESTRO CRESCITELLI

Prof. PIER LUCA MAFFETTONE

Prof. MARIO DI BERNARDO

CONTENUTO

Introduzione.....	1
1. Controllo di biforcazioni: metodologie ed applicazioni.....	7
1.1. Biforcazioni e strutturale stabilità di sistemi dinamici.....	8
1.2. Biforcazioni locali di regimi stazionari.....	9
1.3. Controllo di biforcazioni locali attraverso retroazione statica.....	10
1.4. Controllo di biforcazioni locali attraverso retroazione dinamica.....	12
1.5. Controllo di biforcazioni locali di regimi periodici.....	17
1.6. Introduzione di punti di biforcazione (anticontrol).....	17
1.7 Conclusioni.....	19
2. Bifurcation Tailoring.....	18
2.1. Bifurcation tailoring di soluzioni di regime.....	22
2.2. Implementazione della tecnica del bifurcation tailoring.....	24
2.3. Limiti del bifurcation tailoring: introduzione di un sistema di controllo a retroazione.	26
2.4. Stabilizzazione di soluzioni di regime desiderate attraverso controllo adattativo: Minimal Control Synthesis.....	28
2.5. Applicazione di tecniche di controllo di biforcazioni al controllo di fenomeni di runaway.....	30
2.6. Controllo di un processo di parziale ossidazione attraverso bifurcation tailoring.....	32
2.7 Conclusioni.....	41
3. Ottimizzazione del comportamento biforcazionale.....	43
3.1. Determinazione di vincoli di processo: limiti di applicazione della metodologia di bifurcation tailoring.....	44
3.2. Metodologia di ottimizzazione del comportamento biforcazionale.....	46
3.3. Definizione della funzione dei costi di processo.....	51
3.4. Controllo di un processo di parziale ossidazione attraverso ottimizzazione del comportamento biforcazionale.....	53
3.5. Conclusioni.....	65

4. Analisi della robustezza di sistemi di controllo in retroazione.	67
4.1 Robustezza di sistemi di controllo di ottimizzazione del comportamento biforcazionale.	68
4.2 Robustezza di un sistema di controllo di ottimizzazione del comportamento biforcazionale di un reattore di parziale ossidazione.	71
4.3 Tuning di controllori PID.	73
4.4 Dimensionamento di un controllore proporzionale di un reattore di parziale ossidazione.	73
4.5 Conclusioni.	77
5. Controllo di transizioni di regime.	79
5.1 Formulazione del problema di scheduling.	82
5.2. Formulazione dell' algoritmo di scheduling ottimo.	90
5.3. Scheduling dinamico di un CSTR diabatico.	94
5.4. Controllo di transizioni di regime attraverso scheduling statico.	100
5.5. Scheduling statico di un CSTR diabatico.	103
5.6. Conclusioni.	106
6. Controllo della distanza da punti di biforcazione.	107
6.1. Determinazione della distanza da luoghi di punti di biforcazione attraverso ottimizzazione.	108
6.2. Controllo della distanza da punti di biforcazione di Hopf nella gestione di un processo reattivo esotermico irreversibile.	112
6.3. Conclusioni.	115
7. Riduzione della dimensione di modelli matematici ai principi primi.	117
7.1 Metodo delle autofunzioni empiriche: proper orthogonal decomposition.	120
7.2 Riduzione della dimensione del modello matematico di un reattore a letto catalitico attraverso proper orthogonal decomposition.	123
7.3. Conclusioni.	129
Conclusioni.	130
Bibliografia.	132

Introduzione

I reattori sono spesso le unità principali di un processo chimico. I problemi riguardanti i reattori chimici vanno da quelli legati alla progettazione a quelli inerenti la sicurezza ed il controllo. In entrambe i casi risulta essenziale una accurata analisi della dinamica del sistema, una previsione dei cambiamenti della natura e della stabilità delle soluzioni di regime del reattore al variare dei parametri operativi e di progetto.

Variazioni dei parametri possono condurre il sistema a biforcazioni, cioè a cambiamenti qualitativi (nella natura) e/o quantitativi (nel numero) delle soluzioni di regime. Modificazioni del regime possono essere accompagnate da variazioni discontinue (biforcazioni discontinue o catastrofiche) o variazioni continue (biforcazioni continue) di una norma dello stato del sistema. L'insorgere biforcazioni per regimi stazionari può ad esempio manifestarsi attraverso:

- Il passaggio ad una soluzione di regime stazionario caratterizzata da differente conversione.
- La nascita di regimi dinamici e, quindi, di persistenti oscillazioni (periodiche, quasiperiodiche o anche caotiche) delle variabili di stato (e.g. temperatura e composizione).

Esempi di indesiderati fenomeni legati all'insorgere di biforcazioni possono essere:

- Lo spegnimento del reattore.
- La disattivazione del catalizzatore in reattori a letto fisso.
- Lo sviluppo di reazioni secondarie indesiderate (e.g. fenomeni di runaway termico).

Una dettagliata conoscenza della dinamica del sistema è, pertanto, indispensabile per affrontare i problemi di sicurezza delle condizioni di funzionamento e valutare i margini di operabilità nello spazio dei parametri. Assume, in questa direzione, un ruolo di primo piano lo sviluppo di modelli matematici in grado di descrivere in modo sufficientemente fedele la dinamica del reattore senza ricorrere a modelli eccessivamente complicati. La simulazione numerica del modello è stata frequentemente lo strumento utilizzato nell'analisi della dinamica di modelli di sistemi dell'ingegneria chimica. Questo strumento di indagine presenta, tuttavia, notevoli limiti.

La simulazione può richiedere tempi troppo lunghi per il raggiungimento delle condizioni di regime ed è particolarmente inadeguata nella determinazione di regioni dello spazio dei parametri caratterizzate da molteplicità di regime. Infatti, intendendo individuare, per simulazione, regimi che coesistono ad uno stesso set di valori dei parametri, l'unica possibilità che si ha, è effettuare diverse simulazioni variando, per tentativo, le condizioni iniziali. Questa tecnica risulta onerosa ed

inaccurata per sistemi caratterizzati da elevate dimensioni (i.e. elevato numero delle variabili di stato).

Un più accurato studio della dinamica del modello può essere condotto attraverso l'applicazione sistematica delle tecniche di continuazione parametrica [Seydel, 1994]. Attualmente esistono codici di calcolo (e.g. CONT, BIFOR2, AUTO 97) che consentono di tracciare, all'interno dello spazio dei parametri, rami delle soluzioni di regime stazionario e periodico, studiandone la stabilità, e caratterizzando i punti di biforcazione locale. Questo tipo di indagine permette di determinare le condizioni di biforcazione locali (in particolare quelle catastrofiche), le regioni dello spazio dei parametri caratterizzate da molteplicità delle soluzioni di regime, e le regioni dove è possibile la presenza di regimi quasiperiodici e caotici.

Una volta individuate le condizioni di funzionamento ottimali del reattore e le caratteristiche dinamiche della regione dei parametri operativi vicina a tali condizioni, si pone il problema di sviluppare una efficiente strategia di controllo. Il dimensionamento di un sistema di controllo robusto (anche rispetto ad errori nel modello) è essenziale per preservare il regime desiderato nonostante l'azione di disturbi e delle possibili variazioni nelle condizioni operative del reattore.

L'analisi lineare è stata tradizionalmente lo strumento di sviluppo della teoria del controllo. La linearizzazione locale dei complessi modelli matematici che descrivono la dinamica di sistemi dell'ingegneria chimica è stata la metodologia prevalente nella progettazione di sistemi di controllo dei processi. Tuttavia, la presenza di altri regimi, anche vicini a quello intorno al quale il sistema è stato linearizzato, non può essere analizzata con modelli linearizzati.

Nonostante il notevole interesse pratico e teorico, risulta, ad oggi, particolarmente modesto il contributo della dinamica non lineare al controllo dei processi. I notevoli successi teorici raggiunti, nel corso dell'ultima metà del secolo, da fisici e matematici, nella caratterizzazione della dinamica di sistemi non lineari, sono stati pressoché ignorati da ricercatori operanti nel settore dell'ingegneria di processo e non hanno trovato spazio nello sviluppo di più efficienti metodologie di progettazione dei sistemi di controllo [di Bernardo, 2003]. A dispetto della scarsa interazione tra i ricercatori delle due aree scientifiche, si è assistito nel corso degli ultimi due decenni ad una approfondita analisi di tecniche e strategie di controllo maggiormente adeguate alla gestione dei complessi sistemi dell'industria di processo. Controllo geometrico [Isidori, 1995; Nijmeijer and Van der Schaft, 1990], controllo non lineare robusto [Freeman and Kokotovic, 1996], ed altre tecniche sono state proposte per superare i limiti dei tradizionali schemi proposti dalla teoria del controllo lineare.

Nel corso degli ultimi anni lo scenario descritto è venuto, tuttavia, rapidamente modificandosi ed oggi si assiste ad un crescente scambio di informazione tra ricercatori delle due aree scientifiche. Intanto, la crescente complessità dei sistemi di rilevanza nelle applicazioni, ha messo in luce i limiti

della tradizionale teoria del controllo, motivando la ricerca di nuove e più efficienti metodologie di analisi.

Il trasferimento di competenze tra le due aree ha trovato, nondimeno, una spinta nella forte esigenza di crescita delle prestazioni dei sistemi di processo. In diversi sistemi dell'ingegneria, e non fanno eccezione a questa regola sistemi dell'ingegneria chimica, si trova che le condizioni di massimo della funzione obiettivo sono frequentemente raggiunte in prossimità dei margini di stabilità, in prossimità di punti di biforcazione. Ad esempio, è stato mostrato che un reattore di cracking a letto fluido può presentare un massimo della resa in benzine in corrispondenza di una biforcazione di Hopf subcritica (biforcazione catastrofica che porta alla nascita di regimi periodici instabili) [Alhumaizi and Elnashaie, 1996].

L'esigenza di crescita delle prestazioni, nella salvaguardia della sicurezza delle persone e dell'integrità delle unità operative, e la crescente complessità dei sistemi con i quali gli ingegneri di controllo sono chiamati a confrontarsi, hanno motivato un crescente scambio di informazione tra studiosi di dinamica non lineare ed ingegneri di controllo, alimentando un nuovo e stimolante filone di ricerca: il controllo delle biforcazioni [Chen, Moiola and Wang, 2000].

L'idea centrale della teoria di controllo delle biforcazioni è quella di intervenire, attraverso gli strumenti forniti dall'analisi non lineare, in modo attivo sulla dinamica del sistema, modificandone la struttura biforcazionale. Tipici obiettivi di controllo delle biforcazioni sono: una modificazione del set di parametri per il quale il sistema presenta una biforcazione [Lee and Abed, 1991], la stabilizzazione dei regimi che emergono da una biforcazione [Abed and Fu, 1986], l'introduzione di una biforcazione ad un opportuno set di valori dei parametri (i.e. anti-control) [Chen et al., 2001], il controllo dell'ampiezza di oscillazioni risultanti da biforcazioni dinamiche [Basso and Genesis, 2003], la modificazione della struttura diagramma delle soluzioni di regime (i.e. bifurcation tailoring) [Lowenberg, 1998a].

Appare chiaro come gli obiettivi di controllo delle biforcazioni descritti rivelino una forte distinzione rispetto ai tradizionali obiettivi di controllo. Tradizionalmente, sistemi di controllo di processo sono stati sviluppati al fine di migliorare le caratteristiche delle traiettorie seguite dal sistema nello spazio delle variabili di stato, nel corso dei transitori che precedono il raggiungimento del regime desiderato (ad esempio ridurre l'ampiezza di eventuali over-shoots, eliminare indesiderate oscillazioni) [Kailath, 1980; Stephanopoulos, 1984; Ogunnaike and Ray, 1994]. La teoria di controllo delle biforcazioni coglie un aspetto completamente nuovo del problema di controllo di un sistema di processo, ponendosi come obiettivo, non un cambiamento del comportamento transitorio, bensì una modificazione del comportamento asintotico del sistema al variare dei parametri operativi e di progetto.

L'obiettivo della presente tesi è, pertanto, utilizzare la teoria delle biforcazioni per la progettazione di sistemi di controllo di processi di interesse dell'ingegneria chimica.

Nel capitolo 1, è presentata una descrizione della letteratura scientifica inerente alla teoria del controllo delle biforcazioni. Preliminarmente, è descritto il legame tra problemi di sicurezza ricorrenti nella gestione di sistemi di processo ed il raggiungimento di condizioni operative corrispondenti di punti biforcazione catastrofica. Sono successivamente illustrate le principali metodologie di controllo delle biforcazioni sviluppate nel corso degli ultimi due decenni. Infine, sono descritti alcuni esempi di applicazione delle metodologie di controllo delle biforcazioni illustrate nella gestione di sistemi di processo di interesse dell'ingegneria chimica.

Nel capitolo 2, è descritta in dettaglio una metodologia di controllo delle biforcazioni sviluppata nella seconda metà dello scorso decennio, definita bifurcation tailoring [Lowenberg, 1998], finalizzata ad una modificazione della struttura del diagramma delle soluzioni di regime di un sistema dinamico non lineare. In particolare, è presentata un'estensione della metodologia di bifurcation tailoring adeguata ai fini del controllo di fenomeni di runaway termico nella gestione di processi reattivi esotermici. Tale metodologia è successivamente applicata ai fini del controllo di fenomeni di runaway termico nella gestione di un processo reattivo di parziale ossidazione condotto all'interno di un reattore continuo agitato raffreddato per mezzo di un fluido refrigerante circolante in una camicia esterna.

Nel capitolo 3, è presentata una innovativa metodologia di controllo delle biforcazioni finalizzata alla ottimizzazione del comportamento biforcazionale di un sistema dinamico non lineare. Questa nuova metodologia è stata sviluppata in quanto la metodologia di bifurcation tailoring risulta inadeguata a problemi di controllo con vincoli sulle variabili di stato e/o sulle variabili manipolabili (e.g. temperatura di soglia di letti catalitici). Pertanto, nel capitolo 3, è preliminarmente presentata una attenta analisi dei limiti di applicazione della metodologia di bifurcation tailoring. A partire da questi limiti è introdotta una metodologia di ottimizzazione del diagramma delle soluzioni di regime di un sistema dinamico non lineare. Infine, sono presentate alcune applicazioni della nuova metodologia al controllo di fenomeni di runaway termico nella gestione di un processo reattivo di parziale ossidazione condotto in reattore continuo agitato raffreddato per mezzo di un fluido refrigerante circolante in una camicia esterna.

Nel capitolo 4, è illustrata una metodologia di analisi della robustezza di sistemi di controllo in retroazione. L'idea centrale sviluppata è condurre un'analisi della robustezza di sistemi di controllo in retroazione attraverso analisi biforcazionale del sistema dinamico controllato in anello chiuso al variare dei parametri del sistema di controllo. L'approccio seguito non è nuovo nella letteratura dell'ingegneria chimica [Chang et al., 1982] ed è qui adeguato ai fini dello sviluppo di metodologie

di analisi della robustezza di sistemi di controllo in retroazione di tipo adattativo risultanti dall'applicazione della metodologia di ottimizzazione del comportamento biforcazionale, e di sistemi di controllo in retroazione PID (i.e. proporzionale, integrale, derivativo).

Nel capitolo 5, è esaminato il problema di controllo di transizioni di regime (i.e. modificazione controllata del regime) in reattori chimici. Frequentemente le condizioni operative di funzionamento di reattori chimici sono, infatti, modificate per realizzare, ad esempio, condizioni di esercizio che permettano di ottenere prodotti con differenti caratteristiche o per adeguare le condizioni di esercizio ad una modificazione di una o più variabili di ingresso (e.g. variazioni delle caratteristiche della carica di alimentazione). Strategie di controllo di transizioni di regime devono contestualmente garantire la minimizzazione dei costi di processo (e.g. ridurre la formazione di prodotti indesiderati nel corso della transizione) ed il rispetto di vincoli di determinazione delle variabili di stato e/o delle variabili manipolabili (e.g. prevenire il raggiungimento di temperature di soglia di letti catalitici). Ai fini della gestione di transizioni di regime in reattori chimici, è, pertanto, proposta una strategia di scheduling dinamico ottimo. La strategia di scheduling dinamico ottimo proposta è sviluppata attraverso implementazione di tecniche di continuazione parametrica [Seydel, 1994] e conduce alla determinazione di una famiglia di sistemi di controllo locali e ad una sequenza di istanti di transizione dei sistemi di controllo locali che minimizzano l'integrale nel tempo di una funzione dei costi di processo e garantiscono il rispetto di vincoli di determinazione delle variabili di stato e/o delle variabili manipolabili. Al fine di ridurre l'onere computazionale inerente alla gestione di transizioni di regime, è successivamente presentata una innovativa strategia di scheduling statico. La strategia di scheduling statico proposta prevede la determinazione di una famiglia di sistemi di controllo locali attraverso minimizzazione stazionaria di una funzione dei costi di processo. Sono illustrati, infine, i risultati dell'implementazione delle strategie di scheduling proposte ai fini della gestione di transizioni di regime in un reattore continuo perfettamente miscelato dove sia condotta una reazione esotermica irreversibile.

Nel capitolo 6, è discussa una implementazione in linea della metodologia di determinazione della distanza da punti di biforcazione catastrofica illustrata in [Dobson, 1993; Monnigman and Marquardt, 2003]. Seguendo le linee sviluppate in [Dobson, 1993], il problema di determinazione di punti di biforcazione catastrofica maggiormente prossimi alle condizioni operative di funzionamento di un sistema di processo è formulato come problema di minimizzazione della distanza da varietà differenziabili dello spazio dei parametri. E', in questa direzione, proposta una nuova strategia di controllo in anello aperto che attraverso valutazione in linea della distanza da punti di biforcazione catastrofica garantisce desiderati margini di stabilità delle condizioni operative di funzionamento. La strategia illustrata è implementata ai fini del controllo in linea della distanza

da punti di biforcazione di Hopf in un reattore continuo perfettamente miscelato dove sia condotta una reazione esotermica irreversibile.

Nel capitolo 7, è esaminato il problema di riduzione delle dimensioni di modelli matematici a parametri distribuiti. Ai fini dell'implementazione in linea di strategie di controllo basate su modello è, infatti, essenziale avvalersi dell'impiego di modelli di dimensione ridotta che descrivano fedelmente la dinamica del sistema di processo nell'intorno delle soluzioni di regime desiderate. Modelli matematici ai principi primi di sistemi di processo dell'ingegneria chimica sono frequentemente descritti da sistemi di equazioni differenziali alle derivate parziali non lineari. Tradizionali schemi di riduzione (e.g. differenze finite, residui pesati) conducono alla determinazione di sistemi di equazioni differenziali ordinarie di dimensione particolarmente elevata, inadeguati ai fini del raggiungimento di obiettivi di controllo. Sono, pertanto, illustrati i risultati di un preliminare studio della metodologia di riduzione, definita proper orthogonal decomposition [Holmes, 1996] (POD), ai fini dello sviluppo di modelli matematici di dimensione ridotta che descrivano fedelmente la dinamica di reattori chimici nell'intorno di soluzioni di regime desiderate. In particolare, è, preliminarmente, riportata una descrizione della metodologia della proper orthogonal decomposition e sono, successivamente, mostrati i risultati di applicazione ai fini della riduzione del modello matematico di un combustore a letto catalitico.

Capitolo 1

Controllo delle biforcazioni: metodologie ed applicazioni

L'obiettivo centrale delle metodologie di controllo delle biforcazioni è la determinazione di una legge di controllo dei parametri operativi di un sistema di processo, finalizzata alla modificazione della struttura biforcazionale del sistema.

Il sistema di controllo può essere realizzato attraverso retroazione di una o più variabili di stato (variabili di controllo), in modo statico o dinamico, a seconda che i segnali di misura delle variabili di controllo siano direttamente impiegati come ingresso del dispositivo finale di controllo, o preliminarmente sottoposti all'azione di un filtro dinamico. In alternativa o insieme ad un sistema di controllo in anello chiuso può prevedersi un sistema di controllo di processo in anello aperto [Stephanopoulos, 1984; Ogunnaike and Ray, 1994].

In questo capitolo, è riportata una descrizione della letteratura scientifica inerente alla teoria del controllo delle biforcazioni. Sono, pertanto, illustrate le principali metodologie di controllo delle biforcazioni sviluppate nel corso degli ultimi due decenni e mostrati risultati di applicazione di metodologie di controllo delle biforcazioni nella gestione di sistemi di processo dell'ingegneria chimica.

In particolare, nel paragrafo 1.1, è descritto il legame tra problemi di sicurezza ricorrenti nella gestione di sistemi di processo ed il raggiungimento di punti di biforcazione catastrofica. E', in questa direzione, illustrato il concetto di stabilità strutturale di un sistema dinamico. Al fine di rendere agevole la comprensione delle metodologie di controllo delle biforcazioni illustrate, è riportata, nel paragrafo 1.2, una descrizione delle biforcazioni locali generiche di sistemi dinamici tempo continuo. Nel paragrafo 1.3, è riportata una descrizione della letteratura scientifica inerente a metodologie di controllo delle biforcazioni locali di sistemi dinamici tempo continuo basate su retroazione statica non lineare dello stato. Nel paragrafo 1.4, è inizialmente introdotto il concetto di controllo di un sistema dinamico non lineare attraverso retroazione dinamica dello stato. E', successivamente, riportata una descrizione della letteratura scientifica inerente a metodologie di controllo delle biforcazioni basate su retroazione dinamica non lineare dello stato. Sono, infine, mostrati i risultati di implementazione di una metodologia di controllo delle biforcazioni basata su retroazione dinamica, ai fini del controllo di una biforcazione di Hopf catastrofica nella gestione di un reattore industriale di sintesi di ammoniaca. Nel paragrafo 1.5 sono descritti i maggiori risultati raggiunti nel corso degli ultimi due decenni in merito allo sviluppo di metodologie di controllo delle biforcazioni di regimi periodici. Nel paragrafo 1.6 è riportata una descrizione della letteratura

scientifico inerente lo sviluppo di metodologie di anti-control di biforcazioni. L'implementazione di metodologie di anti-control di biforcazioni è finalizzata alla modificazione della struttura biforcazionale di un sistema dinamico non lineare attraverso l'introduzione di nuovi punti di biforcazioni. Sono, in questo paragrafo, i maggiori risultati teorici raggiunti in merito allo sviluppo di metodologie di anti-control di biforcazioni. Sono, infine, descritti i risultati di applicazione di una metodologia di anti-control di biforcazioni ai fini del controllo di un reattore industriale di polimerizzazione.

1.1 Biforcazioni e stabilità strutturale di sistemi dinamici

Nella teoria del controllo assume notevole importanza il concetto di stabilità strutturale di un sistema dinamico. La domanda che ci si pone è se il comportamento dinamico del sistema risulta qualitativamente inalterato in seguito a piccole variazioni dei parametri operativi (per esempio temperatura della corrente di alimentazione, portata di un fluido refrigerante). Frequentemente nell'esercizio di un sistema di processo si registrano variazioni delle condizioni operative di funzionamento anche perché intenzionalmente introdotte dall'utente. Ad esempio una diminuzione della portata di alimentazione ad un impianto di produzione potrebbe essere richiesta in seguito ad una riduzione della domanda di mercato del prodotto finale. Variazioni delle condizioni operative di funzionamento possono altresì aversi per effetto di cause che sfuggono al controllo dell'utente. Ad esempio una riduzione del coefficiente di scambio termico ed un conseguente incremento della temperatura in uscita ad uno scambiatore di calore potrebbero aversi per effetto dello sporco delle pareti di dell'apparecchiatura. In ogni caso risulta essenziale, al fine di garantire continuità delle prestazioni del sistema di processo nella salvaguardia della sicurezza degli addetti ai lavori e dell'integrità delle unità operative, assicurarsi che il comportamento dinamico del sistema risulti inalterato entro ragionevoli limiti di variazione dei parametri operativi.

Si prenda in esame un sistema dinamico non lineare descritto dal set di equazioni differenziali ordinarie:

$$\dot{x} = F(x, \mu) \tag{1.1.1}$$

con $x \in \mathbb{R}^n$ vettore di stato del sistema, $\mu \in \mathbb{R}^k$ vettore dei parametri operativi, $F: \Omega \subseteq \mathbb{R}^n \longrightarrow \Omega \subseteq \mathbb{R}^n$ campo vettoriale del sistema. Il sistema (1.1.1) si definisce strutturalmente stabile, al set dei valori dei parametri operativi μ , se esiste un $\varepsilon > 0$ tale per cui, per

tutti i campi vettoriali $\tilde{F} : \Omega \subseteq \mathbb{R}^n \longrightarrow \Omega \subseteq \mathbb{R}^n$ con $\|F(x, \mu) - \tilde{F}(x, \mu)\| < \varepsilon$, il sistema (1.1.1) è topologicamente equivalente al sistema:

$$\dot{x} = \tilde{F}(x, \mu) \quad (1.1.2)$$

ovvero esiste una trasformazione $h : \Omega \subseteq \mathbb{R}^n \longrightarrow \Omega \subseteq \mathbb{R}^n$ continua insieme con la sua inversa che trasforma le traiettorie del sistema (1.1.1) in quelle del sistema (1.1.2) preservando la direzione secondo cui le traiettorie sono seguite nel tempo.

Quando il sistema dinamico (1.1.1) non risulta strutturalmente stabile si dice che esso è in condizioni di biforcazione. In seguito ad una biforcazione possono trovarsi significativi cambiamenti nel comportamento dinamico del sistema: variazioni nel numero, nella stabilità e nella natura delle soluzioni di regime [Guckenheimer and Holmes, 1986; Wiggins, 1988; Kuznetsov, 1998].

Al fine di rendere maggiormente agevole la comprensione delle principali tecniche di controllo delle biforcazioni, la cui descrizione sarà affrontata nei successivi paragrafi, introduciamo ora alcune definizioni in merito alle biforcazioni locali di regimi stazionari.

1.2 Biforcazioni locali di regimi stazionari

Si prenda in esame il sistema dinamico (1.1.1) assumendo che il vettore dei parametri operativi μ si riduca ad un unico elemento ($k=1$). Si assumano valide le seguenti ipotesi:

- l'origine dello spazio di stato sia un punto stazionario del sistema, ovvero per $\mu = 0$ risulti $F(0, \mu) = 0$ (si osservi che questa ipotesi è assolutamente generale potendo sempre utilizzare opportune traslazioni delle coordinate).
- la matrice Jacobiana del campo vettoriale F valutata in tale punto stazionario,

$$J_0 = \left. \frac{\partial F}{\partial x} \right|_{x=0, \mu=0}, \text{ presenti uno o più autovalori } \lambda_i^c \text{ con parte reale nulla.}$$

Nelle precedenti ipotesi il sistema (1.1) si definisce in condizioni critiche (o non iperboliche) e gli autovalori della matrice J_0 con parte reale nulla sono definiti autovalori critici. Le condizioni critiche sono condizioni necessarie perché un sistema si trovi in condizioni di instabilità strutturale. Se ciò avviene il punto $(x = 0, \mu = 0)$ è definito un punto di biforcazione locale del sistema dinamico (1.1.1). Si può verificare che le biforcazioni locali sono sempre accompagnate da

cambiamenti di stabilità e nuovi rami di soluzioni di regime stazionario possono nascere o scomparire oppure possono nascere soluzioni di regime periodico.

Quando la matrice Jacobiana J_0 presenta un autovalore critico reale, il punto $(x = 0, \mu = 0)$ è definito un punto di biforcazione reale. In corrispondenza di una biforcazione reale si trova la nascita o scomparsa di rami di soluzioni di regime stazionario e non sono in alcun modo coinvolte soluzioni di regime periodico. Una classificazione delle biforcazioni reali è fornita in funzione della geometria del diagramma delle soluzioni in prossimità del punto di biforcazione. Biforcazioni sella-nodo, transcritiche, a forcone, sono alcuni esempi di biforcazioni statiche frequentemente incontrate.

La nascita di rami di soluzioni di regime periodico può trovarsi in corrispondenza di un biforcazione di Hopf. La biforcazione di Hopf è una biforcazione complessa di regimi stazionari che si trova quando una (ed una sola) coppia di autovalori complessi coniugati della matrice

Jacobiana $J_0 = \frac{\partial F}{\partial x} \Big|_{x=0, \mu=0}$ attraversa l'asse immaginario, mentre tutti gli altri autovalori presentano

parte reale negativa. Quando, al variare del parametro di biforcazione μ , la parte reale dei due autovalori critici del sistema cambia segno il punto stazionario $x=0$ diventa instabile, e si trova la nascita di soluzioni di regime periodico. E' possibile mostrare che l'asintotica stabilità delle soluzioni di regime periodico che nascono attraverso una biforcazione di Hopf è governata, in prossimità del punto di biforcazione, da un coefficiente caratteristico che può esprimersi attraverso una funzione polinomiale:

$$\beta(\mu) = \beta_2\mu^2 + \beta_4\mu^4 + \dots \quad (1.2.1)$$

E' noto che una soluzione di regime periodico individuata a distanza μ dal punto di biforcazione di Hopf risulta stabile se il coefficiente $\beta(\mu) < 0$, instabile se $\beta(\mu) > 0$ [Guckenheimer and Holmes, 1986; Kuznetsov, 1998]. In particolare, si trova che la stabilità delle soluzioni di regime periodico, ed il tipo di biforcazione di Hopf, è determinata dal segno del coefficiente β_2 (primo coefficiente di Lyapunov) dell'espressione polinomiale (1.2.1). Un efficiente algoritmo di calcolo del coefficiente β_2 è illustrato in [Abed and Fu, 1986; Howard, 1977].

1.3 Controllo di biforcazioni locali attraverso retroazione statica

La teoria del controllo delle biforcazioni trova origine nel lavoro di Abed e Fu della seconda metà degli anni ottanta, in merito alla stabilizzazione delle soluzioni di regime periodico che nascono da

una biforcazione di Hopf subcritica [Abed and Fu, 1986]. Abed e Fu sviluppano, attraverso l'applicazione della teoria delle biforcazioni, una metodologia di sintesi di una legge di controllo non lineare in grado di trasformare una biforcazione di Hopf subcritica, catastrofica, in una biforcazione di Hopf supercritica, non catastrofica. Nel paragrafo 2 è stato ricordato che la stabilità dei regimi periodici che nascono attraverso una biforcazione di Hopf, è governata, in prossimità del punto di biforcazione, dal segno del primo coefficiente di Lyapunov. Attraverso l'applicazione dell'algoritmo di valutazione del primo coefficiente di Lyapunov riportato in [Howard, 1979] Abed e Fu individuano condizioni necessarie e sufficienti ai fini della stabilizzazione di una biforcazione di Hopf subcritica. Contestualmente, essi sviluppano un efficace algoritmo di sintesi di una legge di controllo statico in anello chiuso, in grado di modificare il segno del primo coefficiente di Lyapunov, e di stabilizzare, quindi, una biforcazione di Hopf subcritica. In [Abed and Fu, 1986] è esaminato sia il caso in cui i due autovalori critici del sistema risultano controllabili sia quello in cui essi sono incontrollabili. Si ricorda, dalla teoria del controllo lineare, che un autovalore di un sistema dinamico lineare si definisce controllabile quando sia possibile modificarne la localizzazione nel piano complesso attraverso una retroazione statica dello stato del sistema [Kailath, 1980]. In particolare, nel caso in cui gli autovalori critici del sistema risultino controllabili, è mostrato che ai fini della stabilizzazione di una biforcazione di Hopf, è sufficiente una legge di controllo in anello chiuso non lineare che includa solo termini del terzo ordine nelle variabili di stato. Una legge di controllo non lineare che includa termini del secondo ordine nelle variabili di stato è mostrato essere necessaria, ai fini della stabilizzazione di una biforcazione di Hopf, nel caso di incontrollabilità degli autovalori critici.

In [Abed and Fu, 1987] è esaminato il problema di stabilizzazione di un punto critico di biforcazione stazionaria transcritica. E' possibile mostrare che in corrispondenza di una biforcazione transcritica il punto critico di biforcazione risulta instabile. In [Abed and Fu, 1987], è mostrato che, nel caso in cui l'autovalore critico associato ad una biforcazione transcritica sia controllabile, è sempre possibile, in linea teorica, individuare una legge di controllo in anello chiuso non lineare che stabilizza il punto critico di biforcazione. La legge di controllo sviluppata include solo termini del secondo e del terzo ordine nelle variabili di stato del sistema, e conduce ad una conversione della biforcazione transcritica in una biforcazione a forcone supercritica. Inoltre, è mostrato che il problema di stabilizzazione di un punto di biforcazione transcritica non può essere risolto attraverso una legge di controllo in anello chiuso nel caso in cui l'autovalore critico associato alla biforcazione risulti incontrollabile.

1.4 Controllo di biforcazioni locali attraverso retroazione dinamica

Le metodologie di controllo di biforcazioni locali sviluppate in [Abed and Fu, 1986; Abed and Fu, 1987] consentono di modificare attraverso l'applicazione di una legge di controllo non lineare in anello chiuso il comportamento asintotico di un sistema dinamico in prossimità di un punto di biforcazione. E' tuttavia possibile che un sistema di controllo in anello chiuso determini, lontano dal punto di biforcazione in esame, effetti indesiderati sulla struttura e le caratteristiche di stabilità del diagramma delle soluzioni di regime del sistema. Ad esempio, un sistema di controllo che pure risulti efficace nella stabilizzazione di una biforcazione di Hopf subcritica, potrebbe indurre, allo stesso tempo, una riduzione del bacino di attrazione della soluzione di regime desiderata, e/o una riduzione dei margini di stabilità delle condizioni di esercizio rispetto ad ulteriori punti di biforcazione catastrofica.

Il problema di controllo di biforcazioni locali attraverso un sistema di controllo in anello chiuso, che non modifichi la struttura e le caratteristiche di stabilità del diagramma delle soluzioni di regime lontano dal punto di biforcazione, può essere affrontato attraverso l'impiego di filtri di wash-out [Lee and Abed, 1991; Wang and Abed, 1994, 1995]. Un filtro di wash-out è un sistema dinamico lineare con funzione di trasferimento:

$$G(s) = \frac{y(s)}{x(s)} = \frac{s}{s + a} \quad (1.4.1)$$

dove a è l'inverso della costante di tempo del filtro. Se si pone:

$$z(s) = \frac{1}{s + a} x(s) \quad (1.4.2)$$

la dinamica di un filtro di wash-out può essere descritta per mezzo della seguente equazione differenziale lineare:

$$\frac{dz}{dt} = x - az \quad (1.4.3)$$

e dell'equazione di output:

$$y = x - az \quad (1.4.4)$$

Filtri di wash-out sono stati tradizionalmente utilizzati nella progettazione dei sistemi di controllo di processo perché sono in grado di assicurare robustezza del regime di funzionamento anche quando vi sia incertezza nelle previsioni del modello matematico del sistema impiegato nell'implementazione on-line della legge di controllo. Per chiarire meglio questo concetto si prenda in esame il sistema dinamico:

$$\dot{x} = F(x, u) \quad (1.4.5)$$

con $x \in \mathbb{R}^n$ vettore di stato del sistema, $u \in \mathbb{R}^k$ variabile manipolabile, $F : \Omega \in \mathbb{R}^n \longrightarrow \Omega \in \mathbb{R}^n$ campo vettoriale del sistema. Sia x_e è un punto stazionario ad $u = 0$ in corrispondenza del quale si intende esercire il sistema. Nelle ipotesi descritte, una legge di controllo in anello chiuso del sistema (1.4.5) è usualmente del tipo:

$$u = -k(x - x_e) \quad (1.4.6)$$

Da (1.4.6) risulta che, nel sistema controllato, la variabile manipolata u si annulla quando $x = x_e$. In questo modo, x_e risulta un punto stazionario del sistema (1.4.5) anche dopo l'applicazione della legge di controllo (1.4.6). L'implementazione della legge di controllo (1.4.6) richiede che, attraverso un'analisi del campo F in (1.4.5), si effettui una determinazione on-line del punto stazionario x_e in funzione di μ . Quando vi sono incertezze circa le previsioni del campo F in (1.4.5), si può disporre in fase di controllo on-line solo di una stima del punto stazionario x_e , diciamo $x'_e \neq x_e$. In questo caso la legge di controllo assume la forma:

$$u = -k(x - x'_e) \quad (1.4.7)$$

L'azione del dispositivo di controllo in (1.4.7) non si annulla in corrispondenza del punto x_e . Pertanto, il sistema di controllo induce una modificazione del regime di funzionamento del sistema. Robustezza delle condizioni di esercizio del sistema può essere raggiunta implementando, in luogo della (1.4.6), la seguente legge di controllo:

$$u = -ky \quad (1.4.8)$$

dove y è il vettore di uscita di un filtro di wash-out con ingresso pari allo stato del sistema (1.4.5) x . Da (1.4.4) e (1.4.3) risulta che y può essere espresso nella forma:

$$y = (x - x_e) - a(z - z_e) \quad (1.4.9)$$

dove si è tenuto conto che in condizioni di regime stazionario $z = z_e = \frac{x_e}{a}$. L'espressione (1.4.9) assicura l'annullarsi del vettore di uscita y in corrispondenza dei punti stazionari del sistema (1.4.5). Si può, in questo modo, essere certi che la legge di controllo (1.4.8) non modifichi le condizioni di esercizio del sistema, più precisamente, non alteri la struttura del diagramma delle soluzioni di regime del sistema.

Filtri di wash-out sono stati ampiamente utilizzati nello sviluppo di metodologie di controllo delle biforcazioni. Nello studio di un sistema di convezione termica, Wang ed Abed (1995) determinano, attraverso l'impiego di filtri di wash-out, un sistema di controllo a retroazione che consente di modificare la posizione, nello spazio dei parametri, di una coppia di biforcazioni di Hopf, e nello stesso tempo di rendere le due biforcazioni non catastrofiche. Nella legge di controllo sviluppata in [Wang ed Abed, 1995], un termine di controllo lineare è utilizzato per ritardare il raggiungimento dei punti di biforcazione di Hopf, mentre un termine di controllo non lineare ne garantisce la stabilizzazione.

Di seguito illustriamo i risultati dell'applicazione di una legge di controllo dinamico in anello chiuso per la stabilizzazione di una biforcazione di Hopf subcritica in un reattore industriale di sintesi di ammoniaca [Recke et al., 2000].

In figura 1.4.1a è mostrato il diagramma delle soluzioni di regime del reattore non controllato al variare della portata di alimentazione. Lungo il ramo di alta conversione si trova una biforcazione di Hopf subcritica H_{IU} .

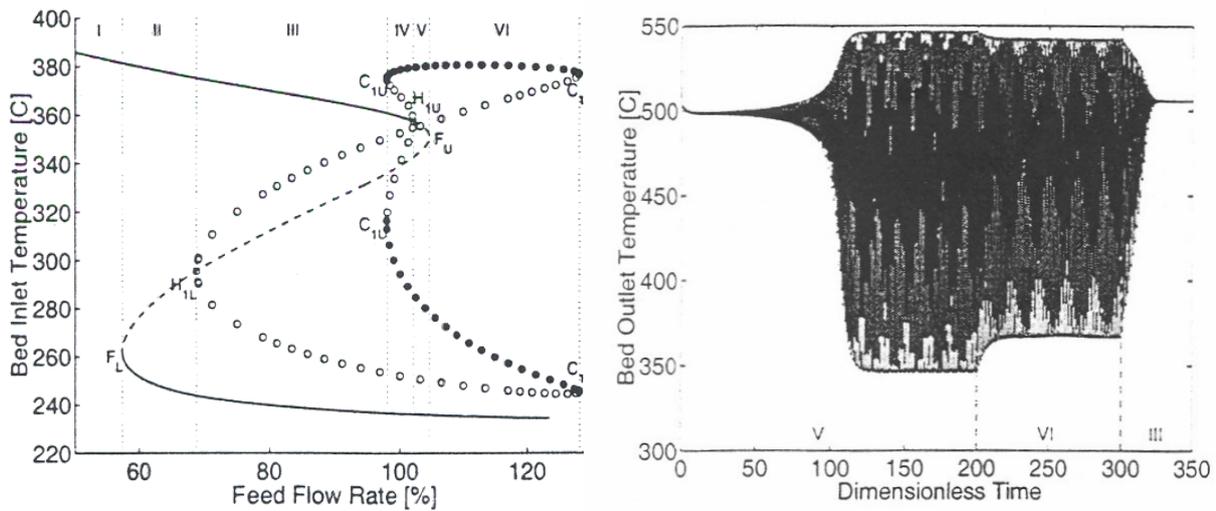


fig. 1.4.1 (a) diagramma delle soluzioni di regime del reattore, al variare della portata di alimentazione; (b) andamento nel tempo della temperatura del letto, al variare della portata di alimentazione [Recke et al., 2000].

In figura 1.4.1b sono mostrati i risultati di una simulazione numerica del reattore condotta all'aumentare della portata di alimentazione, partendo da un regime stazionario stabile di alta conversione. In seguito al raggiungimento del punto di biforcazione di Hopf H_{1U} si osserva la nascita di ampie oscillazioni della temperatura. Diversi studi hanno mostrato che la nascita di oscillazioni della temperatura conseguenti al raggiungimento del punto di biforcazione H_{1U} è stata causa di un incidente registrato agli inizi degli anni novanta in un impianto di produzione di ammoniaca [Morud and Skogestad, 1998; Mancusi et al., 2000]. L'incidente in esame è documentato in [Naess et al., 1993], e portò alla completa disattivazione del catalizzatore del reattore di sintesi.

In [Recke et al., 2000], una legge di controllo non lineare in anello chiuso, basata sull'impiego di filtri di wash-out, è implementata per stabilizzare la biforcazione di Hopf subcritica H_{1U} . In figura 1.4.2 è mostrato uno schema del circuito di controllo in anello chiuso del reattore di sintesi di ammoniaca. Nella schematizzazione del reattore sono riportati lo scambiatore di preriscaldamento della corrente di alimentazione ed uno strato di catalizzatore. Come variabile manipolata è impiegata la temperatura di alimentazione, mentre la temperatura di ingresso al letto catalitico è utilizzata come variabile di controllo. Il sistema di controllo è descritto da un dispositivo di misura della temperatura di ingresso al letto catalitico, da un filtro di wash-out, e da un dispositivo finale che provvede ad implementare la legge di controllo non lineare.

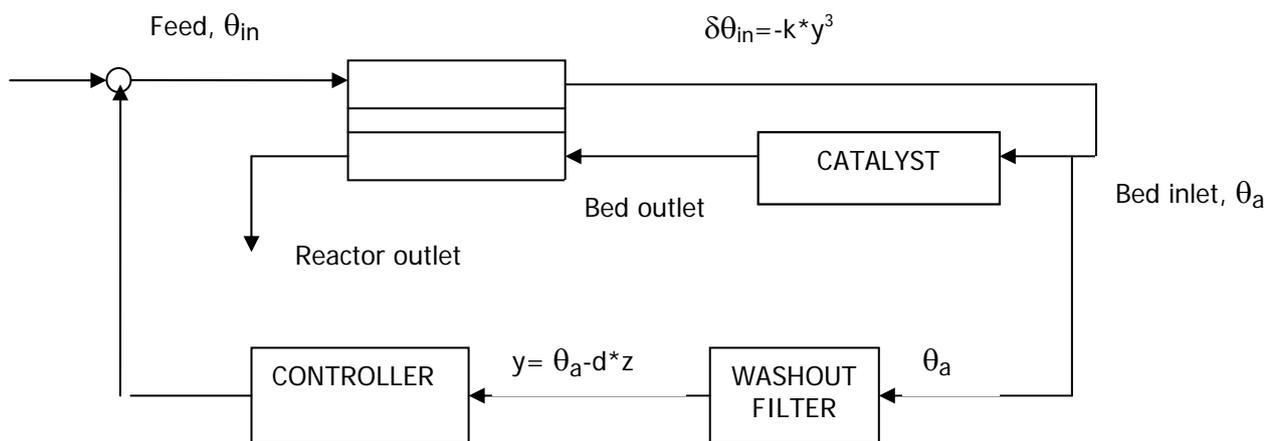


fig. 1.4.2 Schema di un sistema di controllo in anello chiuso di stabilizzazione di una biforcazione di Hopf in un reattore di sintesi di ammoniaca; θ_a temperatura della corrente in ingresso al letto catalitico; θ_{in} temperatura di alimentazione; d inverso della costante di tempo del filtro di washout; y output del filtro di washout; z stato del filtro di washout; k gain della legge di controllo [Recke et al., 2000].

In figura 1.4.3a è riportato il diagramma delle soluzioni di regime del reattore controllato. La biforcazione di Hopf H_{IU} risulta, in seguito all'applicazione della legge di controllo, supercritica, portando alla nascita di regimi periodici stabili. I risultati di una simulazione numerica del reattore controllato mostrano una significativa riduzione dell'ampiezza delle oscillazioni della temperatura conseguenti al raggiungimento del punto di biforcazione H_{IU} (fig. 1.4.3b).

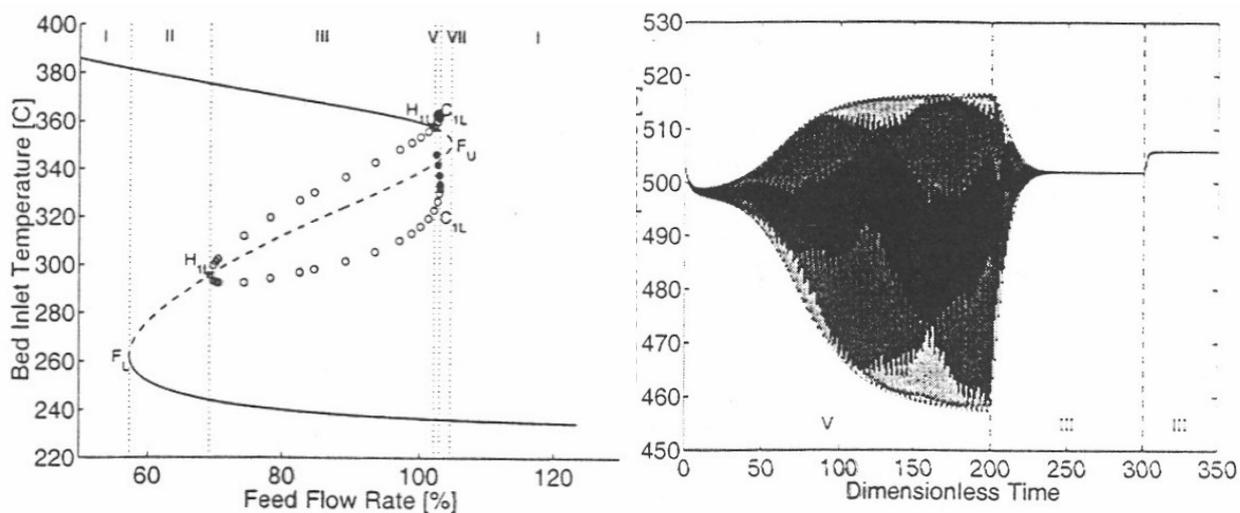


fig. 1.4.3 (a) diagramma delle soluzioni di regime del reattore controllato al variare della portata di alimentazione; (b) andamento nel tempo della temperatura del letto al variare della portata di alimentazione [Recke et al., 2000].

1.5 Controllo di biforcazioni locali di regimi periodici

Metodologie di controllo di biforcazioni di regimi periodici sono state sviluppate, nel corso dell'ultimo decennio, attraverso l'applicazione di tecniche di bilancio armonico. I regimi periodici di sistemi dinamici tempo continui non presentano, infatti, un'espressione analitica e possono essere approssimati attraverso funzioni armoniche. Più precisamente, una soluzione periodica può sempre essere approssimata attraverso una funzione del tipo:

$$y_1 = A + B\cos\omega t \quad (1.5.1)$$

con $B \geq 0, \omega > 0$ [Basso and Genesio, 2003].

L'analisi delle biforcazioni di regimi periodici di sistemi dinamici tempo continui è generalmente condotta attraverso lo studio di appropriati sistemi tempo discreti, definiti mappe di Poincaré [Kuznetsov, 1998]. Basti sapere, in questo contesto, che la mappa di Poincaré di una soluzione di regime periodico restituisce il campionamento dello stato del sistema ad intervalli di tempo pari al periodo della soluzione. La determinazione numerica di mappe di Poincaré può risultare, tuttavia, complessa ed inaccurata, e si rivela pertanto inadeguata ai fini di obiettivi di controllo di biforcazioni di regimi periodici. In [Moiola and Chen, 1993; Tesi et al., 1996; Basso et al., 1997] sono presentate condizioni analitiche per la determinazione di biforcazioni di regimi periodici attraverso l'uso di tecniche di bilancio armonico. Sulla base di uno studio delle biforcazioni di regimi periodici nel dominio della frequenza sono state sviluppate tecniche di controllo di biforcazioni dinamiche (Hopf, cyclic-fold, period-doubling), e tecniche di controllo dell'ampiezza e della molteplicità di soluzioni di regime periodico [Genesio et al., 1993; Berns et al., 1998; Calandrini et al., 1999].

Le metodologie di controllo di biforcazione descritte hanno motivato interesse, nel corso dell'ultimo decennio, in diversi campi dell'ingegneria. Fenomeni di stallo di aerei ad elevati angoli di attacco, aritmie cardiache, fenomeni di stallo in compressori assiali, sono alcuni esempi di problematiche affrontate mediante l'applicazione di tecniche di controllo di biforcazioni [Lee and Abed, 1991; Chen et al., 1998a; Wang et al., 1993].

1.6 Introduzione di punti di biforcazione (anti-control)

Nella gestione di un sistema di processo, la presenza di condizioni di biforcazioni nel campo delle condizioni operative di interesse, è, generalmente, indesiderata. Il raggiungimento di punti di biforcazione può portare alla nascita di comportamenti indesiderati del sistema. Per queste ragioni,

le metodologie di controllo di biforcazioni sono state principalmente indirizzate a ritardare il raggiungimento di punti di biforcazione, o modificare il comportamento asintotico in prossimità di un punto di biforcazione. In questa direzione, sono state sviluppate tecniche che consentono di modificare i valori dei parametri per i quali si trovano biforcazioni, e di stabilizzare punti di biforcazioni catastrofiche [Chen, Moiola and Wang, 2000].

In [Chen et al., 1998b; Chen et al., 2001] è proposta una metodologia di controllo di biforcazioni, definita anti-control di biforcazioni, che modifica in modo significativo le precedenti strategie di controllo. L'obiettivo dell'anti-control di biforcazioni è una modificazione del comportamento asintotico di un sistema dinamico attraverso l'introduzione di nuovi punti di biforcazione.

L'idea presentata in [Chen et al., 1998b; Chen et al., 2001] non è nuova, ma trae origine da tecniche, definite di anti-control del caos, precedentemente sviluppate al fine di realizzare, in alcune applicazioni, condizioni di regime di natura caotica. In particolari applicazioni, infatti, il caos è una soluzione di regime desiderata. Ad esempio, in applicazioni militari, segnali caotici sono utilizzati per garantire sicurezza nella trasmissione dell'informazione [Chen, G. and Dong, X., 1998].

Come nell'anti-control del caos, la metodologia di anti-control di biforcazioni si propone la determinazione di nuove soluzioni di regime di un sistema dinamico. Nuove condizioni di regime sono realizzate, nell'anticontrol delle biforcazioni, attraverso l'introduzione di punti di biforcazione. Il raggiungimento di un punto di biforcazione accompagna, infatti, oltre ad una perdita di stabilità del preesistente regime, la nascita di nuovi comportamenti asintotici. Pertanto, è possibile pensare di realizzare soluzioni di regime desiderate per mezzo dell'introduzione di opportuni punti di biforcazione.

Le soluzioni di regime che nascono in seguito al raggiungimento di un nuovo punto di biforcazione possono essere utilizzate con diversi obiettivi. Ad esempio, l'introduzione di una biforcazione di Hopf supercritica in prossimità di un punto di biforcazione catastrofica può essere utilizzata per realizzare un segnale d'allarme. In questo caso, quando le condizioni operative del sistema si avvicinano al punto di biforcazione catastrofica, la condizione di rischio sarà segnalata dalla nascita di oscillazioni delle variabili di stato. In alternativa è possibile introdurre nuovi punti di biforcazione per realizzare condizioni di esercizio caratterizzate da migliori prestazioni di un sistema di processo, o modificare le caratteristiche di stabilità del diagramma delle soluzioni di regime.

In [Monnigmann and Marquardt, 2002] le caratteristiche di stabilità del diagramma delle soluzioni di regime di un reattore di polimerizzazione sono modificate attraverso l'introduzione di una coppia di biforcazioni di Hopf. I risultati riportati in [Monnigmann and Marquardt, 2002] sono mostrati in fig. 3.3.1.

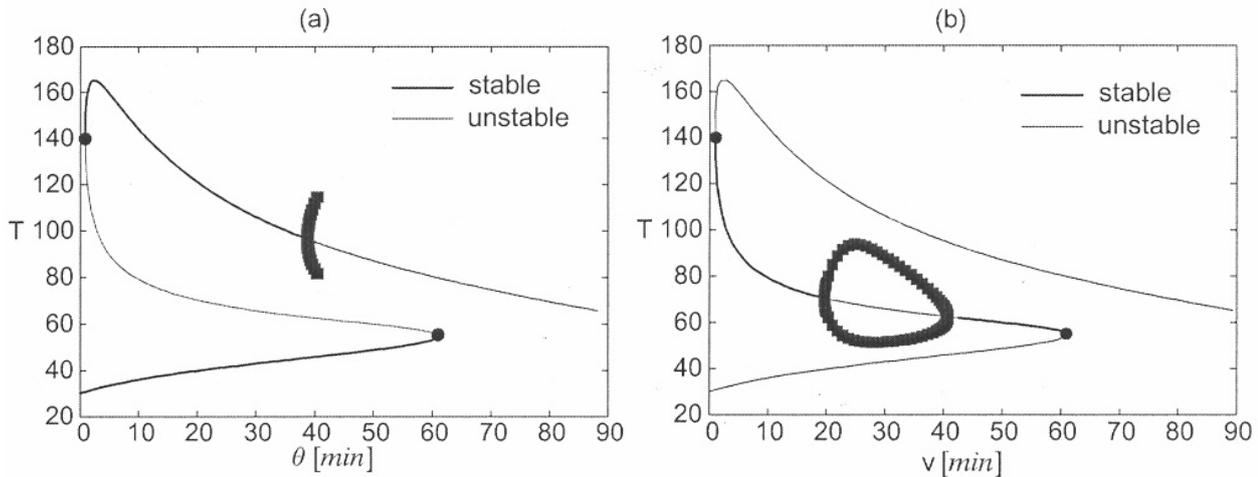


fig. 1.6.1 (a) diagramma delle soluzioni di regime del reattore non controllato, al variare del tempo di permanenza; (b) diagramma delle soluzioni di regime del reattore controllato, al variare del tempo di permanenza [Monnigmann and Marquardt, 2002].

Nel diagramma delle soluzioni di regime del reattore non controllato, al variare del tempo di residenza, si trovano tre rami di soluzioni di regime stazionario (fig. 1.6.1a). In particolare, il ramo di soluzioni di regime stazionario intermedio, delimitato da una coppia di biforcazioni sella nodo, risulta instabile. In [Monnigmann and Marquardt, 2002] è determinata una legge di controllo non lineare che consente di introdurre, lungo il ramo instabile intermedio, una coppia di biforcazioni di Hopf (fig. 1.6.1b). Il sistema di controllo sviluppato prevede l'impiego di filtri di washout in modo da non modificare la struttura del diagramma delle soluzioni del sistema non controllato. Nello schema di controllo considerato in [Monnigmann and Marquardt, 2002], il tempo di residenza all'interno del reattore, la concentrazione dell'iniziatore della reazione di polimerizzazione, e la temperatura del fluido refrigerante sono considerate come variabili manipolabili, mentre la temperatura del reattore è utilizzata come variabile di controllo. L'introduzione delle biforcazioni di Hopf porta alla stabilizzazione del ramo intermedio all'interno di ampi intervalli di variazione del parametro di biforcazione (fig.1.6.1b). Pertanto, il sistema di controllo sviluppato consente di esercire il reattore in corrispondenza di punti stazionari del ramo intermedio.

1.7 Conclusioni

E' stata illustrata, in questo capitolo, una descrizione della letteratura scientifica inerente alla teoria del controllo delle biforcazioni. Sono state presentate le principali metodologie di controllo delle biforcazioni sviluppate nel corso degli ultimi decenni. Particolare attenzione è stata rivolta nei confronti della analisi dei risultati riportati attraverso implementazione di metodologie di controllo delle biforcazioni. Sono stati, in questa direzione, illustrati i risultati della implementazione di una

metodologia di controllo delle biforcazioni locali ai fini del controllo di una biforcazione di Hopf in un reattore industriale di sintesi di ammoniaca [Recke et al., 2000], ed i risultati della implementazione di una metodologia di anti-control di biforcazioni nella gestione di un reattore di polimerizzazione [Monnigmann and Marquardt, 2002].

L'analisi della letteratura scientifica inerente alla teoria del controllo delle biforcazioni rivela come ragguardevoli risultati siano stati raggiunti, attraverso l'implementazione di metodologie di controllo delle biforcazioni, in innumerevoli settori dell'ingegneria (e.g. ingegneria aeronautica, elettronica, etc.) [Chen and et al., 2000]. Tuttavia, modesti sforzi sono stati sinora compiuti per la estensione e lo sviluppo di metodologie di controllo delle biforcazioni adeguate ai fini del controllo di sistemi di processo dell'ingegneria chimica. Si osservi, in tal senso, che i due esempi illustrati in questo capitolo, sono i soli, riportati nella letteratura scientifica dell'ingegneria chimica, di applicazione di metodologie di controllo delle biforcazioni.

Un ulteriore lacuna che emerge dallo studio della letteratura scientifica inerente alla teoria del controllo delle biforcazioni è la assenza di risultati teorici in merito alla modificazione del comportamento asintotico di sistemi dinamici non lineari in intervalli finiti di variazione dei parametri. Le metodologie di controllo delle biforcazioni illustrate in questo capitolo descrivono metodologie di controllo locale. Esse risultano, infatti, finalizzate alla modificazione del comportamento asintotico di sistemi dinamici non lineari nell'intorno di punti di biforcazione locali. Nella pratica industriale, si trovano frequenti variazioni delle condizioni operative di funzionamento di sistemi di processo (e.g. modificazione della composizione della corrente di alimentazione). Nasce, in questa direzione, l'esigenza di sviluppo di metodologie di controllo delle biforcazioni finalizzate alla modificazione del comportamento asintotico di sistemi dinamici non lineari in intervalli di variazione finiti dei parametri.

Capitolo 2

Bifurcation Tailoring

La metodologia di bifurcation tailoring risulta finalizzata alla determinazione di una legge di controllo che modifichi la struttura del diagramma delle soluzioni di regime di un sistema dinamico non lineare. Proposta in [Lowenberg, 1998a], la metodologia di bifurcation tailoring garantisce la possibilità di descrivere un prefissato (i.e. desiderato) diagramma delle soluzioni di regime, al variare di uno o più parametri di biforcazione, attraverso un'opportuna variazione degli altri parametri del sistema.

La metodologia di bifurcation tailoring accompagna, nello sviluppo della teoria del controllo delle biforcazioni, un significativo cambiamento degli obiettivi di controllo. L'applicazione di metodologie di controllo di biforcazioni locali (par. 1.5, 1.6) risulta efficace ai fini della modificazione del comportamento asintotico di un sistema dinamico non lineare in prossimità di punti di biforcazione. La metodologia di bifurcation tailoring è indirizzata alla modificazione del comportamento asintotico di un sistema dinamico non lineare in un intervallo di variazione finito dei parametri.

In questo capitolo è riportata una accurata descrizione della metodologia di bifurcation tailoring. In particolare, è illustrata una innovativa estensione della metodologia di bifurcation tailoring ai fini della prevenzione di fenomeni di runaway termico nella gestione di processi reattivi esotermici.

Nel paragrafo 2.1, è illustrata la originaria formulazione della metodologia di bifurcation tailoring [Lowenberg et al., 1998a, 1998b]. Nel paragrafo 2.2, sono descritti gli schemi numerici di implementazione della metodologia di bifurcation tailoring. Nel paragrafo 2.3, è riportata una analisi dei limiti di applicazione della metodologia di bifurcation tailoring ed è, quindi, illustrato uno schema di controllo in anello chiuso che permette di superare i limiti di applicazione indicati [Charles et al., 2003]. E', in questa direzione, descritta, nel paragrafo 2.4, una strategia di controllo adattativo, definita minimal control synthesis [Stoten, 1996], successivamente ripresa, nell'implementazione della metodologia di bifurcation tailoring, ai fini allo sviluppo di sistemi di controllo in retroazione. Nel paragrafo 2.5, è riportata una analisi della possibilità di applicazione di metodologie di controllo delle biforcazioni ai fini della prevenzione di fenomeni di runaway termico nella gestione di processi reattivi esotermici. E', in questa direzione, descritta la letteratura scientifica inerente lo sviluppo di metodologie di prevenzione di fenomeni di runaway termico. Sono, in merito, indicate possibilità di applicazione della teoria del controllo delle biforcazioni ai fini della prevenzione di fenomeni di runaway termico. Nel paragrafo 2.6, sono illustrati i risultati

della implementazione della metodologia di bifurcation tailoring ai fini della prevenzione di fenomeni di runaway termico nella gestione di un processo reattivo di parziale ossidazione.

2.1 Bifurcation tailoring di soluzioni di regime

Si prenda in esame un sistema dinamico tempo continuo descritto dal set di equazioni:

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = F(x, p, q) \\ y = H(x) \end{cases} \quad (2.1.1)$$

con $x \in \mathbb{R}^n$ vettore delle variabili di stato, $y \in \mathbb{R}^m$ vettore degli delle variabili di uscita del sistema. In (2.1.1) $p \in \mathbb{R}$ deve intendersi come il parametro di biforcazione, mentre $q \in \mathbb{R}^m$ è il vettore di tutti gli altri parametri operativi del sistema. L'obiettivo del bifurcation tailoring è determinare una legge di controllo del vettore dei parametri q (o scheduling) tale per cui il vettore delle variabili di uscita y del sistema controllato presenti un prefissato diagramma delle soluzioni di regime, quando il parametro di biforcazione p varia in un dato intervallo, ovvero risulti:

$$y = g(p, t) \quad \text{con } p \in [p_a, p_b] \quad (2.1.2)$$

dove per ogni $p \in [p_a, p_b]$, $g(p, t)$ può definire punti stazionari (nel caso in cui $y = g(p)$ non dipende dal tempo), regimi periodici, quasi periodici o regimi caotici (nel caso in cui $y = g(p, t)$ è funzione del tempo). Pertanto, l'obiettivo del bifurcation tailoring è determinare una legge di variazione del vettore dei parametri operativi $q = q(p)$ tale per cui il sistema il sistema (2.1.1) presenti il diagramma delle soluzioni definito in (2.1.2) quando il parametro di biforcazione p varia nell'intervallo di interesse.

Si assumerà senza perdita di generalità, nel seguito, che il vettore delle variabili di uscita del sistema dinamico (2.1.1) sia costituito dai primi m elementi del vettore di stato x , ovvero risulti:

$$y = H(x) = x_1 \quad \text{con } x_1 = (x_1, x_2, \dots, x_m) \quad (2.1.3)$$

Si esaminerà, inoltre, il caso in cui la tecnica del bifurcation tailoring sia applicata al diagramma delle soluzioni di regime stazionario del sistema (2.1.1), ovvero la dipendenza $g(p, t)$ in (2.1.2)

definisca per ogni $p \in [p_a, p_b]$, un insieme di punti stazionari. E' opportuno sottolineare come la dipendenza $g(p, t)$ in (2.1.2) non definisca, in generale, una funzione del parametro di biforcazione p , potendo essere richiesta molteplicità di soluzioni di regime ad uno stesso valore del parametro p . Nella pratica, comunque, la molteplicità di soluzione di regime è frequentemente indesiderata e la dipendenza $g(p, t)$ rappresenta effettivamente una funzione del parametro p .

Sulla base delle precedenti ipotesi si intende determinare una legge di controllo $q = q(p)$ tale per cui risulti:

$$x_I = x_I(p) \quad \text{quando } p \in [p_a, p_b] \quad (2.1.4)$$

Si definisca la seguente partizione del vettore di stato $x \in \mathbb{R}^n$:

$$x = \begin{bmatrix} x_I \\ x_{II} \end{bmatrix} \quad \text{con } x_I = (x_1, x_2, \dots, x_m)^T; \quad x_{II} = (x_m, x_{m+1}, \dots, x_n)^T \quad (2.1.5)$$

ed il vettore ausiliario $z \in \mathbb{R}^n$:

$$z = \begin{bmatrix} x_{II} \\ q \end{bmatrix} \quad (2.1.6)$$

La determinazione della legge di controllo $q = q(p)$, tale per cui valga la (2.1.4), si traduce nella risoluzione del seguente sistema di equazioni non lineari:

$$F(g(p), x_{II}, p, q) = F(z, p) = 0 \quad \text{con } p \in [p_a, p_b] \quad (2.1.7)$$

Quando la matrice Jacobiana del sistema (2.1.7) è non singolare allora è possibile individuare, in base al teorema delle funzioni implicite [Isidori, 1995], una funzione vettoriale:

$$z = z(p) = \begin{bmatrix} x_{II}(p) \\ q(p) \end{bmatrix} \quad (2.1.8)$$

che soddisfi la (2.1.7).

Pertanto, quando il vettore dei parametri q è controllato, al variare del parametro di biforcazione p , secondo la dipendenza $q = q(p)$ riportata in (2.1.8), il sistema dinamico (2.1.1) sicuramente presenta il seguente ramo di soluzioni di regime stazionario:

$$x(p) = \begin{bmatrix} g(p) \\ x_{II}(p) \end{bmatrix} \quad (2.1.9)$$

2.2 Implementazione della tecnica del bifurcation tailoring

Il bifurcation tailoring è, nella sua originaria formulazione [Lowenberg, 1998a; Lowenberg, 1998b], una tecnica di controllo in anello aperto. La figura 2.2.1 descrive la struttura di un sistema di controllo basato sulla tecnica del bifurcation tailoring [Charles et al., 2002a].

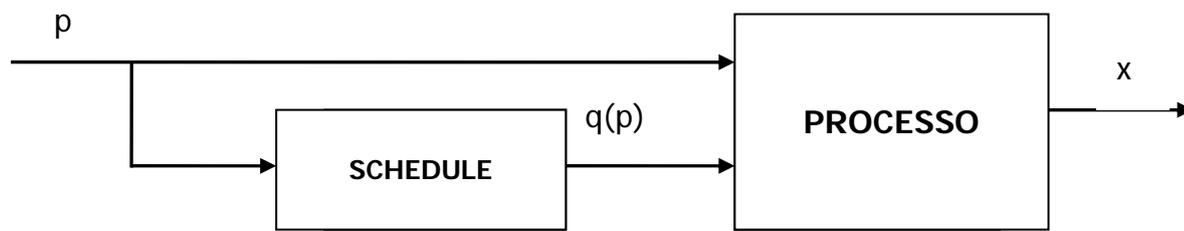


fig. 2.2.1 Schema di controllo in anello aperto basato sulla tecnica del bifurcation tailoring.

L'unità di scheduling restituisce un'implementazione della legge di controllo $q = q(p)$. Ai fini della determinazione dello scheduling $q = q(p)$ è possibile risolvere, il sistema di equazioni non lineare (2.1.7), al variare del parametro di biforcazione p , attraverso continuazione parametrica dei punti stazionari del campo F . Al variare del parametro di biforcazione p , si effettua una valutazione della $g(p)$ che, insieme al valore del parametro p , è fornita al software di continuazione AUTO97 [Doedel et al., 1997; Doedel, 1997]. Il software AUTO97 restituisce, al variare di p , una tabulazione numerica dello scheduling $q(p)$. Pertanto, ai fini dell'implementazione in linea della legge di controllo risulta necessaria un'interpolazione dei dati forniti dal software di continuazione. Questa operazione può, tuttavia, risultare complessa ed inaccurata.

Una più efficiente applicazione della tecnica del bifurcation tailoring può essere realizzata attraverso una valutazione in linea dello scheduling $q=q(p)$. Ai fini della determinazione in linea della legge di controllo $q = q(p)$, in [Wang et al., 2003] si propone, in luogo dell'impiego di un software di continuazione, l'applicazione di un algoritmo di integrazione numerica, l'algoritmo di Newton [Jongen et al., 1986]. L'algoritmo di Newton riconduce la risoluzione di un sistema di

equazioni non lineari all'integrazione numerica di un sistema di equazioni differenziali. In particolare la risoluzione di un sistema equazioni non lineari del tipo:

$$F(x) = 0 \tag{2.2.1}$$

con $F : \Omega \in \mathbb{R}^n \longrightarrow \Omega \in \mathbb{R}^n$, è ricondotta alla risoluzione del problema di ottimizzazione non condizionata:

$$\min_x \Phi(x) \tag{2.2.2}$$

di determinazione del minimo della funzione:

$$\Phi(x) = \frac{1}{2} \|F(x)\|^2 \tag{2.2.3}$$

Nell'applicazione dell'algoritmo di Newton, il problema di ottimizzazione (2.2.2) è affrontato attraverso l'integrazione numerica del sistema di equazioni differenziali ordinarie:

$$\frac{dx}{dt} = - \frac{\partial \Phi}{\partial x} = - \left[\frac{\partial F}{\partial x} \right]^T \cdot F(x) \tag{2.2.4}$$

Il campo vettoriale al secondo membro della (2.2.4) è, a meno di un cambiamento di segno, il gradiente della funzione $\Phi(x)$. Si ricorda che il gradiente di una funzione di più variabili definisce in ogni punto dello spazio la direzione nella quale è massimo l'incremento della funzione. Pertanto, è chiaro che un punto di minimo di una funzione può essere ragionevolmente cercato seguendo nel tempo la direzione dello spazio definita dall'opposto del vettore gradiente. Questo è il principio a partire dal quale si sviluppa l'algoritmo di integrazione numerica (2.2.4), e più in generale, un'intera classe di algoritmi di ottimizzazione, definiti algoritmi del gradiente [Jongen et al., 1986].

Nell'implementazione della tecnica del bifurcation tailoring, l'applicazione dell'algoritmo di Newton impone la risoluzione del sistema di equazioni differenziali ordinarie :

$$\begin{bmatrix} \frac{dx_{II}}{dt} \\ \frac{dq}{dt} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \frac{\partial F}{\partial x_{II}} & \frac{\partial F}{\partial q} \end{bmatrix}^T F(g(p(t)), X_{II}, p(t), q) \tag{2.2.5}$$

quando il parametro p varia lentamente all'interno dell'intervallo $[p_a, p_b]$. Con le condizioni iniziali:

$$x_{II}(0) = x_{II}(p_a) \quad q(0) = q(p_a) \quad (2.2.6)$$

il sistema di equazioni differenziali (2.2.1) può essere integrato per determinare l'azione dell'unità di scheduling $q = q(p)$ per ogni valore del parametro p all'interno dell'intervallo $[p_a, p_b]$.

2.3 Limiti del bifurcation tailoring: introduzione di un sistema di controllo a retroazione

L'applicazione della tecnica del bifurcation tailoring, ai fini del controllo di un sistema di processo, presenta notevoli limiti. La tecnica del bifurcation tailoring è una tecnica di controllo in anello aperto e non è, pertanto, in grado di assicurare stabilità del ramo di soluzioni di regime desiderate. La tecnica non fornisce, inoltre, alcuna garanzia sull'unicità della soluzione di regime desiderata, ad un prefissato set di valori dei parametri. Frequentemente, nell'applicazione della tecnica del bifurcation tailoring, si trova la coesistenza del ramo di soluzioni di regime desiderate con rami di soluzioni di regime indesiderate.

Un ulteriore limite di questa tecnica risiede nelle inevitabili incertezze delle previsioni del modello matematico utilizzato nella determinazione della legge di controllo. Ai fini della determinazione della legge di controllo in anello aperto risulta, infatti, necessaria una completa ed accurata conoscenza della dinamica del sistema di processo. Questa assunzione è improponibile in applicazioni industriali.

Al fine di garantire stabilità dei rami delle soluzioni di regime desiderate e robustezza del sistema di controllo rispetto ad eventuali disturbi ed incertezze nelle previsioni del modello matematico, è proposta in [Wang et al., 2003; Charles et al., 2002a, 2002b], nell'applicazione della tecnica del bifurcation tailoring, l'introduzione di un sistema di controllo in retroazione. Accanto ad un'unità di controllo in anello aperto che implementa la legge di controllo $q=q(p)$ in anello aperto in (2.1.8), si prevede l'impiego di un sistema di controllo in retroazione che stabilizza, al variare del parametro di biforcazione p , il ramo delle soluzioni di regime desiderate. In figura 2.3.1 è illustrato uno schema del sistema di controllo sviluppato in [Wang et al., 2003].

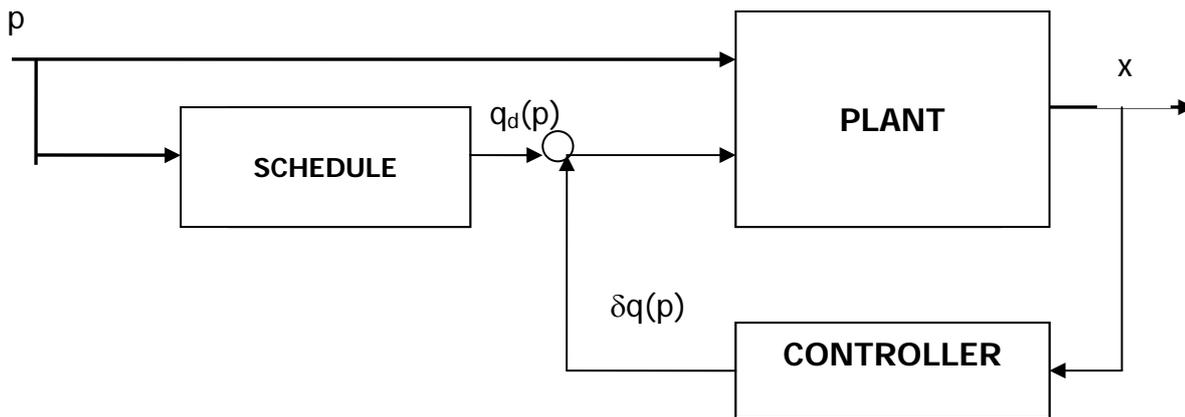


fig. 2.3.1 Schema di controllo in anello chiuso basato sulla tecnica del bifurcation tailoring.

L'azione del sistema di controllo è risultante della sovrapposizione degli interventi del sistema di controllo in anello aperto e del sistema di controllo in retroazione. Pertanto, la legge di controllo può esprimersi attraverso la seguente equazione di variazione del vettore dei parametri q :

$$q(p) = q_d(p) + \delta q(p) \quad (2.3.1)$$

dove $q_d(p)$ descrive l'azione dell'unità di scheduling, mentre $\delta q(p)$ definisce il contributo del sistema di controllo in retroazione.

Allo scopo di sviluppare un adeguato sistema di controllo in retroazione, si assuma che il parametro di biforcazione p vari lentamente tra gli estremi dell'intervallo di definizione della funzione $g(p)$, p_a e p_b . Si definisca quindi:

$$\delta x = x(p(t)) - x_d(p(t)) \quad (2.3.2)$$

la deviazione del corrente comportamento asintotico del sistema $x(p(t))$ rispetto al comportamento asintotico desiderato:

$$x_d(p(t)) = \begin{bmatrix} g(p(t)) \\ x_{II}(p(t)) \end{bmatrix} \quad (2.3.3)$$

dove si è tenuta presente la relazione (2.1.9). Si prenda, quindi, in esame il sistema (3.1.1) controllato attraverso la legge di controllo in anello aperto $q(p(t)) = q_d(p(t))$, ovvero:

$$\frac{dx}{dt} = F(x, p, q_d(p(t))) \quad (2.3.4)$$

La linearizzazione del sistema (2.3.4) intorno al punto $(x_d(p(t)), q_d(p(t)))$ assume la forma:

$$\dot{\delta x} = A(p(t))\delta x + b(p(t))\delta q \quad (2.3.5)$$

dove:

$$A(p(t)) = \left. \frac{\partial F}{\partial x} \right|_{\substack{x=x_d(p(t)) \\ q=q_d(p(t))}} \quad b(p(t)) = \left. \frac{\partial F}{\partial q} \right|_{\substack{x=x_d(p(t)) \\ q=q_d(p(t))}} \quad (2.3.6)$$

Al fine di garantire stabilità dell'origine del sistema (2.3.5) (o in modo equivalente del punto stazionario $x_d(p(t))$ del sistema (2.3.4)) è necessario sviluppare una legge di controllo in retroazione del vettore di ingresso δq che modifichi opportunamente le caratteristiche di stabilità della matrice $A(p(t))$. Le matrici A e b del sistema linearizzato (2.3.5) variano nel corso del tempo per effetto di variazioni del parametro di biforcazione p . I parametri del sistema di controllo in retroazione dovranno, pertanto, essere opportunamente modificati nel corso del tempo in funzione delle variazioni delle matrici A e b , in modo da garantire stabilità dell'intero ramo delle soluzioni di regime desiderate $x_d(p(t))$ del sistema (2.3.4). In questa direzione, risulta particolarmente adeguato l'impiego di tecniche di controllo adattativo. Nella sua più generale formulazione uno schema di controllo adattativo prevede, sulla base di un'identificazione parametrica in linea del sistema di processo, una opportuna modificazione dei parametri del sistema di controllo, in modo da assicurare stabilità delle soluzioni di regime desiderate nonostante variazioni nel tempo dei parametri operativi [Sastry and Bodson, 1989; Landau, 1979]. Nel successivo paragrafo è, pertanto, illustrata una strategia di controllo adattativo, definita minimal control synthesis, che sarà successivamente ripresa ai fini della implementazione della metodologia di bifurcation tailoring.

2.4 Stabilizzazione di soluzioni di regime desiderate attraverso controllo adattativo: Minimal Control Synthesis

Al fine di garantire, nell'implementazione della metodologia di bifurcation tailoring, stabilità ed unicità delle soluzioni di regime desiderate al variare dei parametri di biforcazione si prevede l'introduzione di un sistema di controllo in retroazione adattativo. E', in questa direzione,

selezionata una strategia di controllo adattativo definita minimal control synthesis. Presentata in [Stoten, D. P. and Benchoubane, H., 1990a, 1990b], la strategia di minimal control synthesis si è rivelata efficace ai fini del controllo di sistemi dinamici non lineari [Stoten and di Bernardo, 1996; Stoten and di Bernardo, 2006] e risulta, pertanto, adeguata ai fini della stabilizzazione di rami di soluzioni di regime desiderate risultanti dalla implementazione della metodologia di bifurcation tailoring.

La strategia di minimal control synthesis descrive una metodologia di controllo adattativo basata su di un modello di riferimento [Sastry and Bodson, 1989; Landau, 1979]. L'idea centrale di strategie di controllo adattativo basate su di un modello di riferimento è garantire che le variabili di uscita del sistema dinamico controllato seguano, nel tempo, l'evoluzione delle variabili di uscita di un modello matematico di riferimento. In questa direzione, il modello matematico di riferimento è preliminarmente definito in modo da descrivere accuratamente il comportamento dinamico desiderato del sistema dinamico controllato. Nell'implementazione di strategie di controllo adattativo basate su di un modello di riferimento, è effettuato, al variare dei parametri operativi, un confronto tra le determinazioni delle variabili di uscita del sistema dinamico controllato (i.e. variabili misurate in linea) e le determinazioni delle variabili di uscita del modello matematico di riferimento. La misura in linea della deviazione del comportamento dinamico del sistema dinamico controllato rispetto al comportamento dinamico descritto attraverso il modello matematico di riferimento è quindi utilizzata ai fini di un aggiornamento dei parametri del controllore di retroazione.

Si assuma che la legge di controllo in retroazione δq in (2.3.5) sia espressa nella seguente forma:

$$\delta q(p(t)) = K(p(t)) \cdot \delta x(p(t)) \quad (2.4.1)$$

dove K è la matrice dei guadagni del sistema di controllo in retroazione e deve essere aggiornata, al variare del parametro di biforcazione p , ai fini della minimizzazione della deviazione delle variabili di uscita del sistema dinamico controllato rispetto alle variabili di uscita del modello matematico di riferimento. Nell'implementazione della strategia di minimal control synthesis, gli elementi della matrice guadagni K sono aggiornati, al variare dei parametri di biforcazione p , secondo la seguente legge di variazione:

$$K(p(t)) = \alpha \cdot \int_0^t y_e(p(\tau)) \cdot \delta x^T(p(\tau)) \cdot d\tau + y_e(p(t)) \cdot \delta x^T(p(t)) \quad (2.4.2)$$

dove α e β sono coefficienti di peso dell'algoritmo di controllo, ed il vettore $y_e(p(t))$, definito errore di uscita, descrive una misura delle deviazioni delle variabili di stato del sistema dinamico controllato rispetto alle variabili di stato del modello matematico di riferimento. L'errore di uscita $y_e(p(t))$ assume la seguente forma:

$$y_e(p(t)) = -C_e \cdot \delta x^T(p(t)) \quad (2.4.3)$$

In (2.4.3) la matrice C_e è valutata segue:

$$C_e = b_c^T \cdot P \quad \text{con} \quad b_c^T = [0 \cdots 1] \quad (2.4.4)$$

Dove P è una matrice simmetrica definita positiva ed è determinata attraverso risoluzione della seguente equazione di Lyapunov [Sastry and Bodson, 1989]:

$$P \cdot A_m + A_m^T \cdot P = -Q, \quad Q > 0 \quad (2.4.5)$$

In (2.4.5), A_m è la matrice associata ad un modello matematico lineare di riferimento e descrive, pertanto, il comportamento dinamico desiderato.

2.5 Applicazione di tecniche di controllo delle biforcazioni al controllo di fenomeni di runaway termico

Condizioni di runaway termico sono raggiunte, nell'esercizio di un reattore chimico, quando una piccola variazione dei parametri operativi induce un notevole aumento della temperatura del sistema reattivo. Questo scenario è particolarmente frequente nella gestione di processi reattivi esotermici. La dipendenza esponenziale della velocità di reazione dalla temperatura e la dipendenza lineare del calore smaltito verso l'esterno dalla temperatura, possono, infatti, determinare, in seguito ad una perdita di controllo della temperatura di esercizio del reattore, un rapido incremento della potenza termica generata per effetto della reazione. Ad esempio, un incremento della temperatura del fluido refrigerante, conseguente ad un malfunzionamento del sistema di raffreddamento, può determinare una riduzione del calore smaltito verso l'esterno rispetto al calore generato per effetto della reazione. Il conseguente innalzamento della temperatura di esercizio del reattore determina, per effetto della dipendenza esponenziale della velocità di reazione dalla temperatura, un rapido

incremento della potenza termica generata. Il meccanismo illustrato è responsabile di una progressiva crescita nel tempo della temperatura di esercizio del reattore.

Fenomeni di runaway possono condurre, per effetto di un incremento della temperatura, al raggiungimento di elevate pressioni, fino all'esplosione del reattore.

Nella gestione di processi reattivi che presentino schemi cinetici complessi, la perdita di controllo della temperatura di esercizio del reattore può rivelarsi, inoltre, responsabile di una significativa riduzione delle prestazioni del sistema di processo. Attraverso fenomeni di runaway possono essere raggiunte temperature in corrispondenza delle quali hanno luogo reazioni secondarie, con conseguente riduzione di resa e selettività dei prodotti intermedi desiderati [Varma, Morbidelli and Wu, 1999].

Innumerevoli studi dei meccanismi che presiedono allo sviluppo di fenomeni di runaway sono stati condotti a partire dagli anni sessanta. Gli sforzi compiuti sono stati prevalentemente indirizzati allo sviluppo di criteri di determinazione dei limiti delle regioni dello spazio dei parametri dove hanno luogo fenomeni di runaway. Lo studio delle condizioni critiche di runaway è stato affrontato per differenti tipologie di reattori e schemi cinetici. Welsenaere e Froment (1970), Morbidelli and Varma (1982), Balakotaiah (1989) hanno presentato criteri di runaway per modelli di reattori omogenei. Morbidelli e Varma (1986), Balakotaiah e Luss (1991) hanno sviluppato criteri di runaway per modelli di reattori eterogenei.

Recenti studi individuano nella determinazione delle condizioni critiche di runaway termico il raggiungimento di punti di biforcazione catastrofica [Balakotaiah et al.,1994; Patil and Balakotaiah,1997]. In questa direzione, i limiti delle condizioni operative di funzionamento in corrispondenza delle quali si osserva lo sviluppo di fenomeni di runaway, sono individuati attraverso continuazione parametrica dei luoghi di punti di biforcazione del modello matematico del reattore.

In accordo con i risultati riportati in [Balakotaiah et al.,1994; Patil and Balakotaiah,1997] l'applicazione di metodologie di controllo di biforcazioni appare particolarmente adeguata ai fini del controllo di processi reattivi che possono presentare fenomeni di runaway termico. Ad esempio, lo sviluppo di un fenomeno di runaway può essere legato al raggiungimento di un punto di biforcazione di Hopf subcritica o di un punto di biforcazione sella nodo catastrofica. Attraverso l'applicazione delle tecniche di controllo a retroazione dinamica di biforcazioni locali, potrebbe determinarsi una legge di controllo non lineare che stabilizzi la biforcazione di Hopf subcritica, rendendola supercritica. Un esempio di applicazione della teoria del controllo delle biforcazioni al controllo di fenomeni di runaway è mostrato in [Cribario and Levine;1991].

Nel seguito è illustrata, in dettaglio, l'applicazione della tecnica del bifurcation tailoring nello sviluppo del sistema di controllo di un processo che può presentare fenomeni di runaway termico.

2.6 Controllo di un processo di parziale ossidazione attraverso bifurcation tailoring

I processi di parziale ossidazione sono tipiche applicazioni industriali dove fenomeni di runaway, oltre a determinare problemi di sicurezza, possono indurre una riduzione della resa e della selettività dei prodotti di reazione desiderati. In questo tipo applicazioni, l'obiettivo è massimizzare la produzione del prodotto intermedio di parziale ossidazione, evitando la completa ossidazione della massa reagente. Nonostante i meccanismi di reazione di processi di parziale ossidazione risultino, in generale, molto complessi, ai fini della discussione delle problematiche di sicurezza legate alla gestione di questo tipo di applicazione, si può efficacemente utilizzare uno schema cinetico descritto da una coppia di reazioni in serie o in parallelo, una delle quali, desiderata, schematizzi la reazione di parziale ossidazione, l'altra, indesiderata, la reazione di completa ossidazione. Una più realistica descrizione del processo reattivo si raggiunge assumendo che la reazione indesiderata di completa ossidazione presenti un'energia di attivazione molto più grande di quella della reazione di parziale ossidazione [Varma, Morbidelli and Wu, 1999].

Nel seguito si esaminerà il caso di due reazioni in serie:



e si assumerà che le velocità di reazione 1 e 2 siano descritte attraverso le seguenti espressioni cinetiche:

$$\begin{aligned} r_1 &= k_1 C_A \\ r_2 &= k_2 C_B \end{aligned} \quad (2.6.2)$$

Si assuma che il processo reattivo (2.6.1) sia condotto in un reattore continuo perfettamente miscelato (CSTR), raffreddato per mezzo di un fluido refrigerante circolante all'interno di una camicia esterna. Nelle ipotesi di densità della miscela reagente costante e di perfetta miscelazione del fluido refrigerante all'interno della camicia esterna, le equazioni di bilancio di massa e di energia sul reattore scritte in forma adimensionale assumono la seguente forma:

$$\frac{du_a}{dt} = (u_{a_{in}} - u_a) - Da \left[\exp\left(\frac{\theta \gamma_1}{\gamma_1 + \theta}\right) u_a + R_r \exp\left(\frac{\theta \gamma_2}{\gamma_1 + \theta}\right) u_a \right] \quad (2.6.3)$$

$$\frac{du_b}{dt} = -u_b + Da \exp\left(\frac{\theta \gamma_1}{\gamma_1 + \theta}\right) u_a \quad (2.6.4)$$

$$\frac{d\theta}{dt} = \theta_{in} - \theta + B Da \left[\exp\left(\frac{\theta \gamma_1}{\gamma_1 + \theta}\right) u_a + H_r R_r \exp\left(\frac{\theta \gamma_2}{\gamma_1 + \theta}\right) u_b \right] - St (\theta - \theta_c) \quad (2.6.5)$$

$$\frac{d\theta_c}{dt} = \delta_1 [Q_c (\theta_{c0} - \theta_c) + \delta_2 St (\theta - \theta_c)] \quad (2.6.6)$$

dove:

$$\begin{aligned} u_a &= \frac{C_a}{C_{ain}}; & u_b &= \frac{C_b}{C_{ain}}; & \theta &= \left(\frac{T - T_{rif}}{T_{rif}} \right) \cdot \gamma_1; & \tau_R &= \frac{\tau}{\tau_{rif}}; \\ \gamma_1 &= \frac{E_1}{R_g \cdot T_{rif}}; & \gamma_2 &= \frac{E_2}{R_g \cdot T_{rif}}; & \xi &= \frac{t}{\tau}; & \tau &= \frac{V}{q}; & \tau_{rif} &= \frac{V}{q_{rif}}; \\ Da &= \tau_{rif} \cdot k_1(T_{ref}); & R_r^i &= \frac{k_2(T_{rif})}{k_1(T_{rif})}; & H_r &= \frac{(-\Delta h_2)}{(-\Delta h_1)}; \\ B &= \frac{(-\Delta h_1) \cdot \tau_{rif}}{\rho \cdot c_p \cdot T_{rif}} \cdot \gamma_1; & St &= \frac{U \cdot \tau_{rif}}{\rho \cdot c_p}; & \theta_c &= \left(\frac{T_c - T_{rif}}{T_{rif}} \right) \cdot \gamma_1; \end{aligned} \quad (2.6.7)$$

I risultati riportati nel seguito sono stati ottenuti mantenendo costanti i valori dei seguenti gruppi dimensionali:

$$\begin{aligned} \gamma_1 &= 16 \\ \gamma_2 &= 34 \\ H_r &= 1.7 \\ R_r^i &= 0.05 \\ \theta_c &= 0 \\ B &= 20 \\ St &= 1.8 \end{aligned} \quad (2.6.8)$$

La simbologia utilizzata ed i valori dei gruppi dimensionali in (2.6.7) sono in accordo con i risultati riportati in [Varma, Morbidelli and Wu, 1999].

La figura 2.6.1 descrive il diagramma delle soluzioni di regime del sistema (2.6.3)-(2.6.4) al variare della temperatura di alimentazione della miscela reagente θ_{in} . Come variabili rappresentative dello stato del sistema sono riportate, in figura 2.6.1a, la temperatura di esercizio del reattore, in figura 2.6.1b., la resa del prodotto di parziale ossidazione B.

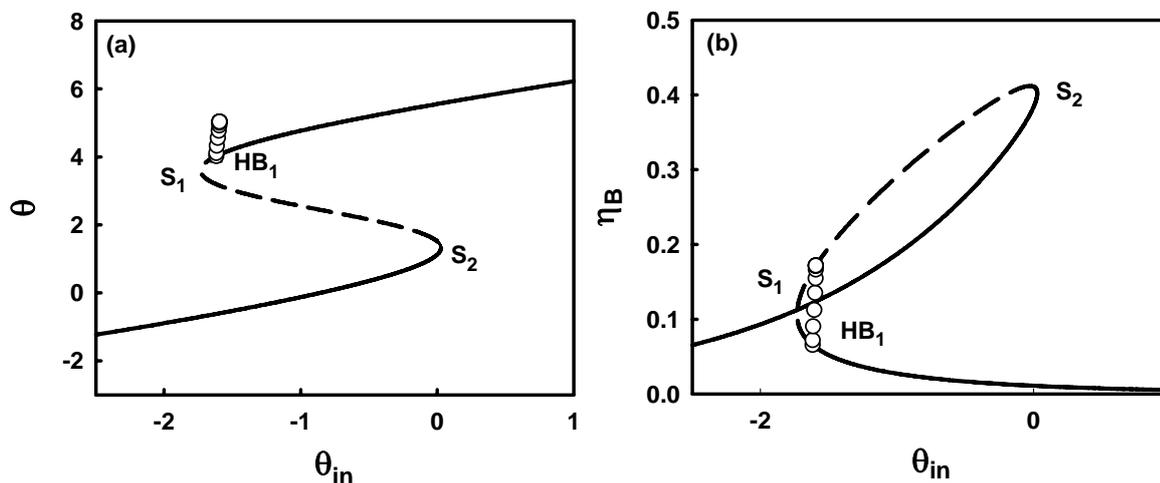


fig. 2.6.1 diagramma delle soluzioni di regime stazionario al variare del tempo di permanenza θ_{in} ; (a) temperatura di esercizio del reattore in regime stazionario al variare del tempo di permanenza θ_{in} ; (b) resa del prodotto di parziale ossidazione B al variare del tempo di permanenza θ_{in} .

Per bassi valori del parametro di biforcazione θ_{in} si trova un'unica soluzione di regime stazionario di bassa conversione. Al crescere di θ_{in} , in corrispondenza dell'intervallo delimitato dai punti di biforcazione sella nodo S_1 ed S_2 , si trova la coesistenza di tre soluzioni di regime stazionario: una soluzione di regime stabile caratterizzata da elevata temperatura di esercizio, una soluzione di regime stabile caratterizzata da bassa temperatura di esercizio, ed un punto stazionario intermedio instabile. Per valori maggiori del parametro di biforcazione, a destra del punto di biforcazione sella nodo S_1 , si trova un unico regime stazionario caratterizzato da elevate temperature di esercizio del reattore.

I regimi stazionari stabili, caratterizzati da più elevate temperature di esercizio del reattore, corrispondono alla completa ossidazione del reagente A, ed individuano, pertanto, condizioni di esercizio indesiderate (fig. 2.6.1b). L'analisi biforcazionale del sistema individua nei punti stazionari del ramo stabile caratterizzato da basse temperature di esercizio, condizioni di parziale ossidazione. In particolare, in condizioni di regime stazionario stabile, la massima resa del prodotto intermedio di parziale ossidazione B si trova in corrispondenza del punto di biforcazione sella nodo S_1 . Pertanto, al fine di massimizzare la produzione del prodotto di parziale ossidazione B, è necessario esercire il reattore in condizioni di regime stazionario corrispondenti del ramo stabile inferiore, in prossimità del punto di biforcazione sella nodo S_1 .

Quando, tuttavia, il sistema è esercito nelle condizioni di funzionamento descritte, una perturbazione dei parametri operativi e/o l'intervento di disturbi può indurre il raggiungimento del punto di biforcazione catastrofica S_1 , portando alla completa ossidazione del reagente A, e ad un improvviso ed ampio incremento della temperatura di esercizio del reattore.

In figura 2.6.2 sono riportati i risultati di una simulazione numerica del sistema effettuata al crescere della temperatura di alimentazione θ_{in} , a partire da valori per i quali è presente solo un regime stazionario stabile di bassa conversione. In seguito al raggiungimento del punto di biforcazione sella nodo catastrofica S_1 (sezione (I)) si registra una discontinua ed ampia variazione della temperatura di esercizio del reattore.

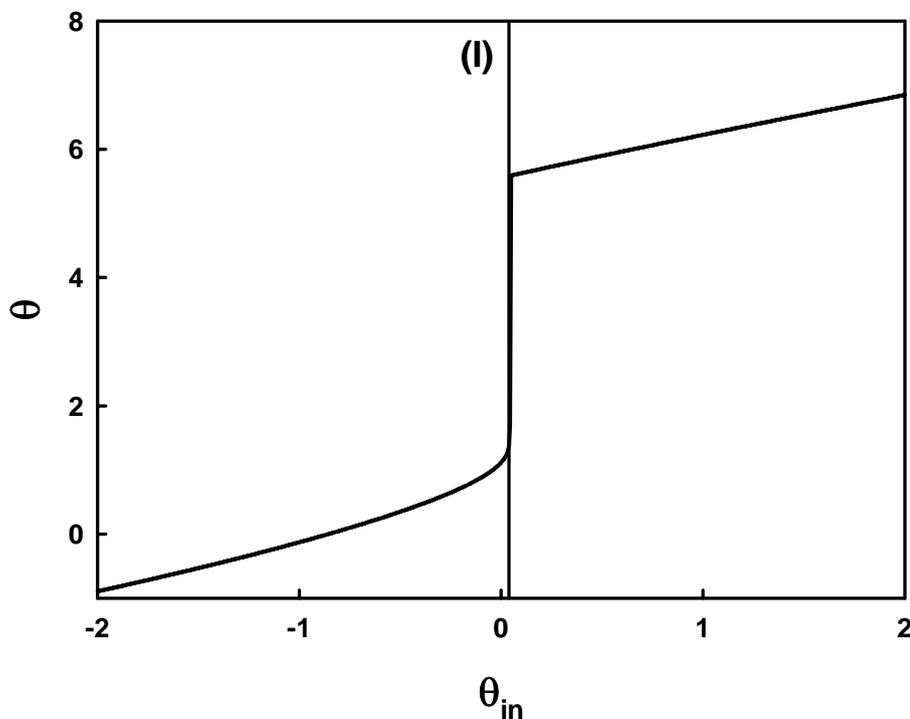


fig. 2.6.2 Andamento della temperatura di esercizio del reattore al crescere della temperatura di alimentazione.

Il punto di biforcazione S_1 , portando ad una brusca ed ampia crescita della temperatura di esercizio, individua una condizione di rischio rilevante. Risulta chiaro come il punto di biforcazione sella nodo S_1 descriva condizioni critiche di runaway termico.

Ai fini del controllo del sistema di processo appare, pertanto, particolarmente adeguata la modificazione del comportamento biforcazionale del sistema attraverso l'applicazione di metodologie di controllo di biforcazioni. In particolare, risulta opportuna una eliminazione del punto di biforcazione sella nodo S_1 corrispondente di condizioni critiche di runaway termico. In figura 2.6.3 sono riportati, al variare del parametro di biforcazione θ_{in} , il diagramma delle soluzioni

di regime stazionario (linea continua) ed un auspicabile comportamento biforcazionale del sistema. La determinazione del nuovo ramo di soluzioni di regime stazionario, riportato in figura 2.6.3, garantisce, al crescere del parametro di biforcazione, un graduale incremento della temperatura di esercizio del reattore, prevenendo lo sviluppo di fenomeni di runaway termico.

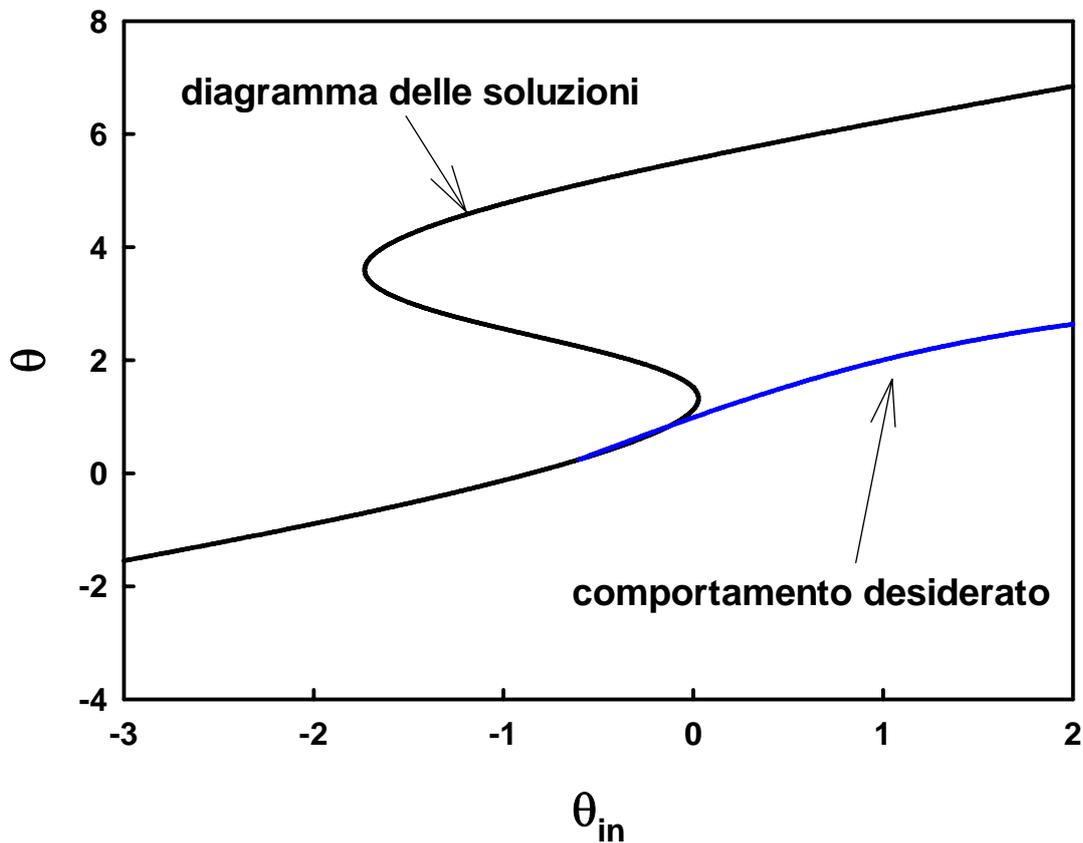


fig. 2.6.3 Comportamento biforcazionale desiderato al variare del tempo di permanenza θ_{in} .

Ai fini della determinazione del comportamento biforcazionale desiderato riportato in figura 2.6.3, è stato sviluppato, attraverso l'applicazione della tecnica del bifurcation tailoring, un sistema di controllo in anello aperto che utilizza come variabile manipolabile la temperatura del fluido refrigerante θ_c circolante nella camicia esterna al reattore. In figura 2.6.4 è riportato uno schema del sistema di controllo in anello aperto.

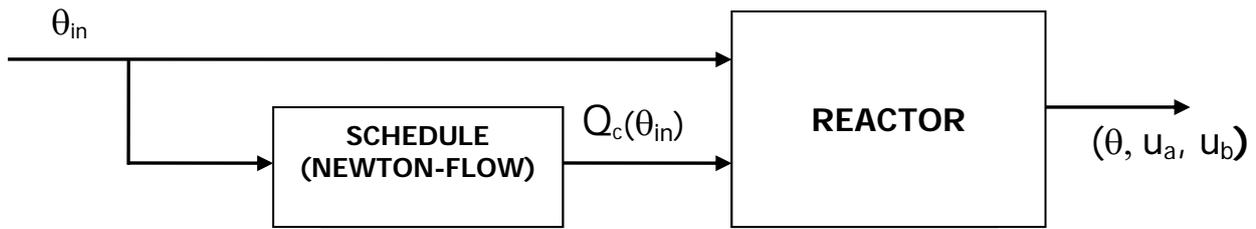


fig. 2.6.4 Schema del sistema di controllo in anello aperto sviluppato attraverso bifurcation tailoring.

Variazioni nel tempo del parametro di biforcazione θ_{in} sono segnalate ad un software di integrazione numerica, che attraverso l'applicazione dell'algoritmo di Newton, effettua una valutazione della legge di controllo $\theta_c(\theta_{in})$ al corrente valore del parametro di biforcazione θ_{in} , ridimensionando opportunamente l'azione del dispositivo di scheduling.

La figura 2.6.5(a) descrive, al variare del parametro di biforcazione θ_{in} , l'azione del unità di controllo in anello aperto. E' mostrata, in funzione di θ_{in} , l'andamento della portata del fluido refrigerante richiesta al fine di mantenere il comportamento biforcazionale desiderato.

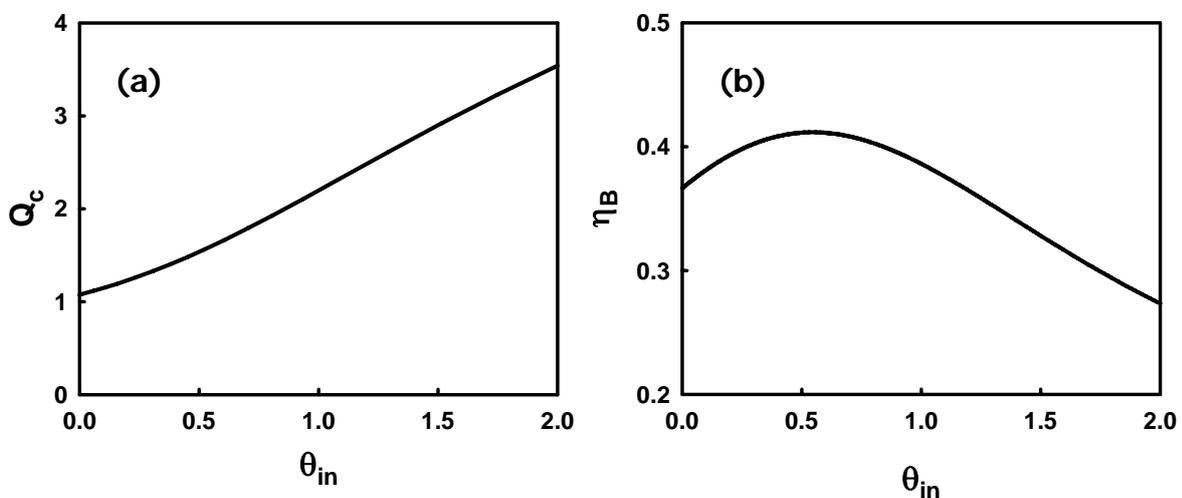


fig. 2.6.5 (a) Andamento della temperatura del fluido refrigerante imposto dall'unità di scheduling al variare della temperatura di alimentazione θ_{in} ; (b) andamento della resa del prodotto intermedio corrispondente al desiderato comportamento termico del reattore.

La portata di fluido refrigerante richiesta al fine di garantire il comportamento biforcazionale desiderato risulta crescente in funzione della temperatura di alimentazione. Intendendo contenere la crescita della temperatura di esercizio del reattore è infatti necessario rimuovere, al crescere della temperatura di alimentazione, potenze termiche maggiori, incrementando quindi la portata di fluido refrigerante. In figura 2.6.5(b) è mostrato l'andamento della resa del prodotto di parziale

ossidazione corrispondente al ramo di soluzioni di regime desiderato. Risulta chiaro come la resa del prodotto intermedio non subisca forti variazioni anche rispetto ad ampi incrementi della temperatura di alimentazione.

In figura 2.6.6(a) sono riportati i risultati di una simulazione numerica del sistema controllato in anello aperto, effettuata al crescere del parametro di biforcazione θ_{in} , partendo da valori per i quali è presente, nel sistema non controllato (fig. 2.6.1), solo una soluzione di regime stazionario di bassa conversione.

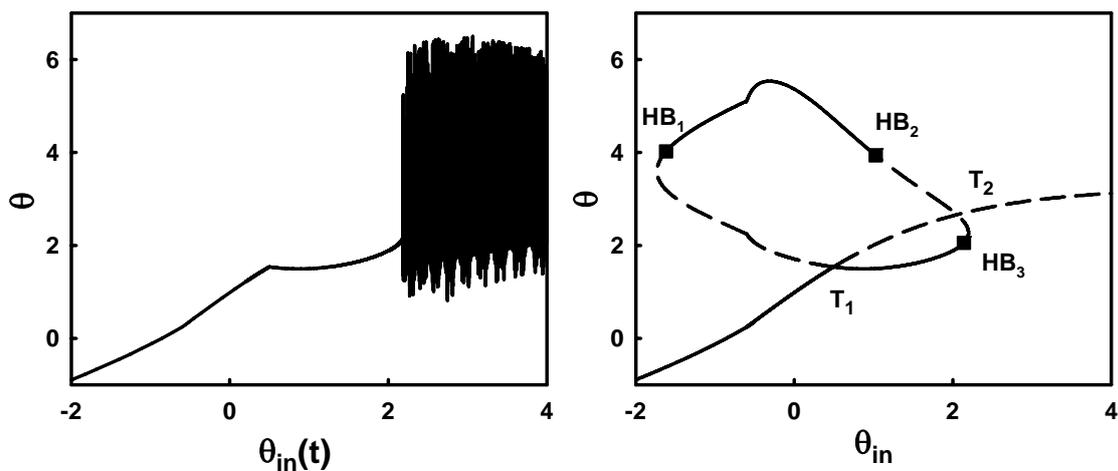


fig. 2.6.6 (a) Andamento della temperatura di esercizio del reattore controllato in anello aperto al del crescere della temperatura di alimentazione θ_{in} ; (b) Diagramma delle soluzioni di regime stazionario del sistema controllato in anello aperto al variare della temperatura di alimentazione θ_{in} .

I risultati riportati in figura 2.6.6(a) mostrano che l'evoluzione della temperatura di esercizio del reattore controllato in anello aperto non segue, al variare di θ_{in} , il comportamento biforcazionale desiderato (fig. 2.6.3). Quando la temperatura di alimentazione raggiunge il valore $\theta_{in} = 0.49$ si osserva una deviazione della temperatura di esercizio del reattore rispetto al comportamento biforcazionale desiderato (fig. 2.6.3). Al crescere della temperatura di alimentazione si trova, inoltre, la nascita di ampie oscillazioni della temperatura di esercizio del reattore.

Le ragioni della deviazione del comportamento del sistema controllato in anello aperto rispetto al comportamento biforcazionale atteso, risiedono nei limiti di applicazione della tecnica del bifurcation tailoring. Si è osservato nel paragrafo 2.3 che il bifurcation tailoring è una tecnica di controllo in anello aperto e non è, quindi, in grado di assicurare stabilità ed unicità delle soluzioni di regime desiderate.

Il comportamento descritto in figura 2.6.6(a) risulta chiaro quando si esamina il diagramma delle soluzioni di regime stazionario del reattore sottoposto all'azione del sistema di controllo in anello aperto (fig. 2.6.6(b)).

Il ramo di soluzioni di regime stazionario desiderato, per effetto della presenza di punti di biforcazione transcritica (T_1, T_2), risulta instabile all'interno di un ampio intervallo di variazione del parametro di biforcazione θ_{in} . Si trovano inoltre ulteriori rami di soluzioni di regime indesiderati. La presenza di biforcazioni di Hopf (HB_1, HB_2, HB_3) giustifica la nascita di ampie oscillazioni della temperatura di esercizio riscontrate nell'analisi del comportamento termico del reattore controllato in anello aperto.

Al fine di garantire stabilità del ramo di soluzioni di regime stazionario atteso, al variare del parametro di biforcazione θ_{in} è introdotto, accanto ad un dispositivo di controllo in anello aperto, un sistema di controllo in retroazione. In figura 2.6.7 è mostrato uno schema del nuovo sistema di controllo.

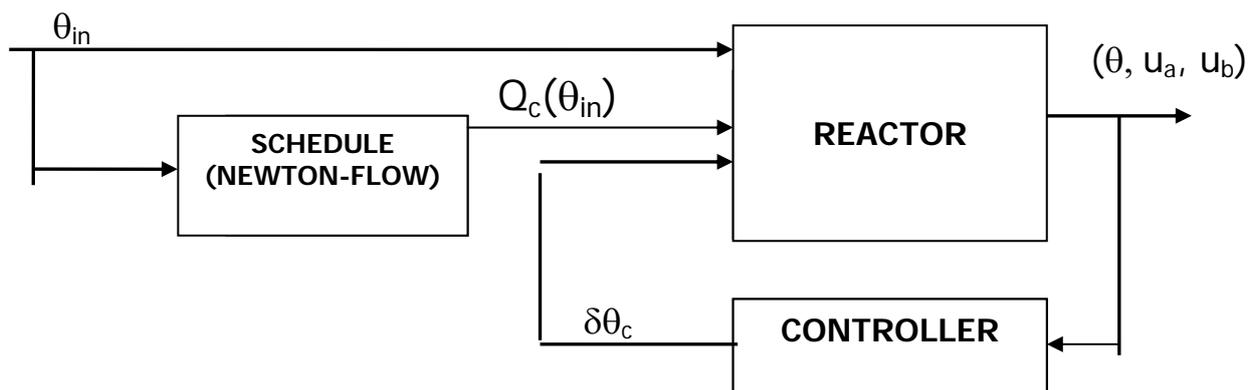


fig. 2.6.7 Schema del sistema di controllo in anello chiuso.

Il sistema di controllo in retroazione è stato sviluppato attraverso implementazione della metodologia di minimal control synthesis (par. 2.4).

In figura 2.6.8 sono riportati i risultati di una simulazione numerica del reattore sottoposto all'azione del sistema di controllo descritto in figura 2.6.7.

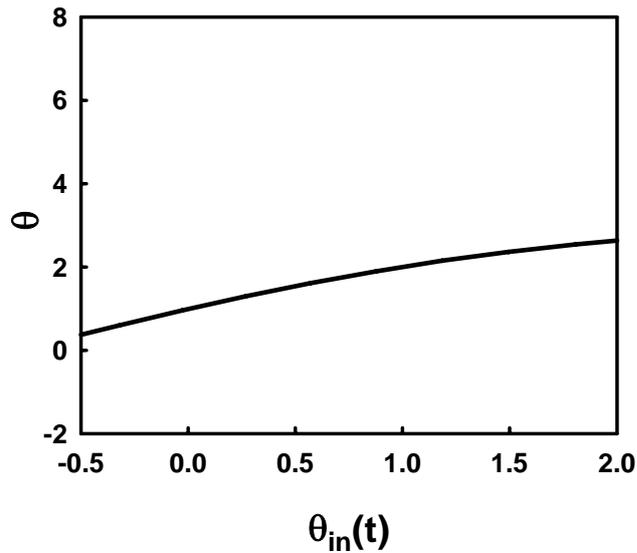


fig. 2.6.8 Andamento della temperatura di esercizio del reattore controllato in anello chiuso al variare della temperatura di alimentazione θ_{in} .

Si trova che l'evoluzione nel tempo della temperatura di esercizio del reattore controllato segue perfettamente il ramo delle soluzioni di regime stazionario desiderato.

La stabilità del comportamento biforcazionale desiderato è raggiunta al prezzo di variazioni nel tempo della temperatura del fluido refrigerante, indotte dal sistema di controllo a retroazione. La figura 2.6.9 descrive le variazioni della temperatura del fluido refrigerante indotte dal sistema di controllo a retroazione, quando il parametro di biforcazione θ_{in} è variato lentamente nel tempo. L'azione del dispositivo di controllo in retroazione è confinata agli intervalli di variazione del parametro di biforcazione in corrispondenza dei quali il reattore controllato in anello aperto risulta instabile (fig. 2.6.6). L'implementazione della strategia di minimal control synthesis garantisce, in particolare, stabilità delle soluzioni di regime desiderate attraverso una legge di controllo della temperatura di fluido refrigerante non aggressiva. Si trovano, infatti, modeste variazioni nel tempo della temperatura di fluido refrigerante al variare del parametro di biforcazione.

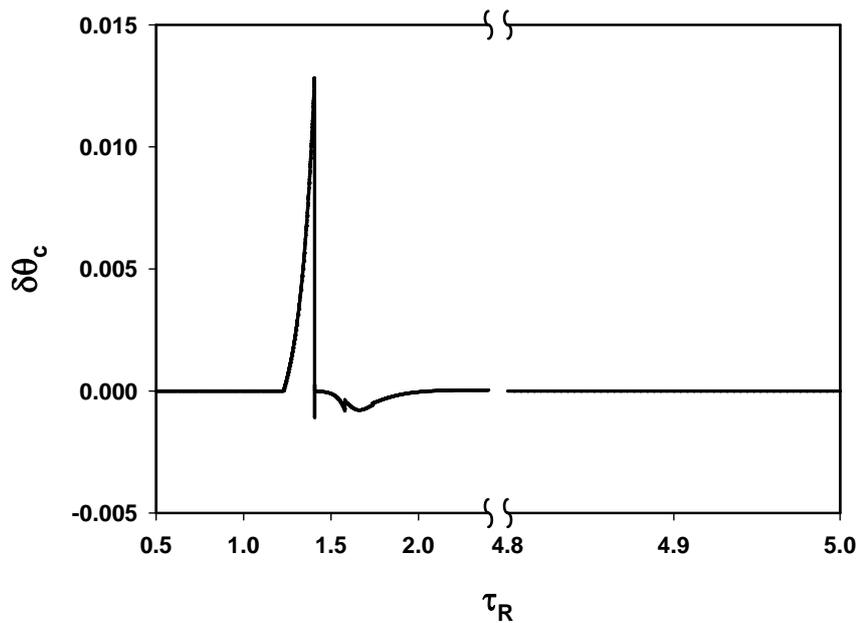


fig. 2.6.9 Variazioni della temperatura del fluido refrigerante imposte dal dispositivo di controllo a retroazione della temperatura di alimentazione θ_{in} .

2.7 Conclusioni

E' stata riportata, in questo capitolo, una accurata descrizione della metodologia di bifurcation tailoring [Lowenberg, 1998a]. La metodologia di bifurcation tailoring accompagna, nello sviluppo della teoria del controllo delle biforcazioni, un significativo cambiamento degli obiettivi di controllo. L'applicazione di metodologie di controllo di biforcazioni locali (par. 1.5, 1.6) risulta efficace ai fini della modificazione del comportamento asintotico di un sistema dinamico non lineare in prossimità di punti di biforcazione. La metodologia di bifurcation tailoring è indirizzata alla modificazione del comportamento asintotico di un sistema dinamico non lineare in un intervallo di variazione finito dei parametri.

E' stata illustrata una innovativa estensione della metodologia di bifurcation tailoring ai fini del controllo di fenomeni di runaway termico nella gestione di processi reattivi esotermici. Condizioni critiche di runaway termico sono raggiunte, nell'esercizio di un reattore chimico, quando una piccola variazione dei parametri operativi induce un notevole aumento della temperatura del sistema reattivo. L'analisi non lineare di modelli matematici di reattori chimici ha mostrato come fenomeni di runaway termico siano conseguenti del raggiungimento di punti di biforcazione catastrofica (e.g. punti di biforcazione di Hopf subcritici, sella nodo catastrofici). In questa direzione, la metodologia di bifurcation tailoring è stata implementata ai fini della eliminazione di un punto di biforcazione sella nodo catastrofica corrispondente della determinazione di condizioni critiche di runaway termico nella gestione di un processo reattivo di parziale ossidazione. L'implementazione in anello

aperto della metodologia di bifurcation tailoring ha garantito la determinazione del ramo di soluzioni di regime desiderate al variare del parametro di biforcazione (i.e. disturbo). Ai fini della stabilizzazione delle soluzioni di regime desiderate al variare del parametro di biforcazione è stato implementata, accanto ad una legge di controllo in anello aperto, una legge di controllo in retroazione. La determinazione della legge di controllo in retroazione è stata condotta attraverso una strategia di controllo adattativo, definita minimal control synthesis [Stoten, D.P. and Benchoubane].

Capitolo 3

Ottimizzazione del comportamento biforcazionale

Frequentemente, nella gestione di reattori chimici, si trovano vincoli di determinazione delle variabili manipolabili e/o delle variabili di stato. In particolare, vincoli di determinazione delle variabili manipolabili esprimono limiti di realizzabilità della legge di controllo (e.g. limite inferiore della temperatura di fluido refrigerante, limite di portata di una pompa di alimentazione). Quando essi siano violati, gli attuatori (e.g. valvole, pompe) risultano incapaci di garantire una corretta implementazione della legge di controllo, e possono, pertanto, avere luogo fenomeni indesiderati caratteristici del reattore non controllato (e.g. nascita di oscillazioni autonome della temperatura di esercizio, fenomeni di runaway termico). Vincoli di determinazione delle variabili di stato esprimono limiti di esercizio di reattori chimici (e.g. limiti di infiammabilità, temperatura di disattivazione del catalizzatore) e se violati possono condurre, ad esempio, alla formazione di prodotti indesiderati, esplosioni o alla estinzione del processo reattivo.

In questo capitolo, è presentata una nuova metodologia di controllo delle biforcazioni, definita metodologia di ottimizzazione del comportamento biforcazionale di un sistema dinamico non lineare. La metodologia illustrata consente di evitare il raggiungimento di punti di biforcazione catastrofica indotti da disturbi misurabili lentamente variabili attraverso ottimizzazione del diagramma delle soluzioni di regime stazionario e, contestualmente, garantisce il rispetto di vincoli di determinazione delle variabili di stato e/o delle variabili manipolabili.

La metodologia di ottimizzazione del comportamento biforcazionale di un sistema dinamico non lineare trova origine nella incapacità di gestione, attraverso implementazione della metodologia di bifurcation tailoring (cap. 3), di vincoli di determinazione delle variabili di stato e/o delle variabili manipolabili. Pertanto, sono preliminarmente illustrati, nel paragrafo 3.1, i limiti della metodologia di bifurcation tailoring ai fini della gestione di sistemi di processo dove si trovino vincoli di determinazione delle variabili di stato e delle variabili manipolabili. Nel paragrafo 3.2, è descritta la metodologia di ottimizzazione del comportamento biforcazionale di un sistema dinamico non lineare. Nel paragrafo 3.3, sono illustrate linee guida ai fini della determinazione di una funzione dei costi di processo. Nel paragrafo 3.4, sono illustrati i risultati dell'implementazione della metodologia di ottimizzazione del comportamento biforcazionale di un sistema dinamico non lineare ai fini del controllo di fenomeni di runaway termico nella gestione di un processo reattivo di parziale ossidazione.

3.1 Determinazione di vincoli di processo: limiti di applicazione della metodologia di bifurcation tailoring

Nel paragrafo 2.6 è stato esaminato il problema di controllo di un processo di parziale ossidazione condotto all'interno di reattore CSTR refrigerato. L'analisi biforcazionale del sistema, al variare della temperatura di alimentazione, ha mostrato la presenza di una biforcazione sella nodo catastrofica, responsabile di fenomeni di runaway termico. Attraverso implementazione della tecnica del bifurcation tailoring si è sviluppato un sistema di controllo in anello aperto in grado di modificare la struttura del diagramma delle soluzioni di regime del sistema. Come variabile manipolabile si è assunta la portata di fluido refrigerante. Si è realizzato in questo modo, al variare del parametro di biforcazione, un auspicabile andamento della temperatura di esercizio del reattore in condizioni di regime stazionario. Successivamente, una stabilizzazione dei regimi stazionari desiderati è stata effettuata attraverso l'introduzione di un sistema di controllo in anello chiuso. Il sistema di controllo in anello chiuso è stato realizzato mediante l'applicazione di una particolare tecnica di controllo adattativo, definita minimal control synthesis.

La tecnica del bifurcation tailoring si è rivelata efficace nel garantire una graduale crescita della temperatura di esercizio del reattore al variare del parametro di biforcazione. Non sono stati tuttavia considerati, nell'applicazione della tecnica del bifurcation tailoring, effetti inerenti alla resa del prodotto intermedio desiderato. Assegnato un desiderato andamento della temperatura di esercizio del reattore in condizioni di regime stazionario, il corrispondente andamento della resa del prodotto intermedio desiderato risultava univocamente determinato ed era valutato attraverso la risoluzione di un sistema di equazioni non lineari. Pertanto, quando non sia preliminarmente condotta un'accurata scelta dell'andamento della temperatura di esercizio del reattore in condizioni di regime stazionario, potrebbero trovarsi inaccettabili riduzioni della resa del prodotto intermedio desiderato al variare del parametro di biforcazione.

In figura 3.1.1(d) sono riportati i profili della resa del prodotto intermedio desiderato corrispondenti di tre differenti andamenti della temperatura di esercizio del reattore in condizioni di regime stazionario (fig. 3.1.1(b)).

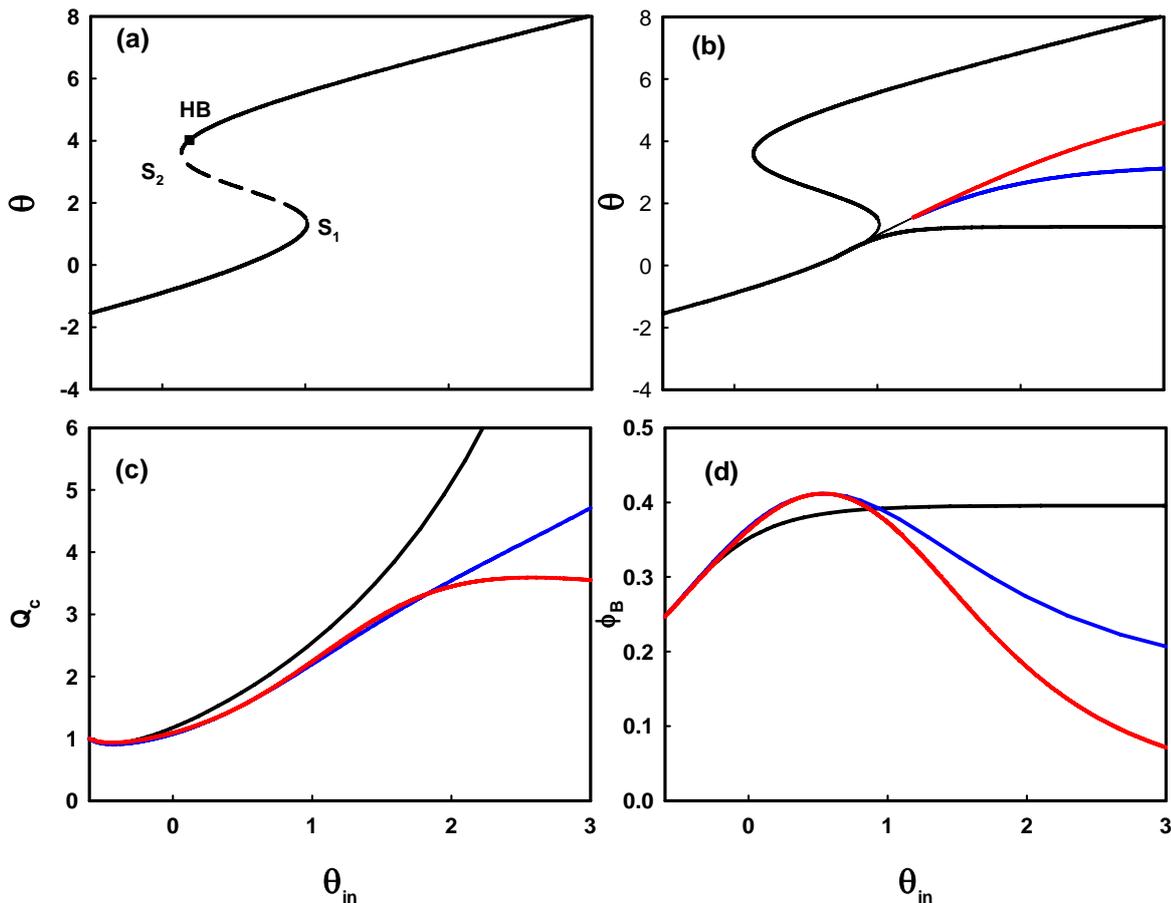


fig. 3.1.1 (a) Diagramma delle soluzioni di regime al variare della temperatura di alimentazione; (b) diagrammi delle soluzioni di regime desiderati al variare della temperatura di alimentazione; (c) andamenti della portata di fluido refrigerante imposti dal dispositivo di scheduling; andamenti della resa del prodotto intermedio di reazione.

Si trovano in funzione dell'andamento della temperatura di esercizio imposte significative variazioni dei profili di resa. Gli andamenti della temperatura di esercizio del reattore in blu ed in rosso (fig. 3.1.1(b)) risultano inadeguati ai fini del raggiungimento degli obiettivi di processo producendo eccessive riduzioni della resa del prodotto di parziale ossidazione al variare del parametro di biforcazione.

Non sono stati inoltre esaminati, nell'applicazione della tecnica del bifurcation tailoring, problematiche inerenti alla determinazione di vincoli nelle variabili manipolabili. Variabili di processo presentano inevitabilmente intervalli di variazione limitati. E' ad esempio impensabile ridurre la temperatura di alimentazione di un fluido refrigerante al disotto della temperatura ambiente quando un impianto a ciclo frigorifero non risulti disponibile. Quando le variazioni delle variabili manipolabili richieste da un dispositivo di controllo eccedano questi limiti, la legge di controllo diviene inattuabile ed il dispositivo di controllo si dice in saturazione. In condizioni di saturazione del dispositivo di controllo, il comportamento dinamico del sistema di processo è quello di un sistema non controllato e possono, pertanto, verificarsi indesiderati fenomeni non lineari (e.g.

molteplicità di soluzioni di regime, raggiungimento di punti di biforcazione catastrofica, fenomeni di runaway termico). Nell'applicazione della tecnica del bifurcation tailoring illustrata al capitolo 3 la legge di controllo in anello aperto, essenziale ai fini della modificazione del comportamento biforcazionale del reattore, risultava univocamente determinata una volta assegnato un andamento della temperatura di esercizio del reattore in condizioni di regime stazionario. Si trova, tuttavia, che l'andamento imposto influenza in modo significativo la determinazione della legge di controllo, potendo rendere eventualmente inattuabile l'azione del dispositivo di scheduling. In figura 3.1.1(c) sono riportati gli andamenti della portata di fluido refrigerante imposti dal dispositivo di controllo in anello aperto quando i tre andamenti della temperatura di esercizio del reattore in condizioni di regime stazionario descritti in figura 3.1.1(b) siano imposti. Si trovano significative variazioni della legge di scheduling in funzione dell'andamento della temperatura di esercizio del reattore. Il profilo di temperatura in nero (fig. 3.1.1(b)), che pure, si è visto, assicura un auspicabile profilo della resa del prodotto di parziale ossidazione, produce una legge di scheduling crescente con maggiore rapidità al variare del parametro di biforcazione.

La pronunciata sensitività del profilo di resa e della legge di scheduling rispetto alla scelta dell'andamento della temperatura di esercizio del reattore in condizioni di regime stazionario suggeriscono una modificazione della metodologia di bifurcation tailoring. In particolare appare necessaria una ottimizzazione della scelta del comportamento biforcazionale del sistema controllato in funzione degli obiettivi di processo e nella salvaguardia dell'attuabilità della legge di controllo.

Nel corso del successivo paragrafo è, pertanto, introdotta una modificazione della tecnica del bifurcation tailoring dove la determinazione del comportamento biforcazionale del sistema controllato è condotta attraverso lo sviluppo di un algoritmo di ottimizzazione.

3.2 Metodologia di ottimizzazione del comportamento biforcazionale

Si prenda in esame il sistema dinamico

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = F(x, p, q) \\ y = H(x) \end{cases} \quad (3.2.1)$$

con $x \in \mathbb{R}^n$ vettore delle variabili di stato, $y \in \mathbb{R}^m$ vettore delle variabili di uscita. In (3.1.1) $p \in \mathbb{R}$ deve intendersi come vettore dei parametri di biforcazione (disturbi), mentre $q \in \mathbb{R}^k$ è il vettore di tutti gli altri parametri operativi del sistema (variabili manipolabili). L'applicazione della tecnica del bifurcation tailoring prevede la determinazione di una legge di controllo $q(p)$ tale per cui

il vettore delle variabili di uscita y del sistema controllato presenti un prefissato diagramma delle soluzioni di regime, quando il parametro di biforcazione p varia in un dato intervallo, ovvero risulti:

$$y = g(p, t) \quad \text{con } p \in [p_a, p_b] \quad (3.2.2)$$

dove per ogni $p \in [p_a, p_b]$, $g(p, t)$ può definire punti stazionari (nel caso in cui $y = g(p)$ non dipende dal tempo), regimi periodici, quasi periodici o regimi caotici (nel caso in cui $y = g(p, t)$ è funzione del tempo).

E' stata ampiamente discussa, al paragrafo 2.6, l'applicazione della tecnica del bifurcation tailoring di soluzioni di regime stazionario al controllo di un reattore di parziale ossidazione. L'analisi biforcazionale del reattore non controllato ha mostrato, al variare della temperatura di alimentazione della corrente reagente, una biforcazione sella nodo catastrofica responsabile di fenomeni di runaway termico. Attraverso l'applicazione della tecnica del bifurcation tailoring si è sviluppato un sistema di controllo in anello aperto in grado di modificare la struttura del diagramma delle soluzioni di regime del sistema. Come variabile manipolabile q si è assunta la portata del fluido refrigerante Q_c , mentre come variabile di uscita y la temperatura di esercizio del reattore θ . La legge di scheduling $Q_c(\theta_{in})$ poteva determinarsi fuori linea attraverso l'applicazione di algoritmi di continuazione parametrica, o in linea attraverso l'implementazione di un algoritmo di ottimizzazione (e.g. algoritmo di Newton). La particolare struttura biforcazionale del sistema dinamico esaminato assicurava la determinazione univoca della legge di scheduling $Q_c(\theta_{in})$ quando fosse definito, per la temperatura di esercizio del reattore, un auspicabile andamento in funzione della temperatura di alimentazione della miscela reagente θ_{in} .

Le motivazioni illustrate al precedente paragrafo suggeriscono una modificazione della tecnica del bifurcation tailoring descritta al capitolo 2. In particolare, la determinazione della legge di scheduling $q = q(p)$ e del comportamento biforcazionale $y = g(p, t)$ saranno condotte attraverso la risoluzione di un problema di ottimizzazione vincolata. Pertanto, definita una funzione dei costi di processo:

$$\varphi = \varphi(x, p, q) \quad (3.2.2)$$

l'obiettivo è determinare al variare del parametro di biforcazione p in un dato intervallo, una legge di controllo in anello aperto $q = q(p)$ ed una funzione vettoriale $x = g(p)$ tale per cui risulti:

$$(g(p), q(p)) = \min_{x,q} \varphi(x, p, q) \quad p \in [p_a, p_b] \quad (3.2.3)$$

$$\text{t.c. } F(g(p), p, q(p)) = 0 \quad (3.2.4)$$

$$c(x, p, q) \leq 0 \quad (3.2.5)$$

$$l_i < x_i < m_i \quad i \in \{1, \dots, n\} \quad (3.2.6)$$

$$r_i < q_i < w_i \quad i \in \{1, \dots, m\} \quad (3.2.7)$$

Il sistema di equazioni non lineari (3.2.4) vincola le determinazioni della funzione vettoriale $x = g(p)$ e della legge di scheduling $q = q(p)$ allo spazio delle soluzioni di regime stazionario del sistema dinamico (3.2.1). Le (3.2.5) descrivono un sistema di disuguaglianze non lineari o lineari nel vettore delle variabili di stato x , nel parametro di biforcazione p , e nel vettore delle variabili manipolabili q . Le coppie l_i, m_i ed r_i, w_i in (3.2.6)-(3.2.7) descrivono, rispettivamente, limiti fisici e/o tecnologici alla determinazione della i -sima variabile di stato x_i e della i -sima variabile manipolabile q_i del sistema dinamico (3.2.1). Ad esempio, nella ricerca della soluzione del problema di ottimizzazione delle condizioni operative di funzionamento di una colonna di distillazione, le frazioni molari delle specie chimiche costituenti la corrente di alimentazione dovranno essere vincolate a variare in colonna all'interno dell'intervallo $[0,1]$. D'altra parte, quando il raggiungimento di purezze eccessive della specie chimica maggiormente volatile ne accompagna la decomposizione in corrispondenza di temperature prossime alla sua temperatura di ebollizione, dovrà essere fissato un limite superiore alla determinazione della frazione molare di tale specie chimica in corrispondenza del piatto di testa della colonna di distillazione.

Quando la funzione dei costi e/o la funzione vettoriale c risultino non lineari (*risp.* lineari) le (3.2.3)-(3.2.7) descrivono un problema di programmazione non lineare (*risp.* lineare). Una chiara ed esauriente descrizione degli algoritmi numerici di risoluzione di problemi di programmazione lineare e non lineare tradizionalmente implementati ai fini del controllo di sistemi di processo è riportata in [Bryson and Ho, 1976; Floudas, 1999].

Nel seguito si esaminerà l'eventualità in cui risultino assenti nella formulazione del problema di ottimizzazione vincoli di disuguaglianza non lineari descritti in (3.2.5). Il problema di ottimizzazione sarà pertanto proposto nella seguente forma:

$$(g(p), q(p)) = \min_{x,q} \varphi(x, p, q) \quad p \in [p_a, p_b] \quad (3.2.8)$$

$$\text{t.c. } F(g(p), p, q(p)) = 0 \quad (3.2.9)$$

$$l_i < x_i < m_i \quad i \in \{1, \dots, n\} \quad (3.2.10)$$

$$r_i < q_i < w_i \quad i \in \{1, \dots, m\} \quad (3.2.11)$$

In figura (3.2.1) è mostrato uno schema del sistema di controllo in anello aperto basato su ottimizzazione del comportamento biforcazionale del sistema dinamico (3.2.1).

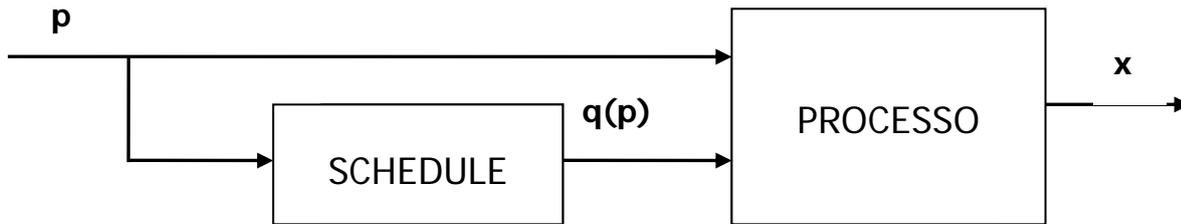


fig. 3.2.1 Schema del sistema di processo controllato in anello aperto.

La struttura del sistema di controllo in anello aperto è la stessa mostrata al capitolo 3 nella descrizione della tecnica del bifurcation tailoring. Variazioni nel tempo del parametro di biforcazione (disturbo) p sono rilevate attraverso misurazioni in linea e segnalate ad un'unità di schedule che produce, attraverso la risoluzione del problema di ottimizzazione (3.2.8)-(3.2.11), l'implementazione della legge di controllo $q(p)$. In funzione della complessità del modello matematico (3.2.1) descrivente la dinamica del sistema di processo e della non linearità dell'indice di prestazione ϕ la risoluzione del problema di ottimizzazione (3.2.8)-(3.2.11) richiederà un intervallo di tempo più o meno lungo. Pertanto, anche quando frequenti misure del parametro di biforcazione (disturbo) p risultino disponibili, si troverà un ritardo nell'implementazione della legge di scheduling $q(p)$ rispetto all'istante di variazione del parametro di biforcazione p . Definito t_s (istante di campionamento) l'intervallo di tempo trascorso tra la variazione del parametro di biforcazione (disturbo) p e la successiva implementazione della legge di scheduling, le equazioni governanti la dinamica del sistema di processo controllato in anello aperto (fig. 3.2.1) assumono la forma:

$$\frac{dx(t)}{dt} = F(x(t), p(t), q(p(t_{k-1}))) \quad \text{t.c.} \quad (g(p(t)), q(p(t))) = \min_{x,q} \phi(x, p(t_k), q) \quad (3.2.12)$$

$$y = H(x(t)) \quad \text{t.c.} \quad F(g(p), p, q(p)) = 0 \quad (3.2.13)$$

$$l_i < g_i(p(t_k)) < m_i \quad i \in \{1, \dots, n\} \quad (3.2.14)$$

$$t_k \in [t_k, t_k + t_s] \quad k \in \mathbb{N} \quad r_i < q_i(p(t_k)) < w_i \quad i \in \{1, \dots, m\} \quad (3.2.15)$$

In questa direzione, l'efficienza del sistema di controllo è subordinata alla semplicità del modello matematico (3.2.1) impiegato ai fini della descrizione del comportamento dinamico del sistema di processo. Descrizioni ai principi primi (i.e. basati sui principi di conservazione di massa, energia e quantità di moto) delle equazioni governanti la dinamica di sistemi dell'ingegneria chimica conducono frequentemente alla formulazione di modelli matematici non lineari di elevate dimensioni od infinito dimensionali (i.e. descritti attraverso sistemi di equazioni differenziali alle derivate parziali), inadeguati ad una implementazione in linea di algoritmi di controllo. Innumerevoli metodologie di riduzione della dimensione di modelli matematici sono state proposte in letteratura nel corso degli ultimi decenni. Il problema di riduzione della dimensione di complessi modelli matematici sviluppati attraverso formulazioni ai principi primi sarà affrontato al capitolo 8. Nel successivo paragrafo, la metodologia di ottimizzazione del comportamento biforcazionale di un sistema dinamico illustrata, sarà discussa attraverso un'applicazione al modello matematico di un processo di parziale ossidazione descritto in (2.6.3)-(2.6.6).

La metodologia di ottimizzazione del comportamento biforcazionale illustrata è una metodologia di controllo in anello aperto ed incontra, pertanto, gli stessi limiti individuati nella descrizione della tecnica del bifurcation tailoring. La metodologia non è in grado di assicurare stabilità delle soluzioni di regime desiderato e non fornisce alcuna garanzia in merito all'unicità delle soluzioni di regime desiderate, ad un prefissato insieme di valori dei parametri. Un ulteriore limite risiede nelle incertezze delle previsioni del modello matematico del sistema di processo utilizzato ai fini della determinazione della legge di controllo. Un sistema di controllo in anello aperto garantisce un controllo "Perfetto" [Ogunnaike and Ray, 1994] quando una esatta descrizione delle equazioni governanti la dinamica del sistema di processo risulti disponibile. Questa assunzione risulta improponibile in applicazioni industriali.

Al fine di garantire stabilità dei rami delle soluzioni di regime desiderate e robustezza del sistema di controllo rispetto ad eventuali disturbi ed incertezze nelle previsioni del modello matematico, si propone, pertanto, in analogia alla formulazione del problema del bifurcation tailoring l'introduzione di un sistema di controllo in retroazione.

In figura 3.2.2 si riporta una descrizione del sistema di controllo risultante dell'accoppiamento del sistema di controllo in anello aperto, descritto in figura 3.2.1, e di un sistema di controllo in retroazione.

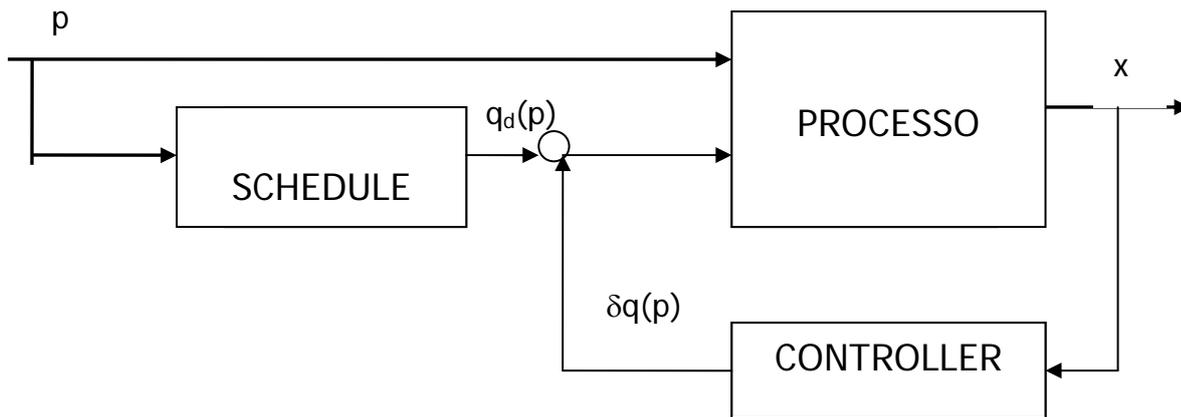


fig. 3.2.2 Schema del sistema di processo controllato attraverso schedule in anello aperto e controller in retroazione.

Linee generali di progettazione del sistema di controllo in retroazione sono riportate al capitolo 3, e non saranno qui ripetute. Nel seguito, in luogo della tecnica di minimal control synthesis [Stoten, D. P. and Benchoubane, H., 1990a, 1990b; Stoten and di Bernardo, 1996] indicata al paragrafo 4 nell'applicazione della tecnica del bifurcation tailoring, sarà implementata, ai fini della progettazione del sistema di controllo in anello chiuso, una metodologia di controllo adattativo di gain scheduling [Rugh and Smamma, 2000] basata su controllo ottimo LQR (i.e. linear quadratic regulator) [Bryson and Ho, 1976].

3.3 Definizione della funzione dei costi di processo

Il primo passo nell'applicazione della metodologia di ottimizzazione del comportamento biforcazionale di un sistema dinamico è la determinazione di una funzione dei costi di processo (3.2.2). Una valutazione della funzione dei costi di processo sarà condotta attraverso le seguenti considerazioni.

Si prenda in esame il sistema di processo descritto attraverso le equazioni di evoluzione (3.2.1). Si assuma che una ottimizzazione globale rispetto ai parametri operativi e delle variabili di stato del sistema di processo sia stata preliminarmente condotta, riportando la determinazione ottimale delle condizioni operative di funzionamento e delle variabili di stato del sistema corrispondente della seguente soluzione di regime stazionario:

$$(x, y, p, q) \equiv (x^*, y(x^*), p^*, q^*) \quad (3.3.1)$$

Variazioni nel tempo del vettore dei parametri di biforcazione (i.e. disturbi) p produrranno deviazioni rispetto alla soluzione di regime (3.3.1), in particolare nella determinazione del vettore

delle variabili di stato x e, quindi, nel vettore delle variabili di uscita y , imponendo, ai fini della salvaguardia della sicurezza e delle prestazioni del sistema di processo, variazioni del vettore dei parametri operativi q . In questa direzione, una misura dei costi di processo può essere effettuata attraverso una valutazione della distanza nello spazio delle variabili di stato e dei parametri del sistema di processo dalla soluzione di regime descritta in (3.3.1). In particolare, si assumerà nel seguito che la funzione dei costi di processo risulti espressa attraverso la seguente forma quadratica:

$$\varphi = \varphi(x, p, q) = \sum_{i=1}^n \omega_i (x_i(t) - x_i^*)^2 + \sum_{i=1}^n \sigma_i (p_i(t) - p_i^*)^2 + \sum_{i=1}^n \lambda_i (q_i(t) - q_i^*)^2 \quad (3.3.2)$$

Le sommatorie in (3.3.2) descrivono una misura della deviazione delle determinazioni attuali del vettore delle variabili di stato x , del vettore dei parametri operativi q e del vettore dei parametri di biforcazione p , rispetto alle corrispondenti determinazioni ottimali riportate in (3.3.1). I coefficienti $\omega_i, \sigma_i, \lambda_i$ descrivono, rispettivamente, misure dell'influenza relativa sui costi di processo di variazioni dell' i -sima variabile di stato x_i , dell' i -sima variabile manipolabile q_i e dell' i -simo parametro di biforcazione p_i .

Quando l'algoritmo di controllo in (3.2.12) sia implementato e la funzione dei costi di processo sia espressa attraverso la funzione quadratica (3.3.2), pur non violando, la determinazione delle variabili manipolabili, i vincoli di saturazione in (3.2.13), limiti di attuabilità nella implementazione della legge di controllo in anello aperto sono frequentemente raggiunti. L'algoritmo di ottimizzazione è, infatti, sviluppato sulla base di misure del parametro di biforcazione p condotte in modo discreto nel corso del tempo. E' pertanto possibile che due successive implementazioni dell'algoritmo di ottimizzazione, condotte ad istanti di tempo separati da un sampling time, restituiscano determinazioni del vettore delle variabili manipolabili q eccessivamente differenti perché il sistema di controllo possa garantire la corrispondente variazione delle manipolabili nel corso del successivo sampling time. Quando ciò si verifica, si registra un eccessivo ritardo nell'azione di controllo, potendosi verificare fenomeni non lineari del sistema di processo non controllato (e.g. spegnimento del reattore, runaway termico).

Le precedente discussione motiva l'introduzione di un ulteriore termine all'interno dell'espressione 3.3.2 della funzione dei costi di processo:

$$\begin{aligned} \varphi = \varphi(x, p, q) = & \sum_{i=1}^n \omega_i (x_i(p(t_k)) - x_i^*)^2 + \sum_{i=1}^n \sigma_i (p_i(t_k) - p_i^*)^2 + \\ & + \sum_{i=1}^n \lambda_i (q_i(p(t_k)) - q_i^*)^2 + \sum_{i=1}^n \mu_i (q_i(t_k) - q_i(t_{k+1}))^2 \end{aligned} \quad (3.3.3)$$

L'ultima sommatoria nella (3.3.3) descrive una misura della variazione nel tempo del vettore delle variabili manipolabili. L'algoritmo di ottimizzazione, pertanto, procedendo ad una minimizzazione dei costi di processo, produrrà variazioni nel tempo più o meno contenute della i -sima variabile manipolabile q_i in funzione del coefficiente di peso relativo μ_i .

3.4 Controllo di un processo di parziale ossidazione attraverso ottimizzazione del comportamento biforcazionale

La metodologia di ottimizzazione del comportamento biforcazionale di un sistema dinamico illustrata al paragrafo 3.2 è applicata, nel seguito, ai fini del controllo di fenomeni di runaway termico nella gestione del processo reattivo di parziale ossidazione descritto in (2.6.3)-(2.6.6).

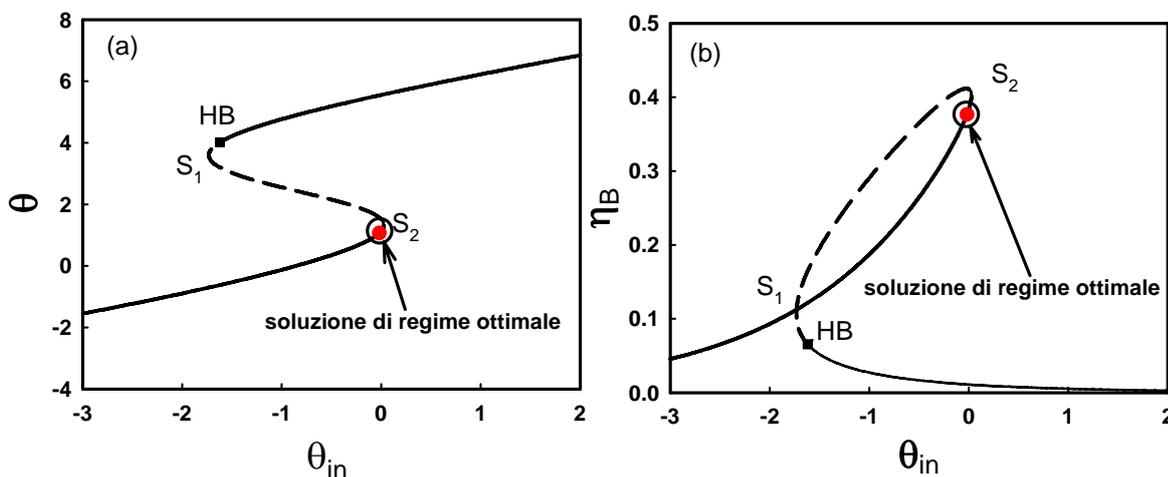


fig. 3.4.1 Diagramma delle soluzioni di regime al variare della temperatura di alimentazione; (a) temperatura di esercizio del reattore; (b) resa del prodotto intermedio di reazione.

La figura 3.4.1 descrive il diagramma delle soluzioni di regime del sistema (2.6.3)-(2.6.6) al variare della temperatura di alimentazione θ_{in} della corrente reagente. Come variabili di stato rappresentative del stato del sistema sono riportate in figura 3.4.1a la temperatura di esercizio del reattore, ed in figura 3.4.1b la resa del prodotto intermedio di parziale ossidazione. Una dettagliata discussione della struttura biforcazionale del sistema di processo è riportata al paragrafo 5.

L'analisi biforcazionale del sistema di processo mostra il raggiungimento del massimo della resa del prodotto intermedio di reazione, al variare della temperatura di alimentazione, in prossimità del punto di biforcazione sella nodo catastrofica S_2 (soluzione di regime in rosso). Si assuma, in particolare, che la soluzione di regime indicata sia risultante di una preliminare ottimizzazione globale delle condizioni operative di funzionamento e del vettore delle variabili di stato del sistema di processo.

Nel seguito, sono illustrati i risultati dell'implementazione della metodologia di ottimizzazione del comportamento biforcazionale ai fini del controllo del modello matematico di un processo di parziale ossidazione descritto in (2.6.3)-(2.6.6) in due differenti casi: a) nel caso in cui la temperatura di alimentazione θ_{in} sia assunta come disturbo misurabile e la sola portata di fluido refrigerante Q_c sia utilizzata come variabile manipolabile nella sintesi della legge di controllo in anello aperto; b) nel caso in cui la temperatura di alimentazione sia assunta come disturbo misurabile e la portata di fluido refrigerante e la portata di alimentazione siano utilizzate come variabili manipolabili nella sintesi della legge di controllo in anello aperto.

Caso I

Quando le determinazioni ottimali del vettore dei parametri operativi e del vettore delle variabili di stato del sistema di processo risultino individuate, la funzione dei costi di processo può esprimersi, in accordo alla (3.3.3) nella seguente forma:

$$\varphi = \varphi(u_a, u_b, \theta, \theta_c, \theta_{in}, Q_c) = \omega(\theta(\theta_{in}(t_k)) - \theta^*)^2 + \sigma(u_a(\theta_{in}(t_k)) - u_a^*)^2 + \lambda(u_b(\theta_{in}(t_k)) - u_b^*)^2 + \nu(\theta_c(\theta_{in}(t_k)) - \theta_c^*)^2 + \mu(Q_c(\theta_{in}(t_k)) - Q_c(\theta_{in}(t_{k+1})))^2 \quad (3.4.1)$$

dove si è assunta la temperatura della corrente di alimentazione θ_{in} come disturbo, e la portata di fluido refrigerante Q_c come variabile manipolabile.

In figura 3.4.2 è riportato uno schema del sistema di controllo in anello aperto.

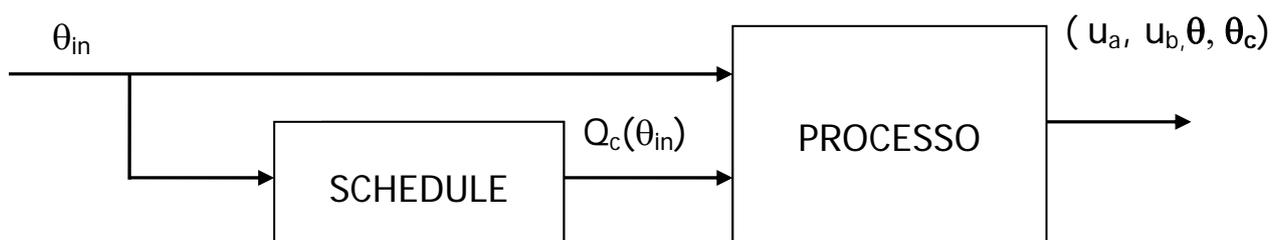


fig. 3.4.2 Schema del sistema processo controllato in anello aperto

Variazioni nel tempo del parametro di biforcazione θ_{in} sono segnalate ad un dispositivo di schedule. L'unità di schedule restituisce attraverso minimizzazione stazionaria della funzione dei costi di processo (3.4.1) l'implementazione della legge di controllo $Q_c(\theta_{in})$.

In figura (3.4.3) sono mostrati i risultati di una ottimizzazione del diagramma delle soluzioni di regime del sistema di processo, condotta attraverso minimizzazione stazionaria della funzione dei costi di processo (3.4.1), al variare della temperatura di alimentazione.

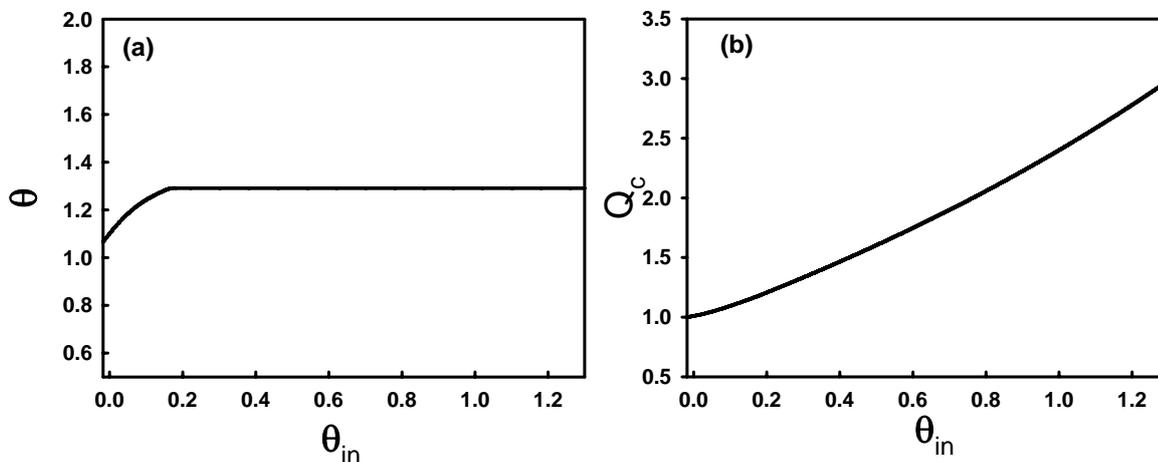


fig. 3.4.3 (a) Profilo ottimale della temperatura di esercizio del reattore; (b) legge di scheduling ottimale della portata di fluido refrigerante.

Le figure 3.4.1a e 3.4.1b descrivono gli andamenti delle determinazioni ottimali della temperatura di esercizio del reattore e della portata di fluido refrigerante al variare della temperatura di alimentazione all'interno dell'intervallo $-0.0184 > \theta_{in} > 1.3$.

L'ottimizzazione è stata condotta secondo lo schema (3.2.8)-(3.2.11) vincolando la soluzione del problema di ottimizzazione allo spazio delle soluzioni di regime stazionario del sistema di processo, ed imponendo i seguenti vincoli alla determinazione delle variabili di stato e delle variabili manipolabili:

$$\begin{aligned}
 0 < u_a < 0.2002522 \\
 0.04 < u_b < 0.2002522 \\
 -5 < \theta < 2 \\
 -10 < \theta_c < 0 \\
 0 < Q_c < 3
 \end{aligned}
 \tag{3.4.2}$$

In corrispondenza del valore della temperatura di alimentazione $\theta_{in} = 1.3$ si è trovato un arresto nell'implementazione dell'algoritmo di ottimizzazione. L'algoritmo si è rivelato incapace di produrre convergenza ad un minimo locale della funzione dei costi di processo (3.4.1) per valori del parametro di biforcazione $\theta_{in} > 1.3$. Le motivazioni del comportamento osservato risiedono nel raggiungimento del limite di saturazione $Q_c=3$ riportato in (3.4.2) in corrispondenza del valore di

temperatura $\theta_{in}=1.3$. Il valore di portata di fluido refrigerante $Q_c=3$ risulta, infatti, insufficiente a garantire, in corrispondenza di valori della temperatura di alimentazione $\theta_{in}>1.3$, la determinazione di soluzioni di regime stazionario del sistema di processo vincolate ai limiti riportati in (3.4.2).

In figura 3.4.3 sono riportati i risultati di una simulazione numerica del sistema controllato in anello aperto (fig. 3.4.2), al crescere della temperatura di alimentazione, quando la portata di fluido refrigerante è controllata secondo la legge di variazione descritta in figura 3.4.3b.

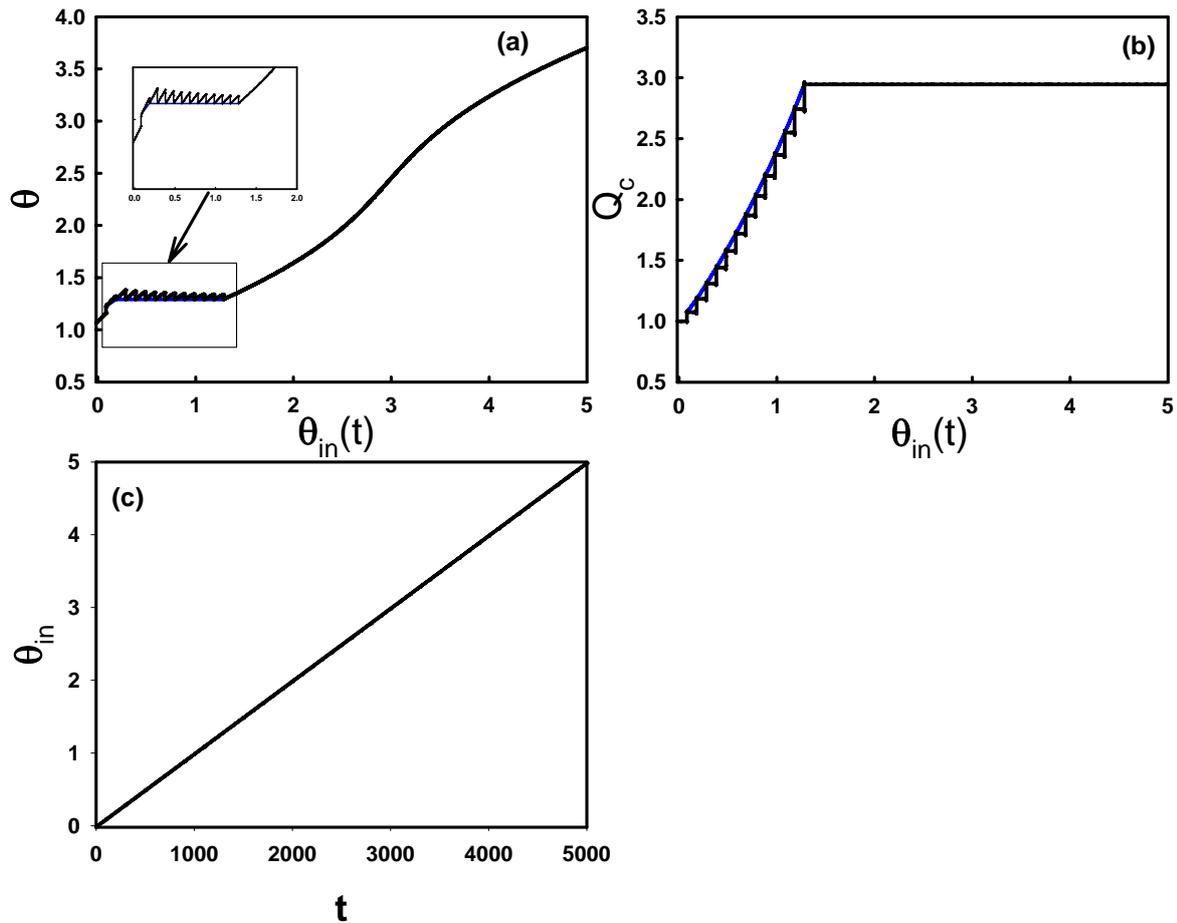


fig. 3.4.3 (a) Simulazione numerica della temperatura di esercizio del reattore; (b) andamento della portata di fluido refrigerante imposto dall'unità di scheduling; (c) variazione nel tempo della temperatura di alimentazione.

La figure 3.4.3a e 3.4.3b descrivono gli andamenti della temperatura di esercizio del reattore controllato in anello aperto e della portata di fluido refrigerante imposta dal dispositivo di schedule quando la temperatura di alimentazione segue l'andamento descritto in figura 3.4.3c. A causa di un tempo di ritardo (i.e. t_s) nell'implementazione dell'algoritmo di ottimizzazione si trovano profili della temperatura di esercizio e della portata di fluido refrigerante con derivata prima discontinua nel tempo. L'evoluzione della temperatura di esercizio e della portata di fluido refrigerante segue mediamente nel tempo le corrispondenti determinazioni ottimali (riportate in blu) all'interno

dell'intervallo di variazione della temperatura di alimentazione $-0.0184 > \theta_{in} > 1.3$. Tuttavia, quando la temperatura di alimentazione raggiunge valori $\theta_{in} > 1.3$, la determinazione del limite di saturazione della variabile manipolabile portata di fluido refrigerante $Q_c = 3$ produce un rapido incremento nel tempo della temperatura di esercizio del reattore.

Osservazione 3.4

Un'attenta analisi della evoluzione della portata di fluido refrigerante descritta in figura 3.4.3b rivela la determinazione di variazioni a gradino imposte attraverso l'unità di scheduling. E', infatti, assunto, nell'implementazione della metodologia di ottimizzazione del comportamento biforcazionale, che, una volta individuato, attraverso implementazione in linea dell'algoritmo di ottimizzazione (3.2.8)-(3.2.11), il punto di funzionamento ottimale del sistema di processo corrispondente al valore corrente (i.e. misurato) del parametro di biforcazione, l'unità di scheduling restituisca implementazione istantanea della corrispondente determinazione delle variabili manipolabili. L'assunzione di implementazione istantanea della legge di controllo in anello aperto risulta, tuttavia, non verificata nella pratica industriale. L'unità di scheduling risulta, infatti, incapace di garantire una variazione nel tempo a gradino delle variabili manipolabili. E', invece, ragionevole attendersi un graduale passaggio della portata di fluido refrigerante dal valore corrente a quello ottimale determinato attraverso minimizzazione in linea della funzione dei costi di processo. Pertanto, quando si implementi in linea la metodologia di ottimizzazione del comportamento biforcazionale descritta al paragrafo 3.3, devono prevedersi tre distinti intervalli di tempo di ritardo nella implementazione della legge di controllo in anello aperto: l'intervallo di tempo che passa tra due successive misure del parametro di biforcazione (i.e. t_p), l'intervallo di tempo necessario ai fini della implementazione in linea dell'algoritmo di ottimizzazione (3.2.8)-(3.2.11) (i.e. t_o), l'intervallo di tempo che l'unità di controllo in anello aperto impiega per portare le variabili manipolabili ai valori ottimali determinati (i.e. t_m). Intendendo condurre la simulazione numerica del sistema di processo controllato in ipotesi di implementazione istantanea della legge di controllo, contestualmente, garantendo una corretta descrizione del comportamento dinamico si assume, pertanto, che il tempo di ritardo t_s a valle del quale si trova implementazione della determinazione ottimale delle variabili manipolabili sia uguale alla somma dei tre contributi descritti (i.e. $t_s = t_p + t_o + t_m$). Pertanto, a patto di prevedere un ragionevole tempo di ritardo t_s , i risultati descritti in figura 3.4.3 descrivono correttamente il comportamento dinamico modello matematico (2.6.3)-(2.6.6) controllato in anello aperto al variare della temperatura di alimentazione.

I risultati della simulazione numerica del sistema di processo controllato in anello aperto (fig. 3.4.3) mostrano che l'efficienza del sistema di controllo in anello aperto descritto in figura 3.4.2 è confinata all'intervallo di variazione del parametro di biforcazione $-0.0184 > \theta_{in} > 1.3$. In particolare, quando la temperatura di alimentazione varia all'interno dell'intervallo $-0.0184 > \theta_{in} > 1.3$ il sistema di controllo in anello aperto garantisce profili della temperatura di esercizio del reattore prossimi al profilo ottimale risultante dall'implementazione dell'algoritmo di ottimizzazione (3.2.8)-(3.2.11). I risultati della simulazione numerica suggeriscono, pertanto, che le soluzioni di regime desiderate sono stabili all'interno dell'intervallo di variazione della temperatura di alimentazione $-0.0184 > \theta_{in} > 1.3$. Ai fini di un'analisi della robustezza del sistema di controllo è, tuttavia, essenziale verificare l'eventuale presenza di soluzioni di regime indesiderate all'interno dell'intervallo di variazione del parametro di biforcazione indicato.

In figura 3.4.4 sono riportati i risultati dell'analisi biforcazionale del sistema di processo controllato in anello aperto descritto in figura 3.4.2.

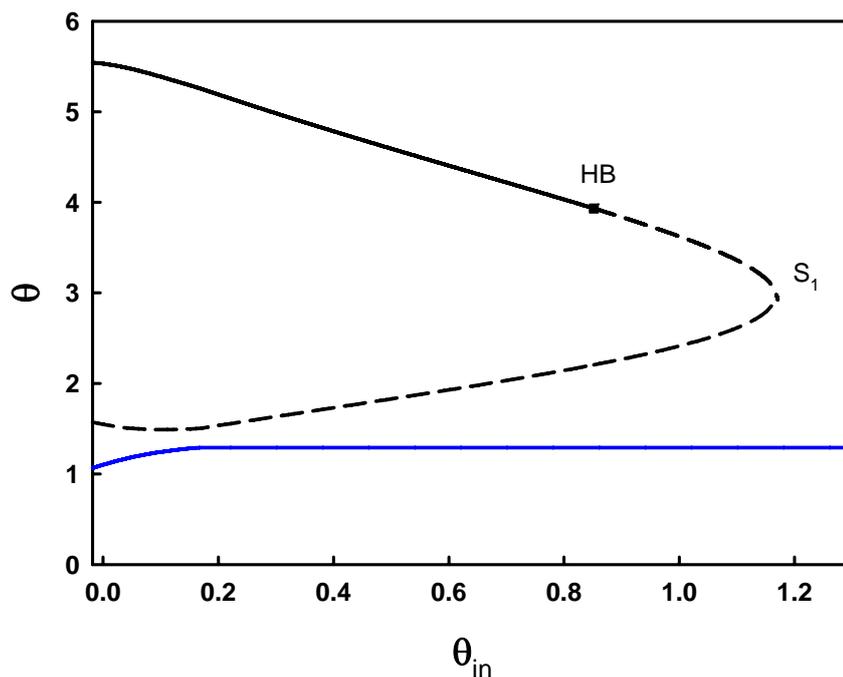


fig. 3.4.4 Diagramma delle soluzioni di regime del sistema controllato in anello aperto.

Come anticipato attraverso un'analisi dei risultati della simulazione numerica del sistema controllato in anello aperto, il ramo di soluzioni di regime desiderate (riportato in blu), risulta stabile all'interno dell'intervallo di variazione del parametro di biforcazione $-0.0184 > \theta_{in} > 1.3$. Si trovano, tuttavia, rami di soluzioni di regime indesiderati. In particolare, all'interno dell'intervallo di variazione del parametro di biforcazione $-0.0184 > \theta_{in} > 1.16$, le soluzioni di regime desiderate

coesistono con una coppia di soluzioni di regime indesiderate: una soluzione di regime caratterizzata da elevate temperature di esercizio del reattore ed una soluzione di regime intermedia instabile. Lungo il ramo di soluzioni di regime di elevata temperatura di esercizio del reattore, si trova una biforcazione di Hopf supercritica (HB) responsabile di oscillazioni autonome stabili del sistema di processo controllato in anello aperto. La determinazione di rami di soluzioni di regime indesiderate riduce sensibilmente l'ampiezza dei bacini di attrazione delle soluzioni di regime desiderate. Al fine di garantire robustezza del sistema di controllo risulta pertanto essenziale l'introduzione di un sistema di controllo in retroazione.

In figura 3.4.5 è riportato uno schema del sistema di processo controllato in anello chiuso. Il sistema di controllo in retroazione è stato sviluppato attraverso una strategia di controllo adattativo di gain-scheduling basata su controllo ottimo LQR [Bryson and Ho,1976].

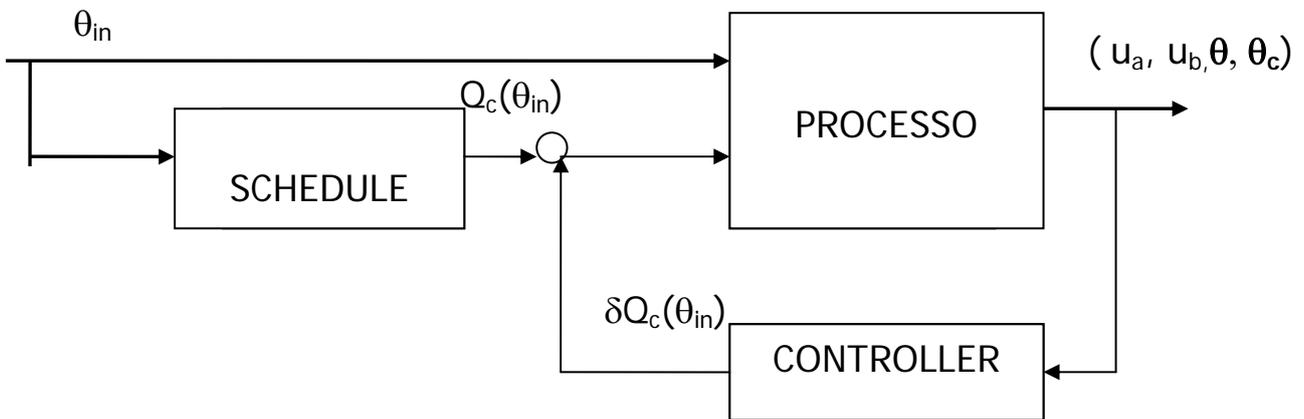


fig. 3.4.5 Schema del sistema di processo controllato attraverso lo schedule in anello aperto ed il controller in anello chiuso.

Come variabile manipolabile, nella progettazione del sistema di controllo in retroazione, è stata impiegata la portata di alimentazione della corrente reagente Q . La figura 3.4.6 descrive il diagramma delle soluzioni di regime del sistema controllato in anello chiuso al variare della temperatura di alimentazione all'interno dell'intervallo $-0.0184 > \theta_{in} > 1.3$.

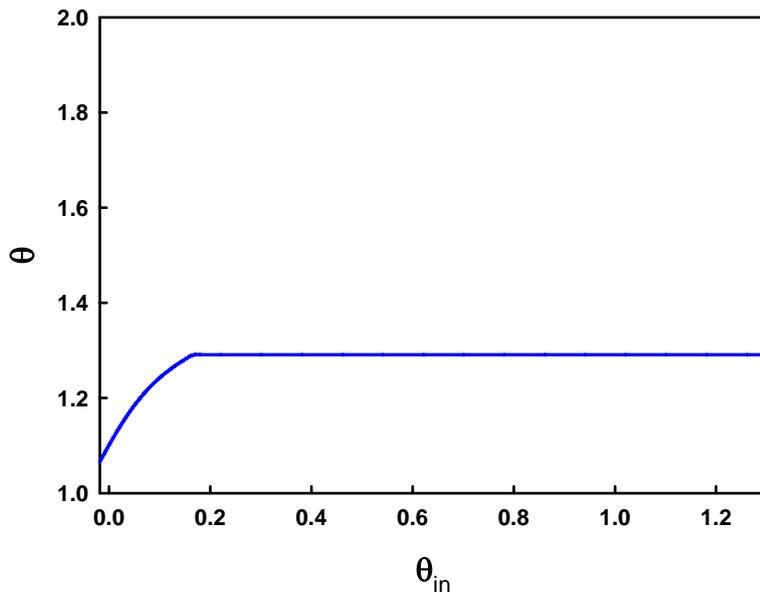


fig. 3.4.6 Diagramma delle soluzioni di regime del sistema controllato in anello chiuso.

Si trova stabilità delle soluzioni di regime desiderate ed eliminazione delle soluzioni di regime indesiderate riportate nella descrizione del comportamento biforcazionale del sistema di processo controllato in anello aperto.

Caso II

Quando la portata di fluido refrigerante sia utilizzata come sola variabile manipolabile ed i vincoli (3.4.2) siano imposti alla determinazione dei parametri operativi e delle variabili di stato del sistema di processo, l'efficienza del sistema di controllo descritto in figura 3.4.4 risulta, in ogni caso, confinata all'intervallo di variazione del parametro di biforcazione $-0.0184 < \theta_{in} < 1.3$, per effetto del raggiungimento di un limite di saturazione della portata di fluido refrigerante in corrispondenza di valori maggiori del parametro di biforcazione. Intendendo estendere l'efficienza del sistema di controllo a valori del parametro di biforcazione $\theta_{in} > 1.3$, mantenendo inalterati i vincoli riportati in (3.4.2), deve prevedersi, nella progettazione del sistema di controllo in anello aperto, l'introduzione di un'ulteriore variabile manipolabile. Nel seguito si esamina, pertanto, il comportamento dinamico del reattore controllato in anello aperto ed in anello chiuso quando la portata di fluido refrigerante Q_c e la portata di alimentazione Q siano impiegate come variabili manipolabili nella sintesi della legge di controllo in anello aperto.

Non si forniranno nel seguito descrizioni della struttura a blocchi dei sistemi di controllo utilizzati. Questi risulteranno, infatti, inalterati rispetto agli schemi riportati nelle figure 3.4.2 e 3.4.5, con la sola eccezione che il dispositivo di schedule presenterà due uscite definite dalla portata di fluido refrigerante Q_c e portata di alimentazione Q .

La formulazione dell'algoritmo di controllo, quando la coppia di variabili manipolabili Q_c , Q sia considerata, resta inalterata, trovandosi tuttavia una variazione nella espressione della funzione dei costi di processo conseguente dell'introduzione dell'ulteriore variabile manipolabile Q . In particolare si trova:

$$\begin{aligned} \varphi = \varphi(u_a, u_b, \theta, \theta_c, \theta_{in}, Q_c) = & \omega(\theta(\theta_{in}(t_k)) - \theta^*)^2 + \sigma(u_a(\theta_{in}(t_k)) - u_a^*)^2 + \\ & \lambda(u_b(\theta_{in}(t_k)) - u_b^*)^2 + \nu(\theta_c(\theta_{in}(t_k)) - \theta_c^*)^2 + \mu_1(Q_c(\theta_{in}(t_k)) - Q_c(\theta_{in}(t_{k+1})))^2 + \\ & + \mu_2(Q(\theta_{in}(t_k)) - Q(\theta_{in}(t_{k+1})))^2 \end{aligned} \quad (3.4.3)$$

In figura (3.4.7) sono mostrati i risultati della ottimizzazione del diagramma delle soluzioni di regime del sistema di processo, condotta attraverso minimizzazione della funzione dei costi di processo (3.4.3), al variare della temperatura di alimentazione. L'ottimizzazione stazionaria è stata condotta nel rispetto dei vincoli descritti in (3.4.2) e dei limiti di determinazione della portata di alimentazione $0.4 < Q < 1.5$.

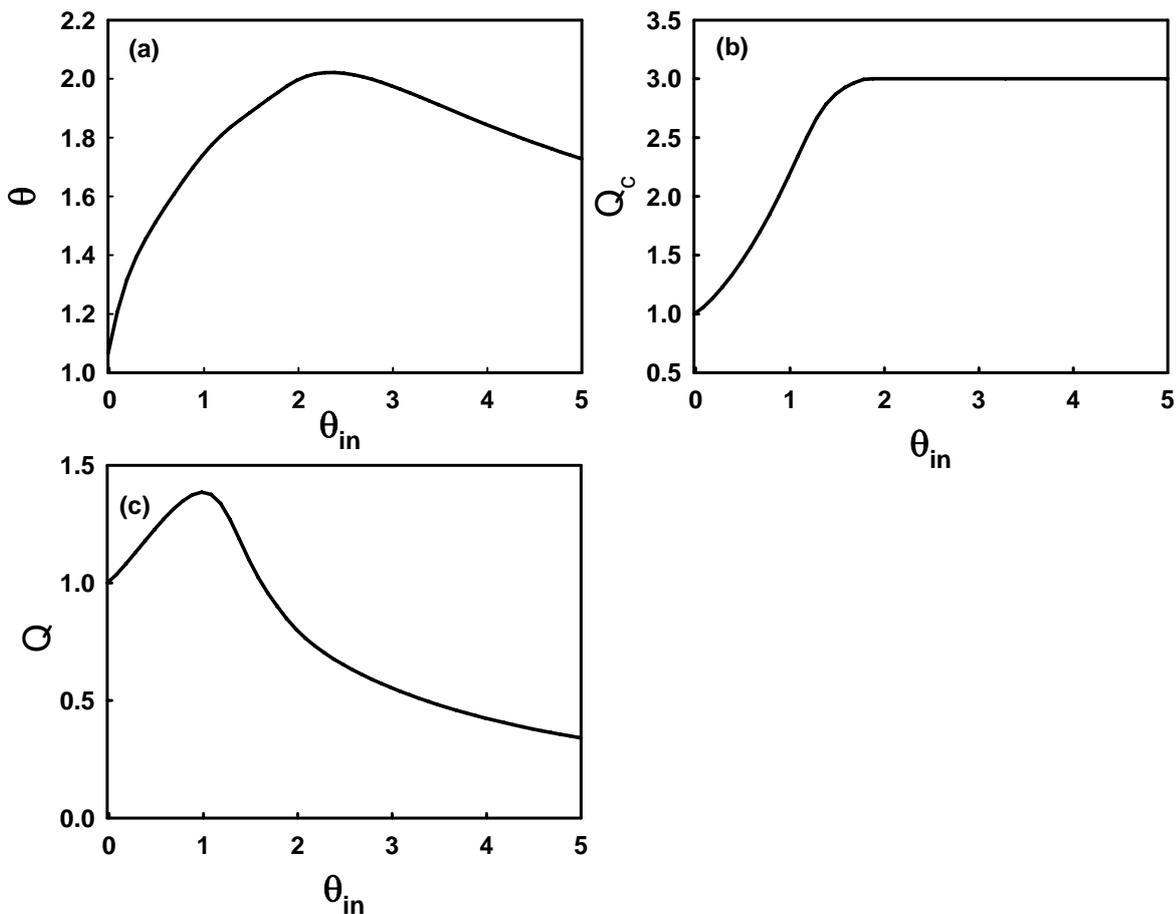


fig. 3.4.7 (a) Andamento ottimale della temperatura di esercizio del reattore; (b) legge di scheduling ottimale nella portata di fluido refrigerante; (c) legge di scheduling ottimale nella portata di alimentazione.

Le figure 3.4.7a, 3.4.7b, 3.4.7c descrivono gli andamenti delle determinazioni ottimali della temperatura di esercizio del reattore, della portata di fluido refrigerante e della portata di alimentazione al variare della temperatura di alimentazione all'interno dell'intervallo $0.0184 < \theta_{in} < 4$. I risultati dell'ottimizzazione stazionaria stabiliscono la possibilità di tracciare all'interno di un ampio intervallo di variazione del parametro di biforcazione profili ottimali (i.e. di minimo locale della funzione dei costi di processo) delle variabili manipolabili e delle variabili di stato del sistema di processo.

In figura 3.4.8 si riportano i risultati della simulazione numerica del sistema controllato in anello aperto descritto in figura 3.4.2 al variare della temperatura di alimentazione, quando la portata di fluido refrigerante Q_c e la portata di alimentazione Q sono controllate secondo le leggi di variazione descritte in figura 3.4.7b ed in figura 3.4.7c.

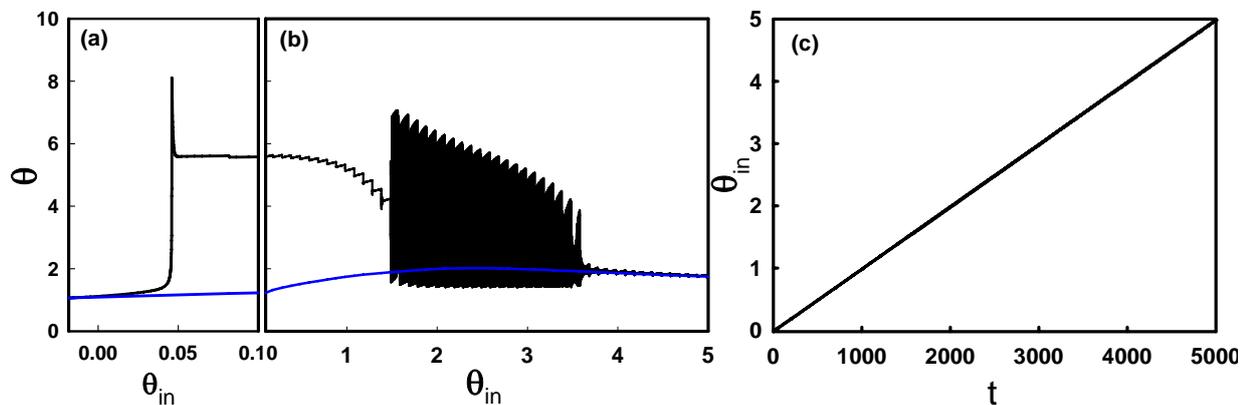


fig. 3.4.8 (a), (b) Simulazione numerica della temperatura di esercizio del reattore; (c) andamento nel tempo della temperatura di alimentazione.

Le figure 3.4.8a e 3.4.8b descrivono l'evoluzione della temperatura di esercizio del reattore quando la temperatura di ingresso varia secondo l'andamento riportato in figura 3.4.8c. In corrispondenza del valore della temperatura di alimentazione $\theta_{in} \sim 0.04$, si trova un'ampia deviazione della temperatura di esercizio del reattore rispetto al profilo ottimale atteso (riportato in blu). Si ricorda come la discontinuità nella derivata prima dell'andamento della temperatura di esercizio sia dovuto ad un ritardo nella implementazione dell'algoritmo di controllo rispetto alla misura del parametro di biforcazione (disturbo). Successivamente, quando la temperatura di alimentazione raggiunge il valore $\theta_{in} \sim 1.6$ si trovano ampie oscillazioni autonome della temperatura di esercizio del reattore. In corrispondenza di temperature di alimentazione $\theta_{in} > 3.6$ si trova nuovamente coincidenza dell'evoluzione della temperatura di esercizio del reattore e del profilo ottimale.

Le motivazioni della deviazione del comportamento dinamico del sistema di processo rispetto al comportamento ottimale atteso risiedono nella incapacità del sistema di controllo in anello aperto di garantire stabilità delle soluzioni di regime desiderate. I risultati riportati in figura 3.4.8 appaiono più chiari quando si esamina il comportamento biforcazionale del sistema controllato in anello aperto.

La figura 3.4.10 mostra il digramma delle soluzioni di regime sistema controllato in anello aperto al variare della temperatura di alimentazione.

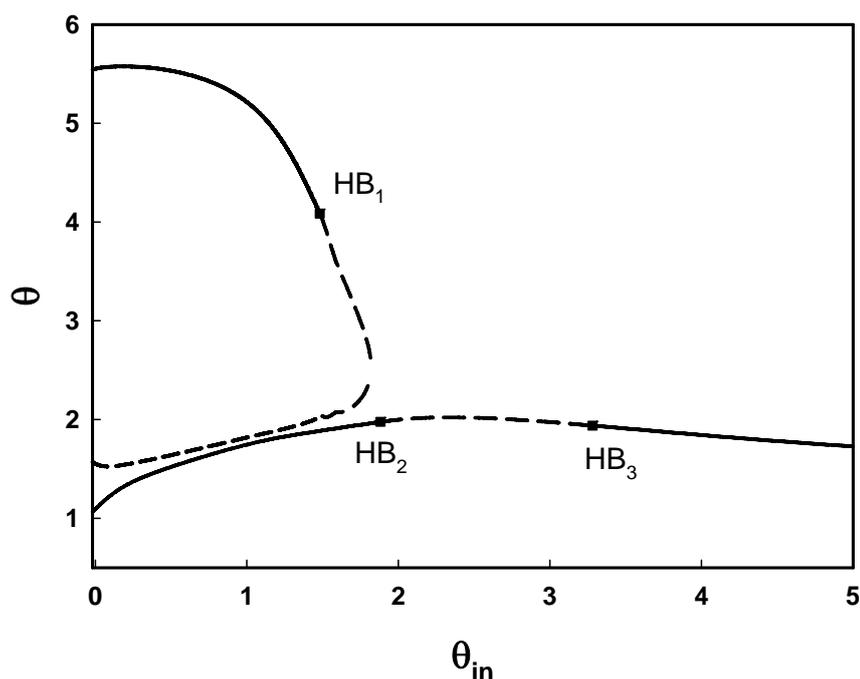


fig. 3.4.9 Diagramma delle soluzioni di regime del sistema controllato in anello aperto.

All'interno dell'intervallo di variazione del parametro di biforcazione $0 < \theta_{in} < 2$ si trova la coesistenza del ramo di soluzioni di regime desiderate con una coppia di rami di soluzioni di regime indesiderati: un ramo caratterizzato da elevata temperatura di esercizio del reattore ed un ramo instabile intermedio. In particolare il ramo instabile intermedio risulta notevolmente prossimo al ramo delle soluzioni di regime desiderate. I bacini di attrazione delle soluzioni di regime ottimali presentano, pertanto, dimensioni ridotte in corrispondenza dell'intervallo $0 < \theta_{in} < 2$. Queste considerazioni giustificano il brusco incremento della temperatura di esercizio del reattore controllato in anello aperto rilevate attraverso simulazione numerica ad una temperatura di ingresso $\theta_{in} \sim 0.04$ (fig. 3.4.8). A causa del ritardo nell'implementazione della legge di controllo l'andamento delle variabili manipolabili registra nel tempo una deviazione rispetto ai profili ottimali (fig.3.4.7). Questa deviazione configura un disturbo rispetto alle condizioni operative di funzionamento

ottimali inducendo, a causa delle ridotte dimensioni dei bacini di attrazione delle soluzioni di regime desiderate, un brusco incremento della temperatura di esercizio del reattore. Successivamente, si trovano, al crescere della temperatura di alimentazione, biforcazioni di Hopf delle soluzioni di regime stazionario. Per effetto della presenza di una coppia di biforcazioni di Hopf (HB_2 , HB_3) il ramo delle soluzioni di regime desiderate risulta instabile all'interno dell'intervallo di variazione del parametro di biforcazione $1.9 < \theta_{in} < 3.3$. In particolare, la determinazione di una biforcazione di Hopf subcritica HB_1 lungo il ramo di soluzioni di regime indesiderate caratterizzate da elevata temperatura di esercizio del reattore giustifica la nascita di ampie oscillazioni autonome della temperatura di esercizio trovate attraverso simulazione numerica (fig. 3.4.8).

Al fine di garantire stabilità e robustezza delle soluzioni di regime desiderate rispetto ad eventuali disturbi e tempi di ritardo nell'implementazione della legge di controllo si provvede quindi ad introdurre, accanto al sistema di controllo in anello aperto, un sistema di controllo in retroazione. In figura 3.4.10 si riportano i risultati di una simulazione numerica del sistema controllato in anello chiuso quando la portata di alimentazione della corrente reagente sia utilizzata come variabile manipolabile nella progettazione del sistema di controllo in retroazione.

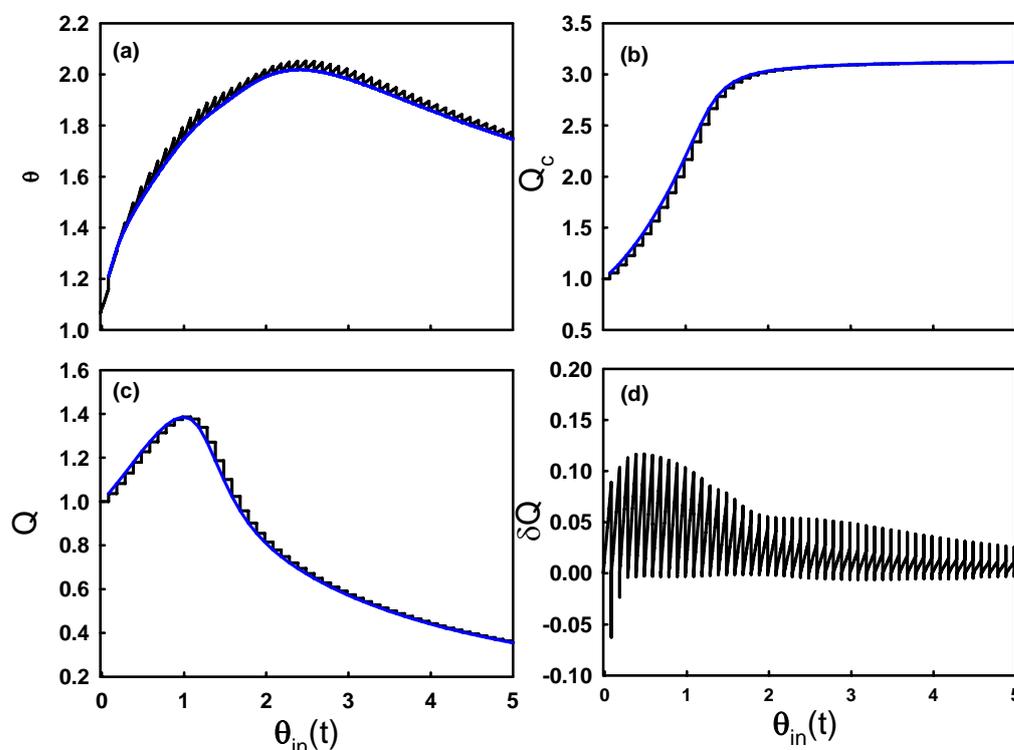


fig. 3.4.10 (a) Simulazione numerica della temperatura di esercizio del sistema controllato in anello chiuso; (b) andamento della portata di fluido refrigerante imposto dall'unità di scheduling; (c) andamento della portata di alimentazione imposto dall'unità di scheduling; (d) variazione della portata di alimentazione imposta dal sistema di retroazione.

La figura 3.4.10a, descrive l'andamento della temperatura di esercizio del reattore quando la temperatura di alimentazione varia lentamente all'interno dell'intervallo $-0.0184 < \theta_{in} < 5$. L'andamento della temperatura di esercizio del reattore segue mediamente nel tempo il profilo ottimale atteso (riportato in blu). Le figure 3.4.10b, 3.4.10c descrivono i corrispondenti andamenti della portata di fluido refrigerante e della portata di alimentazione imposte dall'unità di schedule al variare della temperatura di alimentazione. In figura 3.4.10d si riporta l'andamento della portata di alimentazione prodotto dal sistema di controllo in retroazione al variare della temperatura di alimentazione al fine di garantire stabilità delle soluzioni di regime desiderate.

3.5 Conclusioni

In questo capitolo, è stata presentata una nuova metodologia di controllo delle biforcazioni finalizzata alla ottimizzazione del comportamento asintotico di un sistema dinamico non lineare al variare di disturbi misurabili lentamente variabili. La metodologia illustrata, definita metodologia di ottimizzazione del comportamento biforcazionale, trova origine nella incapacità di gestione, attraverso implementazione della metodologia di bifurcation tailoring, di sistemi di processo, quando intervengano vincoli di determinazione delle variabili di stato e/o delle variabili manipolabili.

L'implementazione della metodologia di ottimizzazione del comportamento biforcazionale conduce alla determinazione di una legge di controllo in anello aperto che minimizza una funzione dei costi di processo al variare di parametri di biforcazione e garantisce, contestualmente, il rispetto di vincoli di determinazione delle variabili di stato e/o delle variabili manipolabili. L'implementazione in anello aperto della metodologia di ottimizzazione del comportamento biforcazionale garantisce la determinazione di un ramo di soluzioni di regime ottimali (i.e. di minimo locale della funzione dei costi) al variare dei parametri di biforcazioni. Alcune garanzie, tuttavia, sono fornite in merito alla stabilità ed unicità delle soluzioni di regime ottimali al variare dei parametri di biforcazione. Ai fini della stabilizzazione robusta delle soluzioni di regime desiderate al variare dei parametri di biforcazioni risulta, pertanto, essenziale l'implementazione, accanto alla legge di controllo in anello aperto, di una legge di controllo in retroazione. In questa direzione, la stabilizzazione delle soluzioni di regime ottimali è stata condotta attraverso implementazione di una strategia di gain-scheduling [Rugh and Smamma, 2000] basata su controllo LQR [Bryson and Ho, 1976]. La metodologia di ottimizzazione del comportamento biforcazionale risulta, inoltre, maggiormente adeguata ai fini della gestione variabili manipolabili e variabili controllate in numero superiore o uguale a due. L'implementazione della metodologia di bifurcation tailoring è subordinata, infatti, alla determinazione di un numero di variabili controllate pari al numero di variabili manipolate.

L'implementazione della metodologia di ottimizzazione del comportamento biforcazionale consente, attraverso lo sviluppo di un algoritmo di ottimizzazione, la gestione di un qualsivoglia numero di variabili controllate e di variabili manipolate.

Sono stati, infine, illustrati i risultati della implementazione della metodologia di ottimizzazione del comportamento biforcazionale ai fini della prevenzione di fenomeni di runaway termico nella gestione del reattore di parziale ossidazione descritto in (2.6.3)-(2.6.6). La metodologia di ottimizzazione del comportamento biforcazionale si è rivelata efficace nel prevenire lo sviluppo di fenomeni di runaway termico garantendo contestualmente i vincoli di determinazione della resa del prodotto intermedio di reazione e delle variabili manipolate, portata di alimentazione e portata di fluido refrigerante, al variare della temperatura di alimentazione.

Capitolo 4

Analisi della robustezza di sistemi di controllo in retroazione

E' stato mostrato nei precedenti capitoli come il successo delle metodologie di bifurcation tailoring e di ottimizzazione del comportamento biforcazionale di un sistema dinamico non lineare sia subordinato all'introduzione di un sistema di controllo in retroazione all'interno del circuito di controllo. Ai fini della stabilizzazione delle soluzioni di regime desiderate sono state, in questa direzione, implementate, nell'applicazione della metodologia del bifurcation tailoring, al capitolo 3, e della ottimizzazione del comportamento biforcazionale di un sistema dinamico, al capitolo 4, strategie di controllo adattativo, rispettivamente, minimal control synthesis e gain-scheduling. Strategie di controllo adattativo garantiscono, attraverso identificazione o misure in linea dei parametri del sistema di processo, un progressivo aggiornamento dei parametri del controllore di retroazione, nella salvaguardia delle caratteristiche di stabilità delle soluzioni di regime desiderate e del comportamento del sistema di processo all'interno dello spazio delle variabili di stato (e.g riduzione di overshoot, riduzione dell'ampiezza di oscillazioni indesiderate). Minimal control synthesis e gain-scheduling descrivono, tuttavia, metodologie di controllo lineare. Sono formulate attraverso linearizzazione locale del modello matematico del sistema di processo. La validità delle strategie di controllo indicate risulta, pertanto, confinata all'intorno della soluzione di regime desiderata rispetto alla quale si è realizzata la linearizzazione del modello matematico del sistema di processo. Quando una corretta implementazione delle strategie di controllo adattativo indicate sia condotta, alcuna garanzia della unicità delle soluzioni di regime desiderate è fornita ed alcuna informazione è disponibile in merito alla robustezza del sistema di controllo in retroazione. La robustezza di un sistema di controllo chiamato a preservare la soluzione di regime desiderata di un impianto è una misura della variazione nelle caratteristiche di stabilità e dell'ampiezza dei bacini di attrazione della soluzione di regime desiderata rispetto a variazioni dei parametri del sistema di controllo [Dynamics of Control, 2000]. La determinazione dell'ampiezza dei bacini di attrazione di soluzioni di regime costituisce un problema di ardua risoluzione, da alcuni decenni oggetto di notevole interesse da parte della comunità scientifica [Hsiao-Dong Chiang et al., 1988, 1989; Leonessa et al., 2001]. Non sono stati tuttavia finora sviluppati efficienti algoritmi di determinazione delle dimensioni di bacini di attrazione.

Uno studio della robustezza di sistemi di controllo in retroazione può, tuttavia, essere condotto attraverso analisi biforcazionale del sistema di processo controllato assumendo i parametri del controllore di retroazione come parametri di biforcazione. L'analisi biforcazionale, infatti, pur non

consentendo una misura dei bacini di attrazione, può fornire preziose informazioni in merito alla variazione delle caratteristiche di stabilità ed, in particolare, al numero di eventuali soluzioni di regime coesistenti con la soluzione di regime desiderata. L'idea di condurre uno studio della robustezza di sistemi di controllo in retroazione attraverso analisi biforcazionale del sistema dinamico controllato, assumendo i parametri del sistema di controllo come parametri di biforcazione, trova le sue origini nella prima metà degli anni ottanta [Chang and Chen, 1982]. Più volte ripresa nei successivi decenni, ai fini della analisi della robustezza di sistemi di controllo in retroazione [Hahn et al., 2004], l'approccio illustrato è stato recentemente seguito nello studio della robustezza di sistemi di controllo feedforward/feedback risultanti dell'implementazione della metodologia di bifurcation tailoring [Richardson et al., 2006].

In questo capitolo, l'idea illustrata è ripresa ai fini della analisi della robustezza di sistemi di controllo risultanti dell'implementazione della metodologia di ottimizzazione del comportamento biforcazionale di un sistema dinamico e di sistemi di controllo PID (i.e. proporzionale, integrale, derivativo).

Nel paragrafo 4.1, è illustrata una estensione della metodologia presentata in [Richardson et al., 2006] ai fini della analisi della robustezza di sistemi di controllo in retroazione risultanti dell'implementazione della metodologia di ottimizzazione del comportamento biforcazionale. Nel paragrafo 4.2, sono riportati i risultati dell'implementazione della metodologia illustrata ai fini della analisi della robustezza del sistema di controllo, presentato al paragrafo 3.4, di ottimizzazione del comportamento biforcazionale del reattore di parziale ossidazione descritto in (2.6.3)-(2.6.6). Nel paragrafo 4.3, è illustrata una metodologia di dimensionamento di sistemi di controllo PID. Nel paragrafo 4.4, sono illustrati i risultati di implementazione della analisi biforcazionale ai fini del dimensionamento di un sistema di controllo proporzionale del reattore di parziale ossidazione descritto in (2.6.3)-(2.6.6).

4.1 Robustezza di sistemi di controllo di ottimizzazione del comportamento biforcazionale

Si prenda in esame il sistema dinamico

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = F(x, p, q) \\ y = H(x) \end{cases} \quad (4.1.1)$$

con $x \in \mathbb{R}^n$ vettore delle variabili di stato, $y \in \mathbb{R}^m$ vettore delle variabili di uscita. In (4.1.1) $p \in \mathbb{R}$ deve intendersi come vettore dei parametri di biforcazione (disturbi), mentre $q \in \mathbb{R}^m$ è il vettore di tutti gli altri parametri operativi del sistema (variabili manipolabili). L'implementazione delle metodologie di bifurcation tailoring ed ottimizzazione del comportamento biforcazionale prevede la determinazione di una legge di controllo in anello aperto $q(p)$ tale per cui il vettore delle variabili di uscita y del sistema controllato presenti un prefissato (*risp.* ottimizzato) diagramma delle soluzioni di regime, quando il parametro di biforcazione p varia in un dato intervallo, ovvero risulti $y = g(p, t)$ quando p varia all'interno dell'intervallo $p \in [p_a, p_b]$.

Al fine di garantire stabilità e robustezza delle soluzioni di regime desiderate, è implementata, nell'applicazione delle metodologie di bifurcation tailoring ed ottimizzazione del comportamento biforcazionale, una legge di controllo di retroazione $q_{fb} = q_{fb}(p, x)$. Prevedendo, ai fini della determinazione della legge di controllo di retroazione $q_{fb} = q_{fb}(p, x)$, l'implementazione di una strategia di controllo lineare (e.g. gain scheduling), la legge di controllo risultante dell'applicazione delle metodologie di bifurcation tailoring ed ottimizzazione del comportamento biforcazionale può essere, pertanto, espressa nella seguente forma:

$$q = q(p, x) = q_{ff}(p) - q_{fb}(p, x) = q_{ff}(p) - K(p) \cdot (x - g(p)) \quad (4.1.2)$$

dove q_{ff} descrive l'azione del sistema di controllo in anello aperto, $q_{fb} = K \cdot (x - g(p))$ è l'azione del sistema di controllo in retroazione. In (4.1.2) K è la matrice dei guadagni del controllore di retroazione e deve essere opportunamente modificata in funzione della soluzione di regime che si intende stabilizzare.

In figura 4.1.1 è riportato uno schema del circuito di controllo feedforward/feedback risultante dell'applicazione delle metodologie di bifurcation tailoring ed ottimizzazione del comportamento biforcazionale.

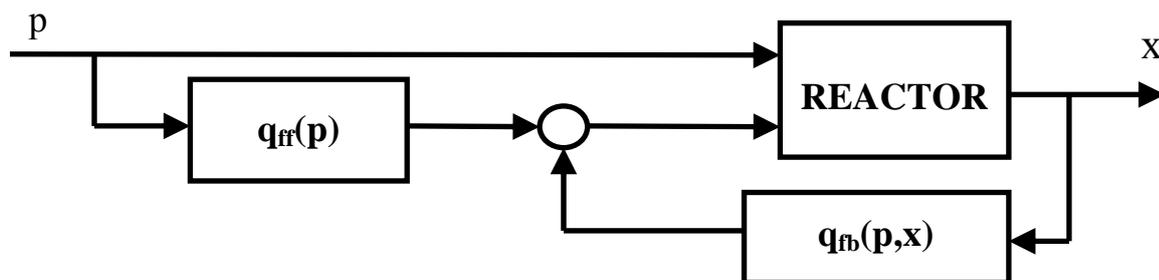


fig. 4.1.1 Schema a blocchi del sistema controllato in anello aperto ed in anello chiuso.

Variazioni nel tempo del parametro di biforcazione p sono rilevate attraverso misure in linea e segnalate ad una unità di schedule che produce, attraverso risoluzione di un sistema di equazioni non lineari, nel caso di bifurcation tailoring, o minimizzazione stazionaria della funzione dei costi di processo, nel caso di ottimizzazione del comportamento biforcazionale, la legge di controllo in anello aperto $q_{ff} = q_{ff}(p)$. Il dispositivo di controllo in anello chiuso garantisce stabilità delle soluzioni di regime desiderate al variare del parametro di biforcazione p .

Un'analisi della robustezza del sistema di controllo feedforward/feedback deve essere condotta esaminando gli effetti di variazioni degli elementi della matrice dei guadagni K sulla stabilità delle soluzioni di regime desiderate e la molteplicità di soluzioni di regime al variare del parametro di biforcazione p , in modo equivalente, esaminando le modificazioni indotte da variazioni degli elementi della matrice dei guadagni K nel diagramma delle soluzioni di regime del sistema controllato al variare del parametro di biforcazione p . Si osservi, tuttavia, come una dettagliata analisi della robustezza del sistema di controllo prevedrebbe, in questa direzione, uno studio degli effetti di ciascun elemento della matrice dei guadagni K sul diagramma delle soluzioni di regime del sistema controllato, risultando, pertanto, eccessivamente onerosa quando il numero di variabili manipolabili impiegate nella determinazione della legge di controllo di retroazione risulti maggiore o uguale di due. Al fine di ridurre l'onere computazionale relativo all'analisi di robustezza del sistema di controllo feedforward/feedback si introduce un ulteriore parametro di biforcazione Λ ridefinendo la legge di controllo in anello chiuso come segue:

$$q_{fb}(p, x) = \Lambda \cdot K(p) \cdot (x - g(p)) \quad (4.1.3)$$

E' immediato osservare come, una volta determinato l'andamento degli elementi della matrice dei guadagni K al variare del parametro di biforcazione p , la graduale variazione del parametro di biforcazione Λ all'interno dell'intervallo $[0,1]$ consente di descrivere il passaggio dallo stato di assenza del sistema di controllo di retroazione ($\Lambda = 0$) allo stato di corretta implementazione della legge di controllo di retroazione ($\Lambda = 1$). Pertanto, preliminari informazioni in merito alla robustezza del sistema di controllo feedforward/feedback possono essere ricavate attraverso un'analisi biforcazionale del sistema controllato al variare dei parametri di biforcazione p e Λ , in modo equivalente, tracciando, attraverso continuazione parametrica, la superficie descritta dai punti di equilibrio del sistema controllato all'interno dello spazio (p, Λ, y) .

La metodologia presentata è applicata nel successivo paragrafo ai fini di un'analisi della robustezza del sistema di controllo del processo di parziale ossidazione descritto al paragrafo 3.4.

4.2 Robustezza di un sistema di controllo di ottimizzazione del comportamento biforcazionale di un reattore di parziale ossidazione

La metodologia illustrata è nel seguito implementata ai fini di un'analisi della robustezza del sistema di controllo feedforward/feedback sviluppato attraverso ottimizzazione del comportamento biforcazionale ai fini della prevenzione di fenomeni di runaway termico nella gestione di un processo di parziale ossidazione (par. 3.4). E' esaminato, in particolare, il caso in cui portata di alimentazione e portata di fluido refrigerante siano utilizzate come variabili manipolabili nella progettazione del sistema di controllo in anello aperto, e la sola portata di fluido refrigerante sia assunta come variabile manipolabile ai fini della determinazione della legge di controllo in retroazione.

La legge di controllo in retroazione responsabile della stabilizzazione delle soluzioni di regime desiderate è preliminarmente scritta nella seguente forma:

$$Q_c = Q_c^*(p) - \Lambda \cdot (K_a(\theta_{in}) \cdot (u_a - u_a^*(\theta_{in})) + K_b(\theta_{in}) \cdot (u_b - u_b^*(\theta_{in})) + K_\theta(\theta_{in}) \cdot (\theta - \theta^*(\theta_{in})) + K_{\theta_c}(\theta_{in}) \cdot (\theta_c - \theta_c^*(\theta_{in}))) \quad (4.2.1)$$

dove è stato opportunamente introdotto il nuovo parametro di biforcazione Λ . Un'analisi della robustezza del sistema di controllo feedforward/feedback sviluppato attraverso implementazione della metodologia di ottimizzazione del comportamento biforcazionale è quindi condotta esaminando l'influenza del parametro di biforcazione Λ sul diagramma delle soluzioni di regime del reattore controllato al variare della temperatura di alimentazione θ_{in} . In figura 4.2.1 è riportato il diagramma delle soluzioni di regime stazionario del reattore di parziale ossidazione controllato attraverso il sistema di controllo feedforward/feedback al variare dei parametri di biforcazione θ_{in} e Λ .

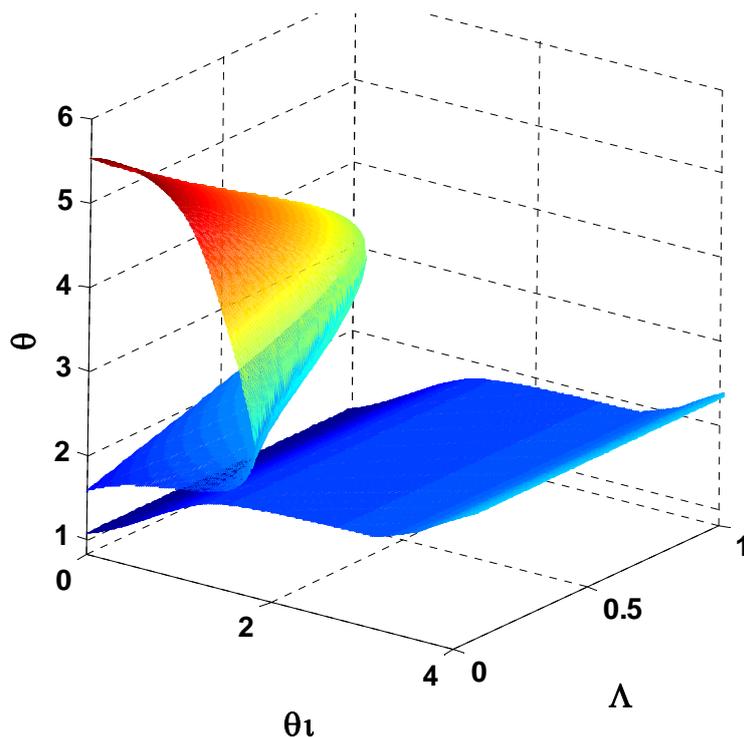


fig. 4.2.1 Diagramma delle soluzioni di regime stazionario al variare della temperatura di alimentazione e del parametro di biforcazione ausiliare Λ .

Risultano perfettamente distinte all'interno del diagramma delle soluzioni di regime stazionario due superfici. La superficie inferiore è rappresentativa di soluzioni di regime desiderate (i.e. ottimali), mentre la superficie superiore è rappresentativa di soluzioni di regime indesiderate. L'andamento del ramo di soluzioni di regime desiderate al variare del parametro di biforcazione θ_{in} risulta inalterato rispetto a variazioni del parametro Λ . Il ramo di soluzioni di regime desiderate è, infatti, prodotto attraverso implementazione della legge di controllo in anello aperto e non è in alcun modo influenzato dalla formulazione della legge di controllo di retroazione. Significative variazioni sono altresì trovate, al variare del parametro di biforcazione Λ , nell'ampiezza dell'isola di soluzioni di regime indesiderate. In corrispondenza di valori del parametro di biforcazione $\Lambda \sim 0$ (i.e. assenza di retroazione) l'ampiezza dell'isola di soluzioni di regime indesiderate è massima, trovandosi rami di soluzioni di regime indesiderate particolarmente prossimi ai rami di soluzioni di regime desiderate. Si trovano, pertanto, per bassi valori del parametro di biforcazione Λ , ridotte dimensioni dei bacini di attrazione delle soluzioni di regime desiderate. L'ampiezza dell'isola di soluzioni di regime indesiderate al variare del parametro di biforcazione θ_{in} si riduce drasticamente al crescere del parametro Λ . In particolare, in corrispondenza di valori del parametro $\Lambda > 0.8$ si

trova unicità delle soluzioni di regime desiderate al variare della temperatura di alimentazione del reattore.

4.3 Tuning di controllori PID

I controllori PID costituiscono i sistemi di controllo in retroazione maggiormente impiegati in applicazioni industriali ai fini del controllo di sistemi di processo. L'azione di un controllore PID è risultante di tre contributi elementari: un'azione di controllo proporzionale (P), un'azione di controllo integrale (I), ed un'azione di controllo derivativo (D). Il peso relativo dei contributi descritti, nella determinazione del segnale di controllo $u(t)$, u essendo la variabile manipolabile, è definito attraverso tre parametri, detti guadagni del controllore: K_p , K_I , K_D . I guadagni devono essere opportunamente determinati al fine di garantire il raggiungimento degli obiettivi di controllo. Definita $e(t)=y_{ref}-y(t)$ la deviazione della variabile controllata y del sistema di processo rispetto alla sua corrispondente determinazione nominale y_{ref} , la legge di controllo implementata attraverso un sistema di controllo PID può esprimersi nella seguente forma:

$$u(t) = K_p e(t) + K_I \int e(\tau) d\tau + K_D \dot{e}(t) \quad (4.3.1)$$

Il punto centrale della progettazione di controllori PID è la determinazione (i.e. tuning) dei guadagni K_p , K_I , K_D . Questa deve essere condotta in modo che l'evoluzione nel tempo della variabile controllata del sistema di processo y soddisfi gli obiettivi di controllo. Il tuning di controllori PID è generalmente condotto in applicazioni industriali attraverso tradizionali schemi di progettazione (e.g. schemi Ziegler-Nichols, metodo della curva di reazione) [Ogunnaike and Ray, 1994]. Queste metodologie sono state sviluppate ed ampiamente utilizzate ai fini del controllo di sistemi di processo lineari.

La notevole semplicità ed i ridotti costi di controllori PID ne hanno motivato un diffuso impiego ai fini del controllo di sistemi di processo non lineari. In applicazioni industriali l'ingegnere di controllo è chiamato a determinare le condizioni operative di funzionamento di interesse, quindi ad effettuare un tuning del controllore PID basato sulla linearizzazione del modello matematico del sistema di processo in corrispondenza della soluzione di regime desiderata. In generale questo approccio confina l'efficacia del sistema di controllo al solo intorno della soluzione di regime desiderata in corrispondenza del quale si è realizzata la linearizzazione del modello matematico del sistema di processo.

L'applicazione della teoria delle biforcazioni offre un'efficace alternativa ai fini della determinazione dei parametri di controllori PID in sistemi di processo non lineari rispetto a tradizionali schemi di tuning [di Bernardo, 2002]. In particolare, quando l'analisi biforcazionale del sistema di processo controllato sia condotta assumendo come parametri di biforcazione i guadagni del controllore PID, innumerevoli informazioni in merito alla robustezza del sistema controllo sono determinate.

4.4 Dimensionamento di un controllore proporzionale di un reattore di parziale ossidazione

La figura 4.4.1 descrive il diagramma delle soluzioni di regime del reattore di parziale ossidazione descritto in (2.6.3)-(2.6.6).

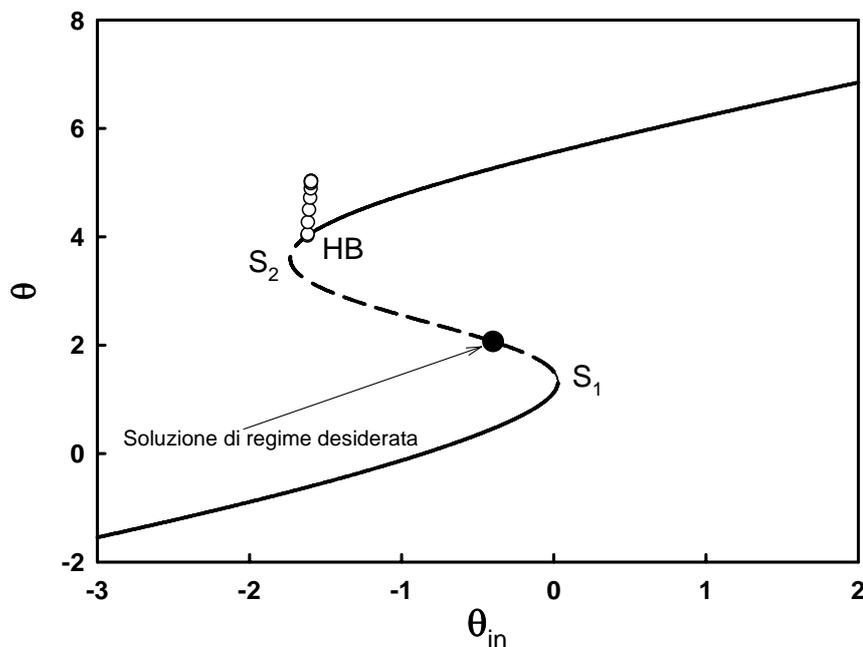


fig. 4.4.1 Diagramma delle soluzioni di regime al variare della temperatura di alimentazione.

Come variabile rappresentativa dello stato del sistema si è scelta la temperatura di esercizio del reattore. Obiettivo di controllo è la stabilizzazione della soluzione di regime desiderata, localizzata lungo il ramo stazionario intermedio instabile, attraverso l'impiego di un controllore proporzionale. Quando la portata di fluido refrigerante è assunta come variabile manipolabile, la legge di controllo proporzionale, in accordo alla 4.3.1, assume la forma:

$$Q_c(t) = Q_c^* - K_p(\theta^* - \theta) \quad (4.4.1)$$

dove θ^* e Q_c^* sono le determinazioni della temperatura di esercizio del reattore e della portata di fluido refrigerante in corrispondenza della soluzione di regime desiderata. La progettazione del sistema di controllo è, quindi, subordinata alla determinazione del guadagno proporzionale K_p . La figura 4.4.2 descrive i risultati dell'analisi biforcazionale del sistema di processo, quando la legge di controllo 4.4.1 sia implementata, al variare del guadagno proporzionale K_p .

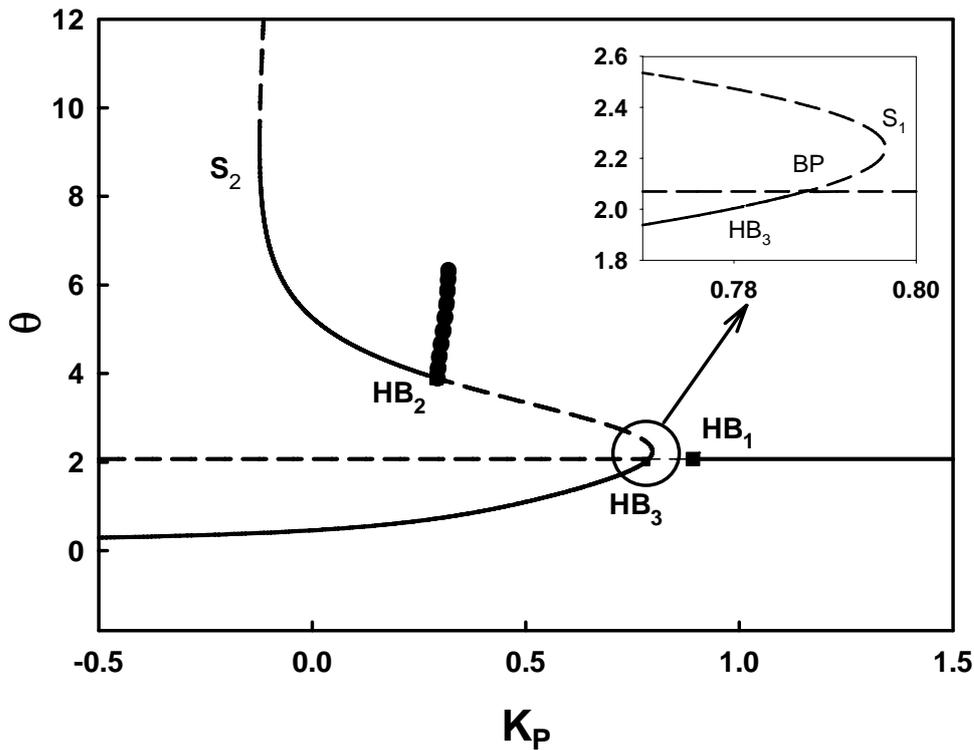


fig. 4.4.2 Diagramma delle soluzioni di regime al variare del guadagno proporzionale.

Valori del guadagno proporzionale $K_p > 0.85$ garantiscono stabilità ed unicità della soluzione di regime desiderata. La determinazione della biforcazione di Hopf HB_1 accompagna, in corrispondenza del valore del guadagno proporzionale $K_p \sim 0.85$, la nascita di oscillazioni autonome della temperatura di esercizio del reattore. In corrispondenza di valori inferiori del guadagno proporzionale, per effetto della biforcazione transcritica BP, si trova la nascita di una coppia di rami di soluzioni di regime indesiderate. I rami di soluzioni di regime indesiderate risultano inizialmente instabili al diminuire del guadagno proporzionale. Il ramo inferiore acquista quindi stabilità al diminuire del guadagno proporzionale attraverso la biforcazione di Hopf HB_3 in corrispondenza del valore $K_p \sim 0.78$. Il ramo di soluzioni di regime stazionarie superiore risulta instabile all'interno di un ampio intervallo di variazione del parametro di biforcazione, acquistando stabilità in corrispondenza del valore del guadagno proporzionale $K_p \sim 0.35$.

Ai fini della stabilità ed unicità della soluzione di regime desiderata, valori del guadagno proporzionale maggiori del valore $K_p \sim 0.85$ corrispondente del punto di biforcazione di Hopf HB_1 devono assumersi nella progettazione del sistema di controllo proporzionale. In corrispondenza di valori inferiori del guadagno proporzionale la soluzione di regime desiderata diviene instabile, trovandosi molteplicità di soluzioni di regime e la nascita di oscillazioni autonome della temperatura di esercizio del reattore. In questa direzione, una misura della robustezza del sistema di controllo proporzionale è fornita attraverso la differenza del valore attuale del guadagno proporzionale e del valore del guadagno proporzionale corrispondente della biforcazione di Hopf HB_1 .

Quando il sistema di controllo proporzionale sia chiamato a preservare la soluzione di regime desiderata rispetto ad eventuali variazioni nelle condizioni operative di funzionamento del sistema di processo (disturbi) assume notevole importanza un'analisi dell'evoluzione all'interno dello spazio dei parametri del punto di biforcazione HB_1 . In particolare, deve chiedersi come il valore limite del guadagno proporzionale corrispondente della biforcazione di Hopf HB_1 vari per effetto di variazioni indesiderate di uno o più parametri operativi del sistema di processo.

La figura 4.4.3 descrive il luogo dei punti di biforcazione di Hopf del sistema di processo controllato attraverso la legge di controllo proporzionale (4.4.1) al variare del guadagno proporzionale K_p e della temperatura di alimentazione della corrente reagente.

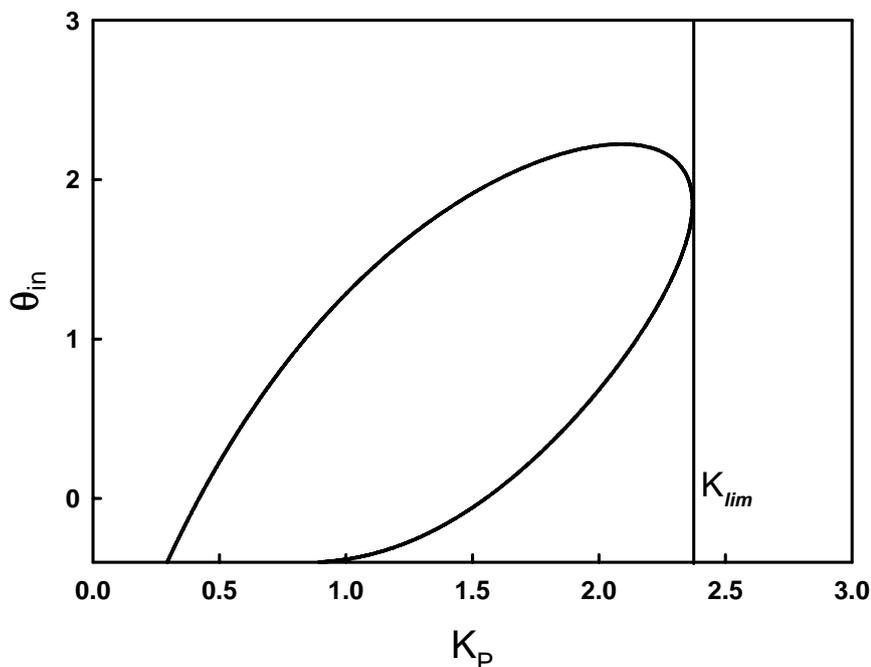


fig. 4.4.3 Punti di biforcazione di Hopf al variare del guadagno proporzionale e della temperatura di alimentazione

Il valore del guadagno proporzionale corrispondente della biforcazione di Hopf HB_1 risulta crescente in funzione della temperatura di alimentazione. In particolare, si trova un valore del guadagno proporzionale limite al di sopra del quale il sistema di processo controllato non esibisce biforcazioni di Hopf quando la temperatura di alimentazione varia.

4.5 Conclusioni

E' stata illustrata, in questo capitolo, una metodologia di analisi della robustezza di sistemi di controllo risultanti dalla implementazione della metodologia di ottimizzazione del comportamento biforcazionale di un sistema dinamico non lineare. La implementazione della metodologia di ottimizzazione del comportamento biforcazionale di un sistema dinamico non lineare garantisce la determinazione di un ramo di soluzioni di regime ottimali al variare dei parametri di biforcazione. Stabilità ed unicità delle soluzioni di regime ottimali sono raggiunte attraverso implementazione di strategie di controllo adattativo lineari (e.g. minimal control synthesis, gain scheduling). L'analisi della robustezza del sistema di controllo è condotta attraverso analisi biforcazionale del sistema controllato assumendo come parametri di biforcazione gli elementi della matrice dei guadagni. Seguendo l'idea sviluppata in [Richardson et al., 2006] è introdotto nella espressione della legge di controllo un parametro ausiliare. Variazioni del parametro ausiliare consentono di produrre variazioni nella intensità della legge di controllo in retroazione. In particolare, quando il parametro ausiliare varia da 0 ad 1, il sistema dinamico controllato passa gradualmente dalla condizione di assenza di controllo in retroazione, alla condizione di corretta implementazione della legge di controllo in retroazione. In questa direzione, l'analisi della robustezza del sistema di controllo è condotta esaminando l'evoluzione del diagramma delle soluzioni di regime del sistema controllato al variare di un disturbo misurabile, conseguente di una graduale variazione del parametro ausiliare all'interno dell'intervallo $[0,1]$. Sono illustrati i risultati della implementazione della metodologia illustrata ai fini della analisi della robustezza del sistema di controllo di un reattore di parziale ossidazione sviluppato attraverso ottimizzazione del comportamento biforcazionale al variare della temperatura di alimentazione (par. 3.6).

E' successivamente condotta una discussione della possibilità di applicazione della analisi biforcazionale ai fini del tuning di sistemi di controllo PID. Seguendo l'idea presentata in [di Bernardo, 2002], è suggerita la possibilità di tuning di sistemi di controllo PID attraverso analisi biforcazionale del sistema controllato al variare dei guadagni del sistema di controllo. E' in tal modo possibile fissare i guadagni del controllore in modo da garantire stabilità robusta delle soluzioni di regime desiderate rispetto ad eventuali disturbi e/o incertezze nelle previsioni del modello matematico del sistema di processo. Sono, in questa direzione, illustrati i risultati della

implementazione della analisi biforcazionale ai fini del tuning di un sistema di controllo proporzionale di stabilizzazione di una soluzione di regime stazionario instabile del modello matematico di un reattore di parziale ossidazione ((2.6.3)-(2.6.3)).

Capitolo 5

Controllo di transizioni di regime

Il problema affrontato nei precedenti paragrafi è stato l'eliminazione di punti di biforcazione catastrofica il cui raggiungimento sia indotto da disturbi misurabili lentamente variabili. A partire da un'analisi dei limiti di applicazione della metodologia di bifurcation tailoring, è stata, in questa direzione, sviluppata una metodologia di ottimizzazione del comportamento biforcazionale finalizzata alla modificazione del diagramma delle soluzioni di regime stazionario di un sistema dinamico non lineare. L'idea centrale è stata determinare, attraverso minimizzazione stazionaria di una funzione dei costi di processo, una legge di controllo in anello aperto che assicuri, al variare del parametro di biforcazione (i.e. disturbo), un graduale andamento delle variabili di uscita del sistema dinamico in condizioni di regime stazionario, precludendo la possibilità di determinazione di punti di biforcazione catastrofica, e garantendo il raggiungimento degli obiettivi di processo. La metodologia illustrata è stata implementata ai fini della prevenzione di fenomeni di runaway termico nella gestione di un processo reattivo di parziale ossidazione.

Un'ulteriore problematica di controllo ricorrente nella pratica industriale è la modificazione della soluzione di regime di reattori chimici (i.e. transizione di regime). L'esigenza di modificazione delle condizioni di esercizio (i.e. soluzioni di regime) di reattori chimici trova origine nella necessità di rispondere, attraverso l'esercizio della stessa unità operativa, a differenti domande di mercato. Il raggiungimento di una elevata flessibilità produttiva risulta, infatti, centrale ai fini di un incremento della competitività di mercato [Ogunnaike and Ray, 1994]. Frequentemente, pertanto, le condizioni operative di funzionamento di reattori chimici sono modificate al fine di realizzare condizioni di esercizio che permettano di ottenere prodotti con differenti caratteristiche, quindi in grado di soddisfare differenti domande di mercato. L'industria di produzione di materiali polimerici costituisce, in questa direzione, il maggiore esempio di settore industriale dove il raggiungimento di un'elevata flessibilità produttiva risulta determinante al fine di garantire un'elevata competitività di mercato [McAuley and McGrogan, 1992]. Basti pensare che uno stesso polimero è frequentemente impiegato, con differenti caratteristiche (e.g. composizione, densità, peso molecolare), nella realizzazione di innumerevoli prodotti (e.g. bottiglie, buste).

Sistemi di controllo di reattori chimici devono, pertanto, garantire stabilità e robustezza delle condizioni di esercizio in corrispondenza di ampie variazioni delle condizioni operative di funzionamento. Il controllo di transizioni di regime di reattori chimici, in particolare, deve essere

condotto in modo da minimizzare il periodo di transizione (i.e. il tempo necessario ai fini del raggiungimento della nuova soluzione di regime) e garantire il rispetto di vincoli di sicurezza.

Per quanto concerne la necessità di minimizzare il periodo di transizione, si osservi come prodotti realizzati nel corso di transizioni di regime presentino frequentemente caratteristiche che non rispondono ad alcuna domanda di mercato e sono, quindi, riciclati all'interno della corrente di alimentazione, o venduti ad un prezzo sensibilmente inferiore a quello di mercato. Una riduzione del periodo di transizione risulta, quindi, essenziale ai fini di una minimizzazione dei costi di processo.

Centrale nella gestione di transizioni di regime di reattori chimici è, inoltre, il rispetto di vincoli di sicurezza. Questi impongono limiti alla variazione delle variabili di stato e delle variabili manipolabili. In particolare, vincoli di determinazione delle variabili manipolabili esprimono limiti di realizzabilità della legge di controllo. Quando essi siano violati, gli attuatori (e.g. valvole, pompe) risultano incapaci di garantire una corretta implementazione della legge di controllo, e possono, pertanto, avere luogo fenomeni indesiderati caratteristici del reattore non controllato (e.g. nascita di oscillazioni autonome della temperatura di esercizio, fenomeni di runaway termico). Vincoli di determinazione delle variabili di stato esprimono limiti di esercizio di reattori chimici (e.g. limiti di infiammabilità, temperatura di disattivazione del catalizzatore) e se violati possono condurre, ad esempio, alla formazione di prodotti indesiderati, esplosioni o alla estinzione del processo reattivo.

Notevole interesse è stato rivolto, nel corso dell'ultimo decennio, al problema di controllo di transizioni di regime di reattori chimici [[McAuley and McGregor, 1992; Takeda and Ray, 1999; Flores-Tlacuahuac et al., 2005a,b]. In questa direzione, la metodologia oggi maggiormente promettente è il controllo predittivo non lineare [Mayne et al., 2000]. L'implementazione di strategie di controllo predittivo non lineare prevede la risoluzione in linea di un problema di ottimizzazione dinamica vincolato, assumendo, come condizione iniziale, la misura corrente dello stato del sistema. Una traiettoria ottimale (i.e. in grado di minimizzare i costi di processo e garantire il rispetto dei vincoli di sicurezza) delle variabili manipolabili all'interno di un intervallo di tempo finito (i.e. orizzonte) è determinata, quindi, attraverso la risoluzione numerica in linea di un problema di ottimizzazione, senza ricorso ad alcuna legge di controllo di tipo analitico. Nell'implementazione di strategie di controllo predittivo, solo il tratto iniziale della traiettoria ottimale delle variabili manipolabili determinata, è implementata, e l'ottimizzazione è quindi ripetuta quando una nuova misura dello stato del sistema risulti disponibile. La capacità di garantire, attraverso questo approccio, minimizzazione dei costi di processo e rispetto di vincoli di sicurezza ha motivato un notevole interesse della comunità scientifica verso la formulazione ed analisi di

metodologie di controllo predittivo. Innumerevoli sforzi sono stati compiuti ai fini della determinazione di efficienti schemi numerici di ottimizzazione dinamica [Biegler, 1992] e della formulazione di algoritmi di controllo predittivo in grado di assicurare robusta stabilità delle soluzioni di regime di sistemi dinamici non lineari [Chen and Allgower, 1998]. Tuttavia, mentre sono oggi disponibili schemi di controllo predittivo in grado di assicurare stabilità di un sistema dinamico non lineare nell'intorno di una prefissata soluzione di regime [Chen and Allgower, 1998, Magni et al., 2001], alcuna garanzia di stabilità è fornita quando strategie di controllo predittivo siano applicate nella gestione di transizioni di regime.

I limiti descritti, di applicazione di metodologie di controllo predittivo, motivano la frequente gestione di transizioni di regime attraverso strategie di scheduling. Nell'applicazione di strategie di scheduling, differenti punti stazionari sono preliminarmente selezionati in modo da ricoprire la regione di variazione delle condizioni operative di funzionamento in corrispondenza della quale è realizzata la transizione di regime. Sistemi di controllo di retroazione locali che garantiscano stabilità del sistema dinamico nell'intorno dei punti stazionari selezionati sono quindi sviluppati. Frequentemente, la sintesi di sistemi di controllo di retroazione locali è condotta attraverso lo studio delle linearizzazioni del modello matematico del sistema di processo nell'intorno dei punti stazionari selezionati (i.e. gain-scheduling) [Rugh and Shamma, 2000]. La transizione da un punto stazionario all'altro è, infine, realizzata attraverso interpolazione [McConley et al., 2000] o switching [El Farra et al., 2005] dei sistemi di controllo di retroazione locali.

Centrale ai fini della implementazione di strategie di scheduling, nella gestione di transizioni di regime, è la preliminare determinazione di una famiglia di punti stazionari. Questi devono essere scelti in modo da ricoprire la regione di variazione delle condizioni operative di funzionamento in corrispondenza della quale è realizzata la transizione di regime, devono soddisfare vincoli di determinazione delle variabili manipolabili e delle variabili di stato, e devono poter essere stabilizzati attraverso leggi di controllo di retroazione locali non eccessivamente dispendiose (i.e. ridotti guadagni dei controllori di retroazione locali).

Nonostante innumerevoli sforzi siano stati compiuti, nella formulazione di strategie di scheduling, ai fini della determinazione di schemi di interpolazione e/o switching dei sistemi di controllo di retroazione locali in grado di assicurare robusta stabilità di sistemi dinamici non lineari in corrispondenza di ampie variazioni delle condizioni operative di funzionamento [McConley et al., 2000; Leonessa et al., 2001; Mhaskar et al., 2005], modeste ricerche sono state condotte ai fini della formulazione di metodologie di ottimizzazione della distribuzione di punti stazionari, che pur costituisce la struttura portante di un sistema di controllo di scheduling. Quando la gestione di transizioni di regime sia condotta attraverso strategie di scheduling, la preliminare selezione di punti

stazionari è, infatti, frequentemente condotta attraverso criteri empirici o affidata all'esperienza di operatori di processo [Feather et al., 2004].

Una procedura sistematica di determinazione della distribuzione di punti stazionari, ai fini dell'implementazione di strategie di scheduling, è proposta in [Kwatny and Chang., 1998]. Una parametrizzazione della varietà descritta dall'insieme dei punti stazionari di un sistema dinamico non lineare è condotta ai fini della determinazione di una famiglia di sistemi di controllo di retroazione locali. La metodologia proposta non prevede, tuttavia, l'implementazione di vincoli di determinazione delle variabili di stato e delle variabili manipolabili, analisi di operatività (i.e. valutazione di guadagni di sistemi di controllo locali), e fa uso di un schema numerico eccessivamente semplificato ai fini della determinazione dei punti stazionari.

Nei successivi paragrafi, sono, pertanto, illustrate due metodologie di ottimizzazione della distribuzione di punti stazionari ai fini dell'implementazione di strategie di controllo di scheduling. In particolare, nel paragrafo 5.1 è riportata un'attenta formulazione del problema di scheduling di transizioni di regime stazionario. Nel paragrafo 5.2 è descritto un algoritmo di ottimizzazione della distribuzione di punti stazionari e degli istanti di switch di sistemi di controllo di retroazione locali nell'implementazione di strategie di scheduling. La metodologia proposta prevede la determinazione della distribuzione di punti stazionari e della sequenza di istanti di switch attraverso risoluzione numerica di un problema di programmazione dinamica vincolato. Nel paragrafo 5.3 è illustrata l'applicazione della metodologia di scheduling proposta ai fini della gestione di transizioni di regime stazionario di un reattore continuo perfettamente miscelato. Nel paragrafo 5.4 è, quindi, presentata una semplificata metodologia di ottimizzazione della distribuzione di punti stazionari. La metodologia presentata prevede determinazione della sola distribuzione di punti stazionari rinunciando alla contestuale determinazione della sequenza di istanti di switch dei sistemi di retroazione locali ed è implementata al paragrafo 5.5 nella programmazione della transizione di regime di un reattore continuo perfettamente miscelato.

5.1 Formulazione del problema di scheduling

Si prenda in esame il seguente sistema dinamico non lineare:

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = F(x, u) \\ y = H(x, u) \end{cases} \quad (5.1.1)$$

dove $x \in \mathbb{R}^n$ è il vettore delle variabili di stato, $y \in \mathbb{R}^p$ è il vettore delle variabili di uscita, $u \in \mathbb{R}^m$ è il vettore delle variabili manipolabili. Si assuma l'evoluzione del sistema dinamico (5.1.1) sottoposta a vincoli di determinazione delle variabili stato e delle variabili manipolabili. In particolare, sia $C \subseteq \mathbb{R}^{n+m}$ l'insieme all'interno del quale siano vincolate a ricadere le determinazioni delle variabili di stato e delle variabili manipolabili. L'insieme $C \subseteq \mathbb{R}^{n+m}$ è assunto compatto ed è descritto come segue:

$$C \triangleq \{(x, u) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m : |x| \leq x_{\max}, |u| \leq u_{\max}\} \quad (5.1.2)$$

Si denoti quindi con:

$$E \triangleq \{(x_s, u_s) \in \mathbb{R}^{n+m} : F(x_s, u_s) = 0\} \quad (5.1.3)$$

l'insieme dei punti stazionari del sistema dinamico (5.1.1). Si assumerà nel seguito che le linearizzazioni del sistema dinamico (5.1.1) nell'intorno di punti stazionari $(x_s, u_s) \in E$ siano controllabili. In questa direzione, si denoti con $u(x(t), x_s, u_s)$ la legge di controllo di retroazione locale, determinata attraverso una prefissata strategia di controllo (e.g. pole-placement, linear quadratic regulator), che stabilizza il sistema dinamico (5.1.1) nell'intorno del punto stazionario (x_s, u_s) .

Ai fini della gestione di transizioni di regime, attraverso implementazione di strategie di scheduling, è necessario determinare preliminarmente un insieme di punti stazionari. Questi debbono essere selezionati in modo da ricoprire accuratamente la regione di variazione dei parametri operativi in corrispondenza della quale è realizzata la transizione di regime, ed in modo da rispettare i vincoli (5.1.2) di determinazione delle variabili di stato e delle variabili manipolabili. Pertanto, assegnata una coppia di punti stazionari $(x_0, u_0), (x_t, u_t) \in E \cap C$, rispettivamente rappresentativi della soluzione di regime corrente e della soluzione di regime desiderata, si definisca l'insieme delle ammissibili ordinate minime sequenze di r punti stazionari con estremi $(x_0, u_0), (x_t, u_t)$ come segue:

$$S_r[(x_0, u_0), (x_t, u_t)] \triangleq \begin{cases} p_r \equiv \{(x_i, u_i)\}_{i=1, \dots, r} : (x_i, u_i) \in E \cap C \quad \forall i, \\ (x_i, u_i) \neq (x_j, u_j) \quad \forall i \neq j, \\ (x_1, u_1) \equiv (x_0, u_0), (x_r, u_r) \equiv (x_t, u_t) \\ (x_i, u_i) \in B_\delta(x_{i+1}, u_{i+1}) \end{cases} \quad (5.1.4)$$

In (5.1.4), assegnata la coppia $\delta \equiv (\delta_x, \delta_u)$, $B_\delta(x_s, u_s)$ descrive l'insieme compatto dello spazio delle variabili di stato e dei parametri operativi $B_\delta(x_s, u_s) \equiv \{(x, u) \in C : |x - x_s| \leq \delta_x, |u - u_s| \leq \delta_u\}$. Sequenze $p_r \in S[(x_0, u_0), (x_t, u_t)]$ descrivono cammini di punti stazionari di estremi (x_0, u_0) e (x_t, u_t) . Esse sono ordinate seconda la sequenza di interi positivi $I^\circ (1, \dots, r)$, ammissibili, poiché ciascun punto della sequenza rispetta i vincoli di determinazione delle variabili di stato e delle variabili manipolabili (i.e. $(x_i, u_i) \in E \cap C \quad \forall i$), concatenate, poiché ciascun punto (x_i, u_i) della sequenza ricade all'interno di un intorno (piccolo a piacere) del successivo punto (x_{i+1}, u_{i+1}) (i.e. $(x_i, u_i) \in B_\delta(x_{i+1}, u_{i+1})$), minime, risultando assenti coppie di punti coincidenti (i.e. $(x_i, u_i) \neq (x_j, u_j) \quad \forall i \neq j$). La figura 5.1.1 descrive la distribuzione all'interno dello spazio delle variabili di stato e dei parametri operativi dei punti stazionari di una sequenza $p_r \in S[(x_0, u_0), (x_t, u_t)]$.

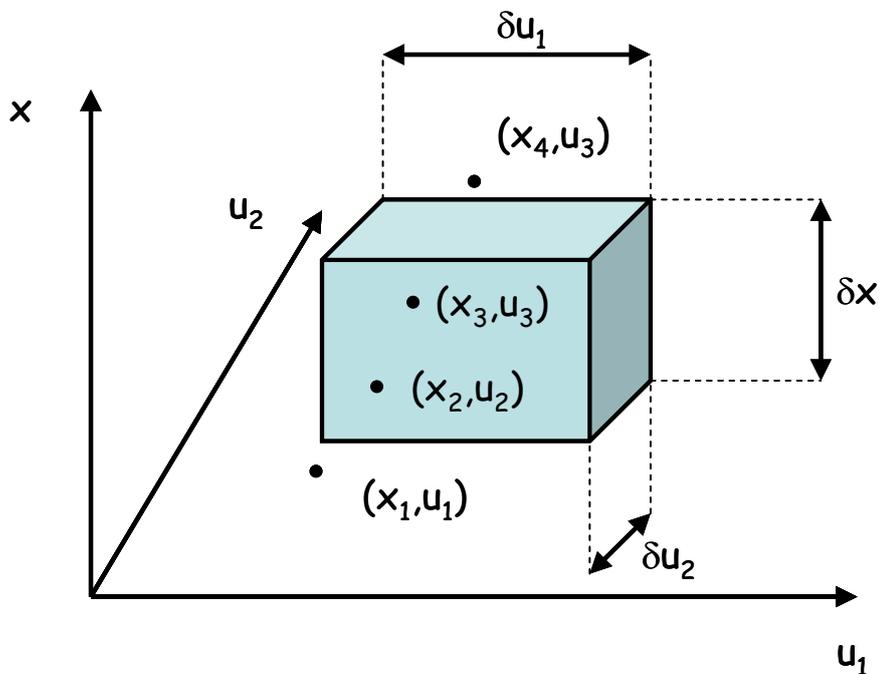


fig. 5.1.1 Distribuzione di punti stazionari $p_4 \in S[(x_1, u_1), (x_4, u_4)]$.

Sequenze $p_r \in S[(x_0, u_0), (x_t, u_t)]$ soddisfano n vincoli di uguaglianza non lineare (i.e. $F(x_i, u_i) = 0 \forall i$) e $(4 \cdot n + 4 \cdot m)$ vincoli di disuguaglianza lineare (i.e. $(x_i, u_i) \in C$ e $(x_i, u_i) \in B_\delta(x_{i+1}, u_{i+1})$).

Si fissi quindi una sequenza $p_r \in S[(x_0, u_0), (x_t, u_t)]$ e si determinino le leggi di controllo di retroazione locale $u(x(t), x_i, u_i)$ che rendono stabile il sistema dinamico (5.1.1) nell'intorno di ciascun punto $(x_i, u_i) \in p_r$. Si assuma che in un dato istante sia implementata la legge di controllo $u(x(t), x_i, u_i)$ che rende stabile il sistema dinamico (5.1.1) nell'intorno del punto stazionario $(x_i, u_i) \in p_r$. La transizione di regime del sistema dinamico (5.1.1) verso il successivo punto stazionario della sequenza $(x_{i+1}, u_{i+1}) \in p_r$ può essere effettuata attraverso arresto della legge di controllo $u(x(t), x_i, u_i)$ ed implementazione della legge di controllo $u(x(t), x_{i+1}, u_{i+1})$ che rende stabile il sistema dinamico (5.1.1) nell'intorno del punto stazionario $(x_{i+1}, u_{i+1}) \in p_r$. E', in questa direzione, possibile, attraverso successivi arresti ed implementazioni delle leggi di controllo che rendono stabile il sistema dinamico (5.1.1) nell'intorno dei punti stazionari $(x_i, u_i) \in p_r$, raggiungere il punto stazionario desiderato $(x_t, u_t) \in p_r$. L'operazione di arresto-implementazione di leggi di controllo di retroazione locale è definita switch. Quando la gestione di transizioni di regime sia condotta attraverso successive operazioni di switch delle leggi di controllo di retroazione locali, le equazioni di evoluzione del sistema dinamico (5.1.1) assumono la seguente forma:

$$\begin{cases} \dot{x}(t) = F(x(t), u(x(t), x_i, u_i)) \\ y(t) = H(x(t), u(x(t), x_i, u_i)) \\ i = \mu(t) \end{cases} \quad (5.1.5)$$

dove la $i = \mu(t)$ è una funzione intera a valori nell'insieme $I \equiv (1, \dots, r)$ che definisce istante per istante la legge di controllo di retroazione locale $u(x(t), x_i, u_i)$ implementata. Nel seguito la funzione $i = \mu(t)$ sarà definita funzione di switch. Le equazioni di evoluzione (5.1.5) descrivono un sistema dinamico ibrido non lineare. Il termine ibrido segnala come lo stato del sistema (5.1.5) sia definito da variabili di natura continua (i.e. $x(t)$) e variabili di natura discreta (i.e. $i = \mu(t)$). Una ampia descrizione della letteratura scientifica inerente alla analisi ed al controllo di sistemi dinamici ibridi è riportata in [Branicky et al., 1998; Bemporad and Morari, 1999].

Fissata una coppia di punti stazionari $(x_0, u_0), (x_t, u_t) \in E \cap C$, rispettivamente rappresentativi della soluzione di regime corrente e della soluzione di regime desiderata, il nostro obiettivo è, pertanto, la determinazione di una sequenza $p_r^* \in S_r[(x_0, u_0), (x_t, u_t)]$ e di una funzione di switching $i^* = \mu^*(t)$ monotona crescente tali per cui risulti:

$$J(p_r^*, i^*(t)) = \min_{p_r \in S_r[(x_0, u_0), (x_t, u_t)], i(t)} \int_{t_0}^{t_f} L(x(t), u(x(t), x_i, u_i)) dt$$

s.t.

$$\dot{x}(t) = F(x(t), u(x(t), x_i, u_i)), \quad x(t_0) = x_0, \quad i = \mu(t) \quad (5.1.6)$$

$$(x(t), u(t)) \in C \quad \forall t \in [t_0, t_f]$$

dove $L(x(t), u(t))$ è una funzione reale, definita positiva (libro freeman), nulla in corrispondenza del punto stazionario desiderato (x_t, u_t) (i.e. $L(x_t, u_t) = 0$), descrivente una misura dei costi di processo. Le (5.1.6) descrivono un problema di programmazione dinamica vincolato attraverso le equazioni di evoluzione del sistema dinamico (5.1.5), ed i limiti di determinazione delle variabili di stato e delle variabili manipolabili (5.1.2). Una esauriente descrizione di metodologie di controllo ottimo di sistemi dinamici ibridi è riportata in [Branicky et al., 1998; Xu, 2001; Xu and Antsaklis, 2004].

Si osservi come l'assunzione di monotonia della funzione di switching $i^* = \mu^*(t)$, in (5.1.6), esclude la possibilità per cui, nel corso della transizione di regime, si osservino, a partire dalla legge di controllo locale $u(x(t), x_k, u_k)$, switch verso punti stazionari anteriori (i.e. (x_j, u_j) , $j < k$) all'interno della sequenza $p_r^* \in S_r[(x_0, u_0), (x_t, u_t)]$. Può, infatti, agevolmente provarsi come switch verso punti stazionari anteriori all'interno della sequenza ordinata $p_r^* \in S_r[(x_0, u_0), (x_t, u_t)]$ determinino un incremento dell'integrale della funzione dei costi di processo rispetto alla soluzione di minimizzazione.

La funzione di switching $i^* = \mu^*(t)$ può essere pertanto espressa nella seguente forma:

$$\mu^*(t) = \begin{cases} 0 & \forall t \in [t_0, t_1^-] \\ 1 & \forall t \in [t_1^+, t_2^-] \\ \dots\dots\dots \\ k & \forall t \in [t_k^+, t_{k+1}^-] \\ \dots\dots\dots \\ r & \forall t \in [t_r^+, t_f] \end{cases} \quad (5.1.7)$$

dove $T \equiv (t_0, t_1, \dots, t_k, \dots, t_r, t_f)$ è una sequenza crescente di istanti di tempo (i.e. istanti di switch). La (5.1.7) permette di riformulare il problema di ottimizzazione (5.1.6) nella seguente forma:

$$J(p_r^*, T^*) = \min_{p_r \in S_r[(x_0, u_0), (x_t, u_t)], T \equiv (t_0, t_1, \dots, t_r, t_f)} \int_{t_0}^{t_f} L(x(t), u(x(t), x_i, u_i)) dt =$$

$$\min_{p_r \in S_r[(x_0, u_0), (x_t, u_t)], T \equiv (t_0, t_1, \dots, t_r, t_f)} \left[\int_{t_0}^{t_1} L(x(t), u(x(t), x_0, u_0)) dt + \dots + \right. \quad (5.1.8)$$

$$\left. + \int_{t_k}^{t_{k+1}} L(x(t), u(x(t), x_{k+1}, u_{k+1})) dt + \dots + \int_{t_r}^{t_f} L(x(t), u(x(t), x_r, u_r)) dt \right]$$

Il problema di scheduling ottimo della transizione di regime del sistema dinamico (5.1.1) è quindi ricondotto alla ricerca di una sequenza ordinata di punti stazionari $p_r^* \in S_r[(x_0, u_0), (x_t, u_t)]$ e di una sequenza crescente di istanti switch $T^* \equiv (t_0, t_1, \dots, t_k, \dots, t_r, t_f)$ che minimizzino l'integrale nel tempo della funzione dei costi di processo $J(p_r, T_r)$.

Centrale ai fini della risoluzione del problema di programmazione dinamica (5.1.8) è il seguente lemma:

Lemma 5.1.1

Si assumano valide le seguenti ipotesi:

- a) Esistenza della coppia (p_r^*, T_r^*) che risolve il problema di programmazione dinamica (5.1.8).
- b) $\forall p_r \in S_r[(x_0, u_0), (x_t, u_t)] \exists T_r^* \equiv (t_0, t_1, \dots, t_k, \dots, t_r, t_f)$ tale per cui $J(p_r, T_r^*) = \min_{T_r} J(p_r, T_r)$ nel rispetto dei vincoli (5.1.2) ed (5.1.5).

Pertanto si trova:

$$\begin{aligned}
J(\mathbf{p}_r^*, T_r^*) &= \min_{\mathbf{p}_r \in S_r((x_0, u_0), (x_t, u_t)), T_r \equiv (t_0, t_1, \dots, t_k, \dots, t_r, t_f)} J(\mathbf{p}_r, T_r) = \\
&= \min_{\mathbf{p}_r \in S_r((x_0, u_0), (x_t, u_t))} \min_{T_r \equiv (t_0, t_1, \dots, t_k, \dots, t_r, t_f)} J(\mathbf{p}_r, T_r)
\end{aligned} \tag{5.1.9}$$

Non si riporterà nel seguito la dimostrazione del lemma (5.1.1). Tuttavia, elementi sufficienti ai fini del conseguimento del risultato (5.1.9) possono trovarsi in [Xu, 2001].

Il lemma 5.1 garantisce la possibilità di risoluzione del problema di programmazione dinamica (5.1.8) attraverso l'implementazione di una coppia successivi stadi di ottimizzazione. In particolare, fissata una sequenza di punti stazionari $\mathbf{p}_r \in S_r[(x_0, u_0), (x_t, u_t)]$, si procederà alla determinazione di una sequenza crescente di istanti di tempo $T_r^*(\mathbf{p}_r^k)$ che minimizza l'integrale della funzione dei costi di processo $J(\mathbf{p}_r, T_r)$. L'operazione di minimizzazione dell'integrale della funzione dei costi di processo rispetto alla sequenza di istanti di tempo T_r , sarà quindi ripetuta, al variare della sequenza $\mathbf{p}_r \in S_r[(x_0, u_0), (x_t, u_t)]$, sino alla determinazione di una sequenza di punti stazionari $\mathbf{p}_r^* \in S_r[(x_0, u_0), (x_t, u_t)]$ tale per cui risulti $J(\mathbf{p}_r^*, T_r^*(\mathbf{p}_r^*)) = \min_{\mathbf{p}_r} \min_{T_r} J(\mathbf{p}_r, T_r) = \min_{\mathbf{p}_r, T_r} J(\mathbf{p}_r, T_r)$. Si riporta pertanto un possibile algoritmo concettuale di risoluzione del problema di ottimizzazione (5.1.8). In figura 5.1.2 è riportato uno schema a blocchi dell'algoritmo ottimizzazione di seguito descritto.

Algoritmo 5.1.1

In corrispondenza dell'iterazione k-sima, l'unità di ottimizzazione esterna segnala all'unità di ottimizzazione interna la sequenza di punti stazionari \mathbf{p}_r^k . L'unità di ottimizzazione interna procede quindi alla determinazione della sequenza di istanti di tempo $T_r^{*,k} = T_r^*(\mathbf{p}_r^k)$ che minimizza l'integrale della funzione dei costi di processo $J(\mathbf{p}_r^k, T_r)$. La determinazione della sequenza di istanti di tempo $T_r^{*,k} = T_r^*(\mathbf{p}_r^k)$ è condotta attraverso implementazione di un algoritmo di ottimizzazione sequenziale [Floudas, 1999]. In questa direzione, valutazioni della funzione obiettivo $J(\mathbf{p}_r^k, T_r)$, delle funzioni di vincolo $V(\mathbf{p}_r^k, T_r)$, sono effettuate attraverso simulazione numerica del sistema dinamico controllato (5.1.5), e valutazioni delle derivate della funzione obiettivo $\partial J(\mathbf{p}_r^k, T_r)/\partial T_r$ e delle derivate delle funzioni di vincolo $\partial J V(\mathbf{p}_r^k, T_r)/\partial T_r$ rispetto agli istanti di switch $T_r \equiv (t_0, t_1, \dots, t_k, \dots, t_r, t_f)$ sono condotte attraverso schemi numerici alle differenze finite. Quando la sequenza $T_r^{*,k} = T_r^*(\mathbf{p}_r^k)$ sia stata determinata, i corrispondenti valori dell'integrale della funzione

dei costi di processo $J(p_r^k, T_r^*(p_r^k))$ e delle funzioni di vincolo $V(p_r^k, T_r^*(p_r^k))$ sono restituiti all'unità di ottimizzazione esterna. Valutazioni delle derivate dell'integrale della funzione dei costi di processo $\partial J(p_r, T_r^*(p_r))/\partial p_r$ e delle funzioni di vincolo $\partial V(p_r, T_r^*(p_r))/\partial p_r$, rispetto alle coordinate dei punti stazionari della distribuzione p_r , sono quindi effettuate attraverso successive valutazioni delle funzioni $J(p_r, T_r^*(p_r))$ e delle funzioni di vincolo $V(p_r, T_r^*(p_r))$ al variare della sequenza di punti stazionari p_r .

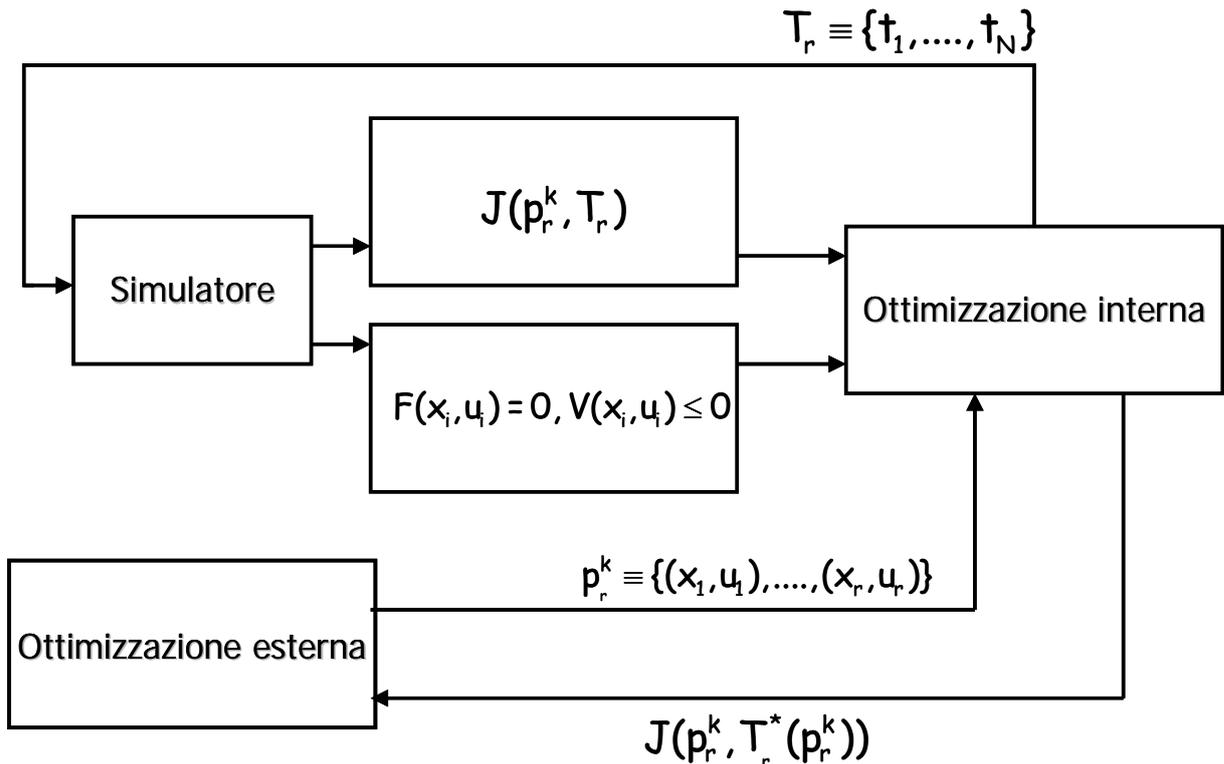


fig. 5.1.2 Schema a blocchi dell'algoritmo di ottimizzazione (5.1.1).

L'algoritmo di ottimizzazione descritto in figura 5.1.1 riconduce la determinazione di una sequenza di punti stazionari $p_r \in S[(x_0, u_0), (x_i, u_i)]$ e di una sequenza crescente di istanti di tempo $T \equiv (t_1, \dots, t_k, \dots, t_r, t_f)$ che minimizzano l'integrale della funzione dei costi di processo $J(p_r, T_r)$ alla risoluzione di un problema di programmazione non lineare in $(r-2) \cdot (n+m) + (r+1)$ incognite (i.e. le coordinate dei punti stazionari della sequenza all'interno dello spazio delle variabili di stato e dei parametri operativi e gli istanti di switch) con $(4 \cdot n + 4 \cdot m)$ vincoli di disuguaglianza lineare (i.e. $(x_i, u_i) \in C$ e $(x_i, u_i) \in B_\delta(x_{i+1}, u_{i+1})$) ed n vincoli di uguaglianza non lineare (i.e. $F(x_i, u_i) = 0 \forall i$). Attraverso implementazione di metodologie di continuazione parametrica, è sviluppato, nel successivo paragrafo, uno schema numerico che riduce in modo significativo le dimensioni del

problema di ottimizzazione descritto, garantendo, contestualmente, il rispetto dei vincoli di uguaglianza non lineare (i.e. vincoli di stazionario).

5.2 Formulazione dell' algoritmo di scheduling ottimo

Si assuma il campo $F(x, u)$ in (5.1.1) differenziabile e $\text{rank}[D_{(x,u)}F(x, u)] = n + m$ in corrispondenza di punti stazionari $(x, u) \in E$. E' allora possibile provare che l'insieme $E \subset \mathbb{R}^{n+m}$ dei punti stazionari del sistema dinamico (5.1.1) descrive una varietà differenziabile di dimensione m in \mathbb{R}^{n+m} (Isidori, 1995). Quando la precedente caratterizzazione dell'insieme dei punti stazionari del sistema dinamico (5.1.1) risulti valida, è possibile definire una trasformazione differenziabile ed invertibile (i.e. diffeomorfismo) $\phi(s): D \subseteq \mathbb{R}^m \rightarrow E \subseteq \mathbb{R}^{n+m}$ che stabilisce una corrispondenza tra punti dello spazio \mathbb{R}^m e punti stazionari del sistema dinamico (5.1.1). La trasformazione $\phi(s)$ fornisce una esauriente caratterizzazione dell'insieme dei punti stazionari del sistema dinamico (5.1.1) attraverso l'introduzione di un nuovo sistema di coordinate $s \equiv (s_1, \dots, s_m)$ lungo la varietà $E \subset \mathbb{R}^{n+m}$ (fig. 5.2.1). Infatti, attraverso la trasformazione $\phi(s)$, ogni punto stazionario (x, u) del sistema dinamico (5.1) può essere identificato con il punto $s \in D \subseteq \mathbb{R}^m$ tale per cui risulti $(x, u) = \phi(s)$.

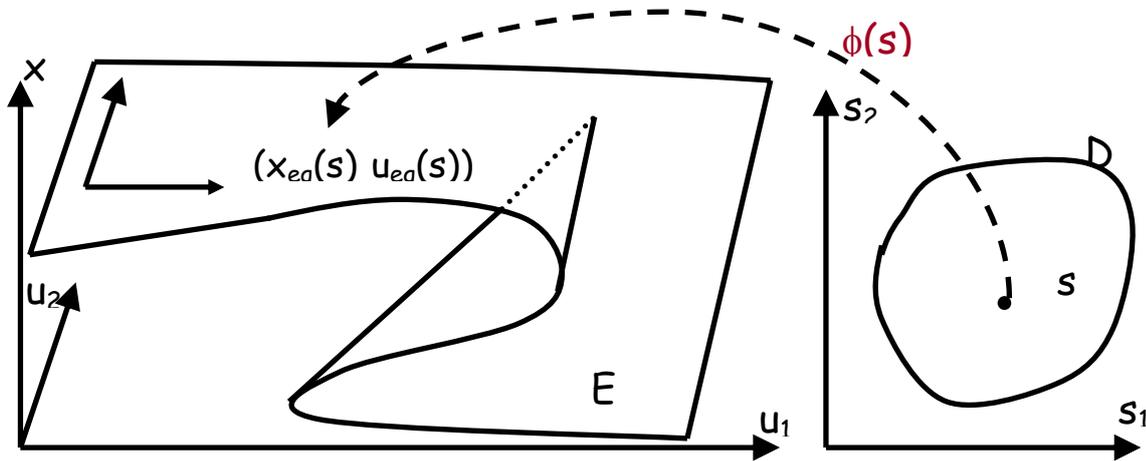


fig. 5.2.1 Rappresentazione parametrica dell'insieme dei punti stazionari di un sistema dinamico non lineare.

La trasformazione $\phi(s)$ può essere costruita differenziando ambo i membri dell'equazione $F(x(s), u(s))=0$ come segue:

$$D_{(x,u)}F(x, u) \cdot \frac{\partial(x, u)}{\partial s} = 0 \quad (5.2.1)$$

Fissato un punto stazionario $(x, u) \in E \subseteq \mathbb{R}^{n+m}$, l'equazione vettoriale (5.2.1) definisce m sistemi di equazioni lineari omogenei di dimensione $(n+m)$. Ciascuno dei sistemi di equazioni lineari in (5.2.1) presenta $(n+m)$ incognite definite dal vettore $\frac{\partial(x, u)}{\partial s_i} \in \mathbb{R}^{n+m}$, $i = 1 \dots m$. Elementari risultati di algebra lineare garantiscono la possibilità di rappresentare le soluzioni di (5.2.1) attraverso combinazione lineare degli elementi di una base $B \equiv \{\gamma_1(x, u), \dots, \gamma_k(x, u)\}$ dello spazio vettoriale $\text{Ker}[D_{(x,u)}F(x, u)]$ (Isidori, 1995). Pertanto, la mappa $\varphi(s)$ può essere costruita attraverso la seguente composizione:

$$\varphi(s) = (x(s), u(s)) = \varphi_1^{s_m} \circ \varphi_2^{s_{m-1}} \circ \dots \circ \varphi_k^{s_1}(x_0, u_0) = \Phi^{(s_1, \dots, s_m)}(x_0, u_0) \quad (5.2.2)$$

dove il punto stazionario (x_0, u_0) è l'origine del nuovo sistema di coordinate introdotto lungo la varietà E dalla mappa $\varphi(s)$, e $\Phi_i^s = \varphi_i(s)$ è l'operatore di evoluzione del sistema dinamico descritto attraverso l'equazione differenziale vettoriale $\frac{\partial(x(s), u(s))}{\partial s_i} = \gamma_i(x(s), u(s))$. In questa direzione, il problema di determinazione della mappa $\varphi(s)$ può essere ricondotto alla risoluzione del sistema di equazioni differenziali:

$$\frac{\partial(x(s), u(s))}{\partial s_i} = \gamma_i(x(s), u(s)) \quad i=1 \dots m \quad (5.2.3)$$

La risoluzione delle (5.2.3) può essere condotta quando una base $B \equiv \{\gamma_1(x, u), \dots, \gamma_k(x, u)\}$ dello spazio vettoriale $\text{Ker}[D_{(x,u)}F(x, u)]$ sia disponibile. A questo proposito, i metodi di continuazione parametrica basati su equazioni differenziali (Seydel, 1994) forniscono utili strumenti ai fini della determinazione della base B . Si osservi, inoltre, come per applicazioni di dimensione contenuta (i.e. $(n+m) < 6$) una base dello spazio vettoriale $\text{Ker}[D_{(x,u)}F(x, u)]$ possa essere facilmente ottenuta in forma analitica attraverso implementazione dell'istruzione "NullSpace" disponibile nel software Mathematica.

Quando la trasformazione $\varphi(s)$ sia stata determinata attraverso implementazione di algoritmi numerici di continuazione parametrica o, in forma analitica, attraverso implementazione dell'istruzione "NullSpace" disponibile nel software Mathematica, è allora possibile identificare

sequenze $p_r \in S[(x_0, u_0), (x_t, u_t)]$ in $E \subseteq \mathbb{R}^{n+m}$ attraverso sequenze $v_r \equiv \{\{s_i\}_{i=1..r} : s_i \in \mathbb{R}^{n+m} \forall i=1..r\}$ in $D \subseteq \mathbb{R}^m$ (fig. 5.2.2).

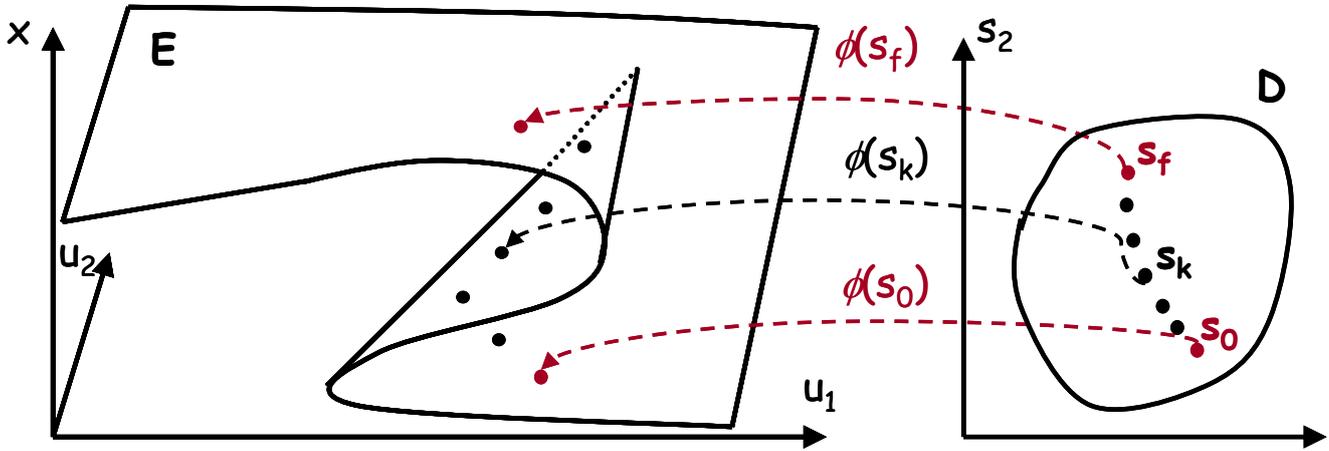


fig. 5.2.2 rappresentazione parametrica di sequenze di punti stazionari di un sistema dinamico non lineare

L'implementazione della trasformazione $\phi(s)$ riconduce, pertanto, la determinazione di una sequenza di punti stazionari $p_r \in S[(x_0, u_0), (x_t, u_t)]$ in $E \subseteq \mathbb{R}^{n+m}$ alla determinazione di una sequenza $v_r \equiv \{\{s_i\}_{i=1..r} : s_i \in \mathbb{R}^{n+m} \forall i=1..r\}$ in $D \subseteq \mathbb{R}^m$ e riduce le dimensioni del problema di ottimizzazione (5.1.8) da $(r-2) \cdot (n+m) + (r+1)$ a $(r-2) \cdot m + (r+1)$. Il maggiore vantaggio di implementazione della trasformazione $\phi(s)$, ai fini della risoluzione numerica del problema di ottimizzazione (5.1.8), risiede, tuttavia, nella possibilità di escludere vincoli di uguaglianza non lineari (i.e. vincoli di stazionario) quando si implementi l'algoritmo di ottimizzazione (5.1). Infatti, poiché la trasformazione $\phi(s) = (x(s), u(s))$ assicura, per definizione, che risulti $F(x(s), u(s)) = 0$, fissata una sequenza $v_r \equiv \{\{s_i\}_{i=1..r} : s_i \in \mathbb{R}^{n+m} \forall i=1..r\}$ in $D \subseteq \mathbb{R}^m$ la corrispondente sequenza $\phi(v_r) \equiv \{\{(x(s_i), u(s_i))\}_{i=1..r} : (x(s_i), u(s_i)) \in \mathbb{R}^{n+m} \forall i=1..r\}$ di certo soddisfa i vincoli di stazionario. Non vi è, quindi, ragione di verificare, nel corso dell'implementazione dell'algoritmo di ottimizzazione, il rispetto dei vincoli di uguaglianza non lineare. Pertanto, l'algoritmo di ottimizzazione (5.1.1) è modificato secondo lo schema di figura 5.2.3 ed formulato come segue:

Algoritmo 5.2.1

- In corrispondenza dell'iterazione k-sima, l'unità di ottimizzazione esterna, sulla base di precedenti valutazioni delle derivate dell'integrale dei costi di processo (i.e. $\partial J(\varphi(s_r^k), T_r)/\partial s_r$) e delle funzioni di vincolo (i.e. $\partial V(\varphi(s_r^k), T_r)/\partial s_r$) effettua un aggiornamento $\delta v_r(k) \equiv \{\delta \bar{s}_i(k)\}_{i=1\dots r}$ della sequenza corrente $v_r(k-1) \equiv \{\bar{s}_i(k-1)\}_{i=1\dots r}$ conducendo alla determinazione della sequenza $v_r(k) \equiv \{\bar{s}_i(k)\}_{i=1\dots r} \equiv \{\bar{s}_i(k-1) + \delta \bar{s}_i(k)\}_{i=1\dots r}$.
- La sequenza $v_r(k) \equiv \{\bar{s}_i(k)\}_{i=1\dots r}$ è quindi segnalata all'unità di continuazione parametrica che determina attraverso implementazione della mappa $\varphi(s)$ la corrispondente sequenza di punti stazionari $\varphi(v_r(k))$.
- La sequenza $\varphi(v_r(k))$ è quindi segnalata all'unità di ottimizzazione interna che determina attraverso implementazione di un algoritmo di ottimizzazione sequenziale (par. 5.1) la sequenza crescente di istanti di tempo $T_r^*(\varphi(v_r(k)))$ che minimizza l'integrale della funzione dei costi di processo $J(\varphi(v_r(k)), T_r)$. In questa fase, attraverso implementazione di una prefissata strategia di controllo, sono determinati i sistemi di controllo di retroazione che rendono stabili il sistema dinamico (5.1.1) nell'intorno di ciascun punto della sequenza $\varphi(v_r(k))$.
- La determinazioni dell'integrale della funzione dei costi di processo $J(\varphi(v_r(k)), T_r^*(\varphi(v_r(k))))$ e delle funzioni di vincolo $V(\varphi(v_r(k)), T_r^*(\varphi(v_r(k))))$ sono quindi restituite all'unità di ottimizzazione esterna. Questa, sulla base di precedenti valutazioni delle derivate della funzione obiettivo e delle funzioni di vincolo, effettua un controllo per verificare se la coppia $(\varphi(v_r(k)), T_r^*(\varphi(v_r(k))))$ minimizza la funzione $J(\varphi(v_r(k)), T_r)$.
- La sequenza di azioni descritte è quindi ripetuta sino alla determinazione di una coppia (p_r, T_r) che minimizza la funzione obiettivo e contestualmente garantisce rispetto dei vincoli.

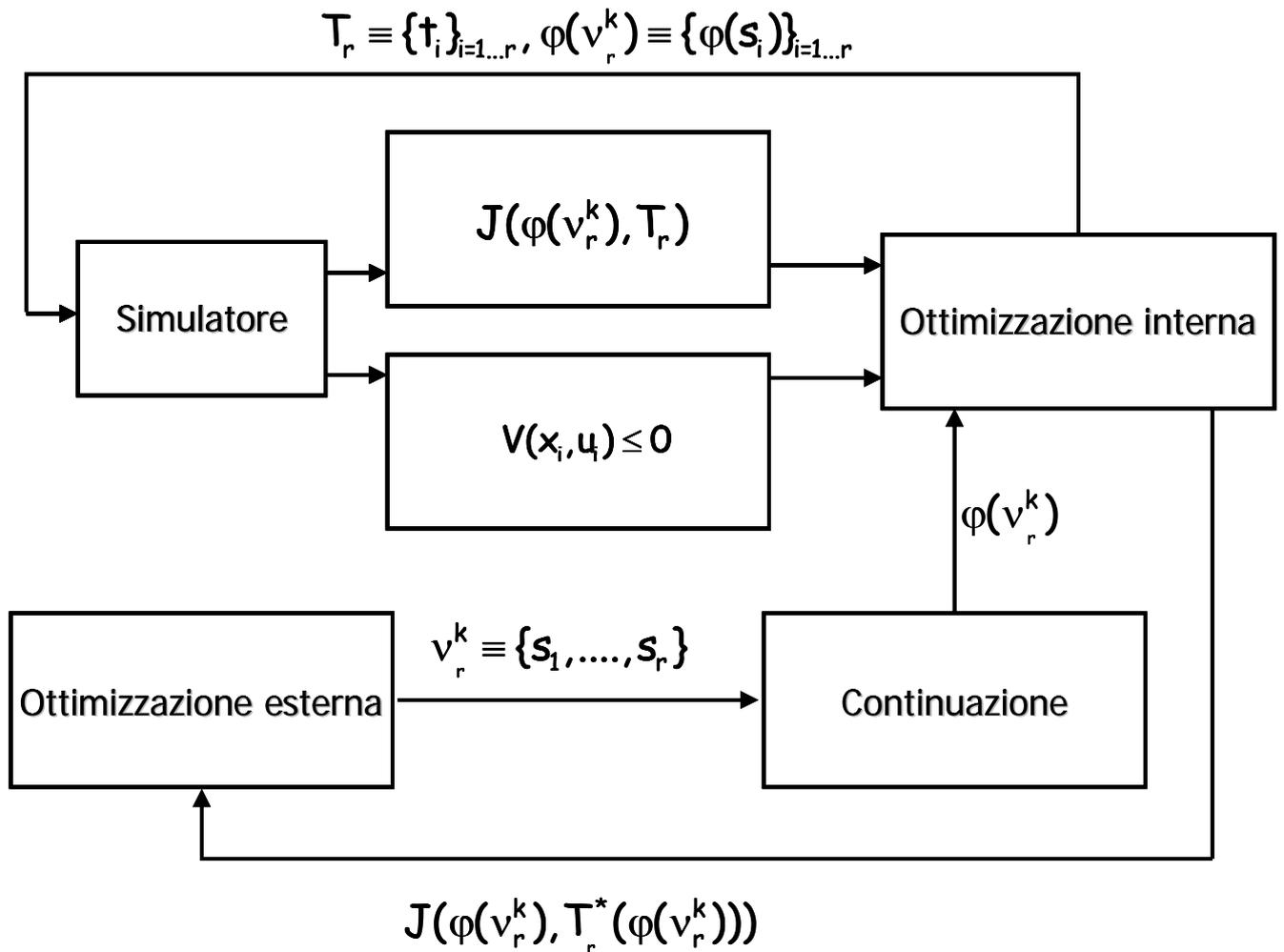


fig. 5.2.1 Schema a blocchi dell'algoritmo di ottimizzazione 5.2.

Nel successivo, paragrafo la metodologia di controllo illustrata è implementata ai fini della modificazione della soluzione di regime di un reattore continuo perfettamente miscelato all'interno del quale è condotta un reazione esotermica irreversibile.

5.3 Scheduling dinamico di un CSTR diabatico

Si prenda in esame un reattore continuo perfettamente miscelato all'interno del quale ha luogo la reazione esotermica irreversibile con cinetica del primo ordine $A \rightarrow B$. Si assuma il reattore raffreddato attraverso un fluido refrigerante circolante all'interno di una camicia esterna. In ipotesi di perfetta miscelazione e temperatura del fluido refrigerante costante, il modello matematico del reattore è il seguente:

$$\begin{aligned} \frac{dC_A}{dt} &= \frac{Q}{V} \cdot (C_{Af} - C_A) - k_0 \cdot \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \cdot C_A \\ \frac{dT}{dt} &= \frac{Q}{V} \cdot (T_f - T) - \frac{\Delta H \cdot k_0}{\rho \cdot c_p} \cdot \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \cdot C_A + \frac{U \cdot A}{V \cdot \rho \cdot c_p} \cdot (T - T_c) \end{aligned} \quad (5.3.1)$$

dove C_A è la concentrazione di uscita della specie A, T è la temperatura di esercizio del reattore, T_c è la temperatura di fluido refrigerante, Q è la portata di alimentazione. I valori assunti dai parametri del modello sono riportati in tabella 5.3.1.

ρ	1000 g/lt
c_p	0.239 J/g · °C
V	100 lt
ΔH	-5×10^4 J/mol
k_0	7.2×10^{10} min ⁻¹
$U \cdot A$	5×10^4 J/min · °C

tab. 5.3.1 valori dei parametri del modello matematico (5.3.1).

Nel seguito è mostrata l'applicazione della metodologia di scheduling (5.2.1) ai fini della gestione di transizioni di regime del modello matematico (5.3.1) in due differenti casi: a) nel caso in cui il numero di parametri operativi modificati risulti pari ad uno (i.e. $m=1$ in (5.1.1)); b) nel caso in cui la transizione sia condotta attraverso la modificazione di due parametri operativi (i.e. $m=2$ in (5.1.2)).

Caso I ($m=1$)

Si assuma la portata di alimentazione fissata al valore $Q=100$ lt. In figura 5.3.1 è riportato il diagramma delle soluzioni di regime stazionario del modello matematico (5.3.1) al variare della temperatura del fluido refrigerante.

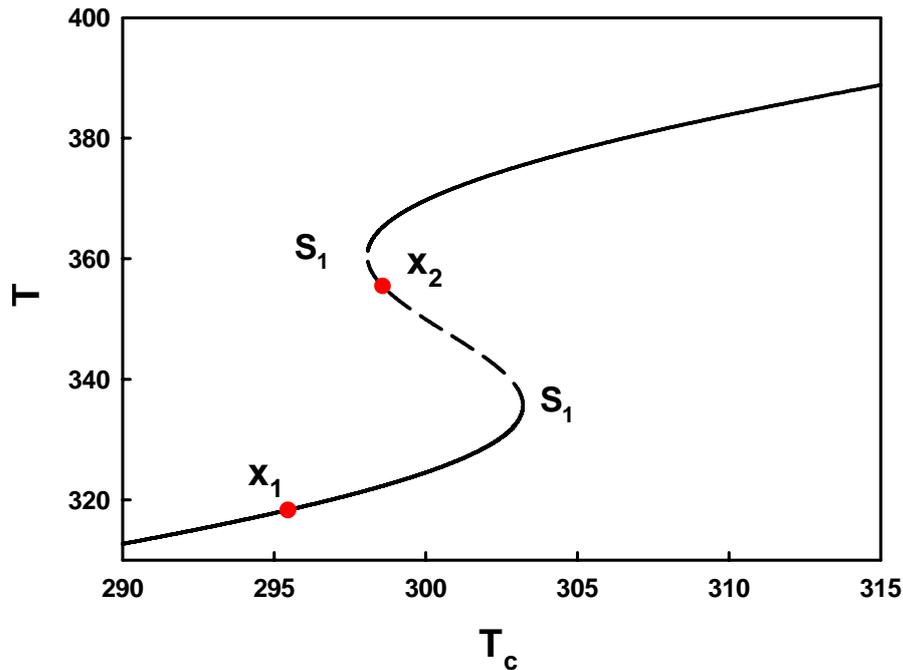


fig. 5.3.1 Diagramma delle soluzioni di regime stazionario del modello matematico (5.3.1) al variare della temperatura del fluido refrigerante.

In corrispondenza dell'intervallo di variazione della temperatura di fluido refrigerante delimitato dai punti di biforcazione sella nodo catastrofici S_1 ed S_2 si trova la coesistenza di tre soluzioni di regime stazionario: una soluzione di regime stabile di bassa conversione, una soluzione di regime instabile di conversione intermedia, ed una soluzione di regime stabile di alta conversione. Si assuma il reattore inizialmente esercito in corrispondenza della soluzione di regime stabile di bassa conversione $x_1 \equiv (C_{A,1}, T_1, T_{c,1}) \equiv (0.85, 324, 326)$ (punto x_1 in figura 5.3.1). L'obiettivo di controllo è realizzare la transizione dalla soluzione di regime stabile di bassa conversione x_1 alla soluzione di regime instabile di conversione intermedia $x_2 \equiv (C_{A,2}, T_2, T_{c,2}) \equiv (0.5, 355, 298)$ (punto x_2 in figura 5.3.1), nel rispetto dei seguenti vincoli di determinazione delle variabili di stato e delle variabili manipolabili: $0.4 < C_A < 0.8$, $320 < T < 360$, $250 < T_c < 340$. Si assuma che la temperatura di fluido refrigerante sia utilizzata come variabile manipolabile ai fini della sintesi di sistemi di controllo di retroazione locali.

Ai fini dell'implementazione della metodologia di scheduling dinamico descritta al paragrafo (5.3) è necessario definire una funzione dei costi di processo. Si è scelto, a questo proposito, di descrivere i costi di processo attraverso una deviazione quadratica delle determinazioni delle variabili di stato e delle variabili manipolabili rispetto alla soluzione di regime desiderata $x_2 \equiv (C_{A,2}, T_2, T_{c,2})$. La funzione dei costi di processo utilizzata assume pertanto la seguente espressione:

$$L(C_A, T, T_c) = a \cdot (C_A - C_{A,2})^2 + b \cdot (T - T_2)^2 + c \cdot (T_c - T_{c,2})^2 \quad (5.3.2)$$

Restano quindi da fissare, per l'implementazione della strategia di scheduling (5.2.1), il numero di punti stazionari intermedi da utilizzare (i.e. r in (5.1.8)) e la strategia di controllo di retroazione locale attraverso cui rendere stabile il modello matematico (5.3.1) nell'intorno di ciascun punto stazionario selezionato (i.e. $u(x(t), x_i, u_i)$ in (5.1.8)). In questa direzione, l'algoritmo di ottimizzazione (5.2.1) è stato implementato considerando sequenze di punti stazionari in numero $r=6$, e la stabilizzazione del modello matematico (5.3) nell'intorno di ciascun punto stazionario è stata condotta attraverso leggi di controllo lineare ad azione limitata [Lin and Sontag, 1991; El Farra and Christofides, 2003]. L'uso di questo tipo di sistemi di controllo di retroazione permette di fissare, in fase di progettazione, la massima variazione delle variabili manipolabili che può essere implementata dagli attuatori, garantendo, contestualmente, stabilità locale del sistema dinamico controllato nell'intorno del punto stazionario considerato.

In figura 5.3.2 sono riportati i risultati di implementazione della strategia di scheduling (5.2.1) nella gestione della transizione dalla soluzione di regime x_1 alla soluzione di regime x_2 . E', in particolare, mostrato un confronto tra gli andamenti nel tempo delle variabili di stato (C_A, T) (fig. 5.3.2a,b) e della variabile manipolabile T_c (fig. 5.3.2c) determinati attraverso implementazione dell'algoritmo di ottimizzazione (5.2.1) (curve in rosso) e di un algoritmo di controllo predittivo non lineare (curve in blu).

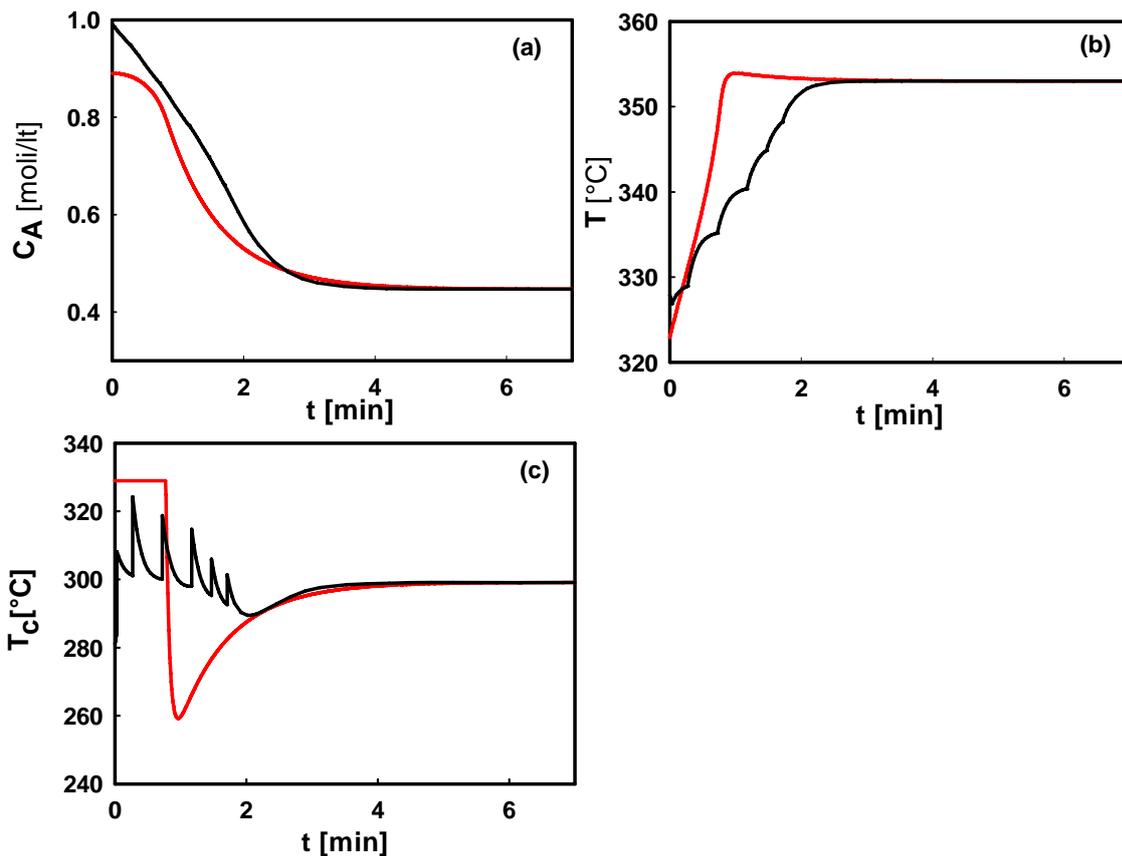


fig. 5.3.2 Andamenti nel tempo delle variabili di stato e delle variabili manipolabili in corrispondenza dell'implementazione della strategia di scheduling dinamico (5.2) (curve in nero) e di una strategia di controllo predittivo non lineare (curve in rosso); a) concentrazione di uscita delle specie A; b) temperatura di esercizio del reattore; c) temperatura di fluido refrigerante.

L'evoluzione nel tempo della temperatura di fluido refrigerante (fig. 5.3.2c) presenta rapidi incrementi in corrispondenza degli istanti di switch. Si è, infatti, osservato che l'operazione di switch prevede la determinazione di una discontinuità nella legge di controllo di retroazione locale implementata (i.e. $u(x(t), x_i, u_i) - u(x(t), x_{i+1}, u_{i+1})$) (par. 5.1). L'impiego di sistemi di controllo di retroazione locale ad azione limitata (Lin and Sontag, 1991) contiene, tuttavia, l'incremento della temperatura di fluido refrigerante in corrispondenza dello switch salvaguardando l'attuabilità della legge di controllo. L'evoluzione nel tempo delle variabili di stato e delle variabili manipolabili determinati attraverso la strategia di scheduling garantisce, pertanto, il rispetto dei vincoli di sicurezza imposti.

La strategia di scheduling assicura un periodo di transizione prossimo a quello raggiunto attraverso implementazione dell'algoritmo di controllo predittivo non lineare. Si trova, inoltre, che il controllo della temperatura di fluido refrigerante condotto attraverso scheduling risulta sensibilmente meno aggressivo rispetto a quello trovato nell'implementazione della strategia di controllo predittivo non lineare.

Caso II (m=2)

Si assuma il reattore inizialmente esercito in corrispondenza della soluzione di regime stazionario stabile di bassa conversione $x_1 \equiv (C_{A,1}, T_1, T_{c,1}, Q) \equiv (0.74, 335.58, 303.19, 100)$. L'obiettivo di controllo è realizzare la transizione dalla soluzione di regime stabile di bassa conversione x_1 alla soluzione di regime instabile di conversione intermedia $x_2 \equiv (C_{A,2}, T_2, T_{c,2}, Q_2) \equiv (0.39, 335.58, 303.19, 98)$. Ai fini dell'implementazione dell'algoritmo di ottimizzazione (5.2.1), nella gestione della transizione di regime descritta, la temperatura di fluido refrigerante è impiegata come variabile manipolabile nello sviluppo di sistemi di controllo di retroazione locali e la portata di alimentazione è gestita secondo una logica di controllo in anello aperto (i.e. assume istante per istante valori corrispondenti alla soluzione di regime stazionario corrente). Si assuma, inoltre, che la transizione di regime debba essere condotta in modo da rispettare i seguenti vincoli di determinazione delle variabili di stato e delle variabili manipolabili: $0.4 < C_A < 0.9$, $320 < T < 360$, $260 < T_c < 320$. Al fine di considerare i costi legati alla variazione della portata di alimentazione, la funzione dei costi di processo (5.3.2) è modificata, aggiungendo un termine di deviazione quadratica della portata di alimentazione rispetto al valore corrispondente alla soluzione di regime desiderata $x_2 \equiv (C_{A,2}, T_2, T_{c,2}, Q_2)$. La funzione dei costi di processo assume, pertanto, la seguente espressione:

$$L(C_A, T, T_c) = a \cdot (C_A - C_{A,2})^2 + b \cdot (T - T_2)^2 + c \cdot (T_c - T_{c,2})^2 + d \cdot (Q - Q_2)^2 \quad (5.3.3)$$

L'algoritmo di ottimizzazione (5.2.1) è quindi implementato considerando sequenze di punti stazionari in numero $r=9$ e la stabilizzazione del modello matematico (5.3), nell'intorno di ciascun punto stazionario, è realizzata attraverso leggi di controllo lineare ad azione limitata (Lin and Sontag, 1991).

In figura 5.3.3 sono riportati i risultati dell'implementazione dell'algoritmo di ottimizzazione (5.2.1) nella gestione della transizione dalla soluzione di regime x_1 alla soluzione di regime x_2 . La figure 5.3.3a ed 5.3.3b descrivono l'evoluzione nel tempo delle variabili di stato (C_A, T) del modello matematico (5.3.1) controllato attraverso la strategia di scheduling (5.2.1). Nelle figure 5.3.3c e 5.3.3d sono riportati gli andamenti di temperatura di fluido refrigerante T_c e portata di alimentazione Q imposti dal dispositivo di scheduling ai fini della determinazione della transizione di regime.

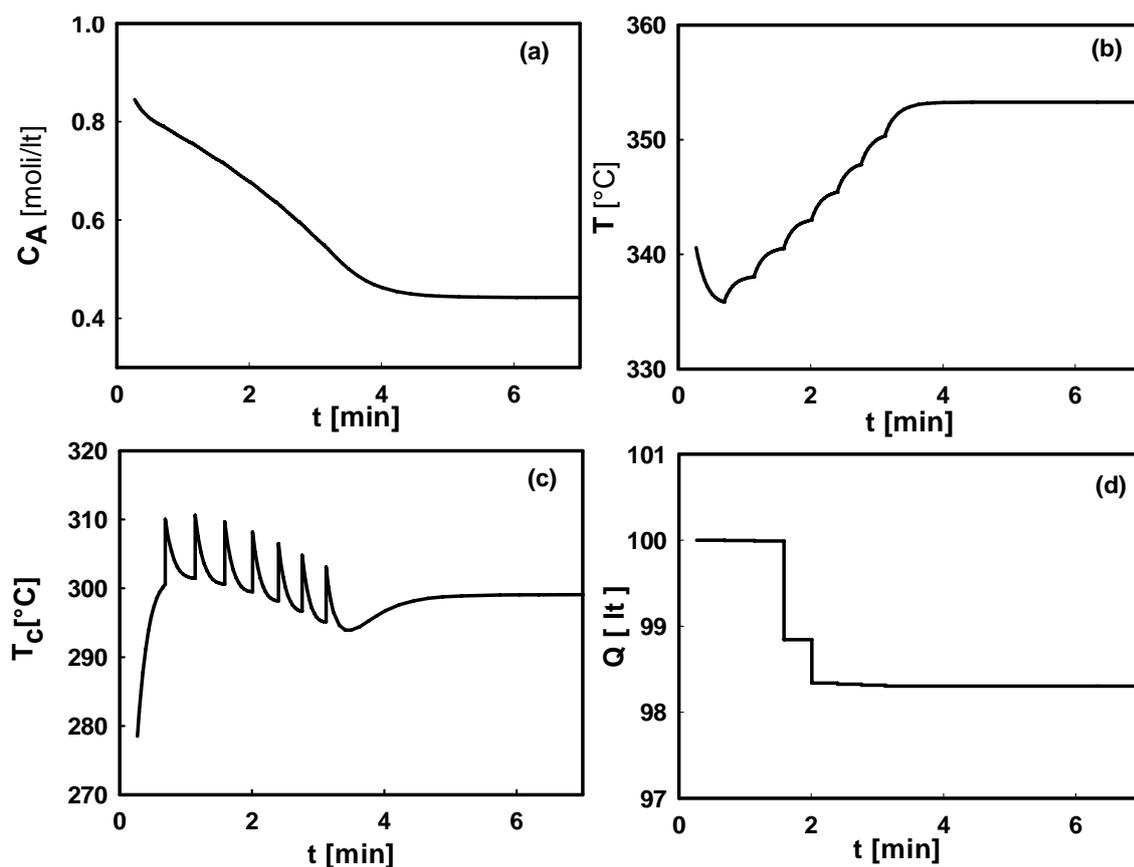


fig. 5.3.3 Andamenti nel tempo delle variabili di stato e delle variabili manipolabili corrispondenti dell'implementazione della strategia di scheduling (5.2): a) concentrazione di uscita della specie A; b) temperatura di esercizio del reattore; c) temperatura di fluido refrigerante; d) portata di alimentazione.

L'evoluzione nel tempo delle variabili di stato (C_A, T) (fig. 5.3.3a,b) e delle variabili manipolabili (T_c, Q) (fig. 5.3.3c,d) garantisce il rispetto dei vincoli di sicurezza imposti. In particolare, l'andamento della temperatura di fluido refrigerante implementato dal dispositivo di scheduling risulta poco aggressivo e garantisce un modesto periodo di transizione.

5.4 Controllo di transizioni di regime attraverso scheduling statico

La strategia di scheduling illustrata al paragrafo (5.2) prevede la determinazione della sequenza di punti stazionari $p_r \in S[(x_0, u_0), (x_t, u_t)]$ e della sequenza di istanti di switch $T_r \equiv (t_1, \dots, t_r)$ attraverso minimizzazione dell'integrale nel tempo della funzione dei costi di processo $L=L(x(t), u(t))$. L'operazione di minimizzazione è condotta attraverso una coppia di successivi stadi di ottimizzazione (algoritmo 5.2). Al fine di ridurre l'onere computazionale inerente allo scheduling di transizioni di regime di sistemi dinamici non lineari, si propone in questo paragrafo un algoritmo di ottimizzazione stazionaria della sequenza $p_r \in S[(x_0, u_0), (x_t, u_t)]$. A tal fine, una stima dei costi inerenti alla gestione di transizioni di regime è condotta sulla base delle determinazioni delle

variabili di stato e delle variabili manipolabili in corrispondenza dei punti stazionari della sequenza $p_r \in S[(x_0, u_0), (x_t, u_t)]$. In particolare, si assume che la funzione dei costi di processo presenti la seguente espressione:

$$J(p_r) = \sum_{i=1}^r (x_i - x_t)^T \cdot M \cdot (x_i - x_t) + (u_i - u_t)^T \cdot N \cdot (u_i - u_t) + \sum_{k=1}^{r-1} u(x_{k+1}, x_k, u_k)^T \cdot T \cdot u(x_{k+1}, x_k, u_k)^T \quad (5.4.1)$$

dove M , N , T sono matrici di pesi definite positive. La prima somma in (5.4.1) descrive una deviazione delle determinazioni delle variabili di stato e delle variabili manipolabili corrispondenti dei punti stazionari (x_i, u_i) della sequenza $p_r \in S[(x_0, u_0), (x_t, u_t)]$ rispetto alla soluzione di regime stazionario desiderata (x_t, u_t) . La seconda somma in (5.4.1) descrive una misura della variazione delle variabili manipolabili che è necessario implementare ai fini del raggiungimento della soluzione di regime stazionario desiderata (x_t, u_t) . Per convincersi di ciò, si osservi che (in accordo alla simbologia descritta al paragrafo 5.1) il termine $u(x_k, x_{k+1}, u_{k+1})$ definisce l'azione del sistema di controllo di retroazione locale che rende stabile il punto stazionario (x_{k+1}, u_{k+1}) quando lo stato del sistema è fissato al punto stazionario (x_k, u_k) , e descrive, pertanto, una misura della variazione delle variabili manipolabili necessaria a realizzare la transizione dalla soluzione di regime (x_k, u_k) alla soluzione di regime (x_{k+1}, u_{k+1}) .

Pertanto, la determinazione della distribuzione di punti stazionari $p_r \in S[(x_0, u_0), (x_t, u_t)]$ è condotta attraverso risoluzione del seguente problema di programmazione non lineare vincolato (Floudas, 1999):

$$J(p_r) = \min_{p_r \in S[(x_0, u_0), (x_t, u_t)]} \sum_{i=1}^r (x_i - x_t)^T \cdot M \cdot (x_i - x_t) + (u_i - u_t)^T \cdot N \cdot (u_i - u_t) + \sum_{k=1}^{r-1} u(x_{k+1}, x_k, u_k)^T \cdot T \cdot u(x_{k+1}, x_k, u_k)^T \quad (5.4.2)$$

$$\text{s.t. } (x_i, u_i) \in C \quad \forall i \in I \equiv \{1, \dots, r\}$$

Si rinuncia, in questa direzione, alla contestuale determinazione della sequenza di punti stazionari $p_r \in S[(x_0, u_0), (x_t, u_t)]$ e della sequenza di istanti di switch $T_r \equiv (t_1, \dots, t_r)$. Il problema di

programmazione vincolato (5.4.2) presenta $(r-2) \cdot (n+m)$ incognite (i.e. le coordinate dei punti stazionari della sequenza all'interno dello spazio delle variabili di stato e dei parametri operativi) con $(4 \times n + 4 \cdot m)$ vincoli di disuguaglianza lineare (i.e. $(x_i, u_i) \in C$ e $(x_i, u_i) \in B_\delta(x_{i+1}, u_{i+1})$) ed n vincoli di uguaglianza non lineare (i.e. $F(x_i, u_i) = 0 \quad \forall i$). La caratterizzazione dell'insieme dei punti stazionari del sistema dinamico non lineare (5.1.1) sviluppata al paragrafo (5.2) permette tuttavia di identificare sequenze di punti stazionari $p_r \in S[(x_0, u_0), (x_r, u_r)]$ in $E \subseteq \mathbb{R}^{n+m}$ attraverso sequenze $v_r \equiv \left\{ \left\{ s_i \right\}_{i=1 \dots r} : s_i \in \mathbb{R}^{n+m} \quad \forall i=1 \dots r \right\}$ in $D \subseteq \mathbb{R}^m$ e riduce, pertanto, le dimensioni del problema di programmazione (5.4.2) da $(r-2) \cdot (n+m) + (r+1)$ a $(r-2) \cdot m + (r+1)$, garantendo, contestualmente, il rispetto dei vincoli di stazionario. L'algoritmo di risoluzione numerica del problema di programmazione (5.4.2) è pertanto formulato come segue:

Algoritmo 5.4.1

- In corrispondenza dell'iterazione k -sima, l'unità di ottimizzazione, sulla base di precedenti valutazioni delle derivate dell'integrale dei costi di processo (i.e. $\partial J(\varphi(s_r^k)) / \partial s_r$) e delle funzioni di vincolo (i.e. $\partial V(\varphi(s_r^k)) / \partial s_r$) effettua un aggiornamento $\delta v_r(k) \equiv \left\{ \delta \bar{s}_i(k) \right\}_{i=1 \dots r}$ della sequenza corrente $v_r(k-1) \equiv \left\{ \bar{s}_i(k-1) \right\}_{i=1 \dots r}$ conducendo alla determinazione della sequenza $v_r(k) \equiv \left\{ \bar{s}_i(k) \right\}_{i=1 \dots r} \equiv \left\{ \bar{s}_i(k-1) + \delta \bar{s}_i(k) \right\}_{i=1 \dots r}$.
- La sequenza $v_r(k) \equiv \left\{ \bar{s}_i(k) \right\}_{i=1 \dots r}$ è quindi segnalata all'unità di continuazione parametrica, che determina, attraverso implementazione della mappa $\varphi(s)$ (par. 5.2), la corrispondente sequenza di punti stazionari $\varphi(v_r(k))$.
- Attraverso determinazione della sequenza di punti stazionari $\varphi(v_r(k))$ è condotta una valutazione della funzione dei costi di processo $J(\varphi(v_r(k)))$ e delle funzioni di vincolo $V(\varphi(v_r(k)))$. In questa fase, attraverso implementazione di una prefissata strategia di controllo, sono determinati i sistemi di controllo di retroazione che rendono stabili il sistema dinamico (5.1.1) nell'intorno di ciascun punto della sequenza $\varphi(v_r(k))$.
- La determinazioni della funzione dei costi di processo $J(\varphi(v_r(k)), T_r^*(\varphi(v_r(k))))$ e delle funzioni di vincolo $V(\varphi(v_r(k)), T_r^*(\varphi(v_r(k))))$ sono quindi restituite all'unità di ottimizzazione. Questa, sulla base di precedenti valutazioni delle derivate della funzione obiettivo e delle

funzioni di vincolo, effettua un controllo per verificare se la sequenza $\varphi(v_r(k))$ minimizza la funzione $J(\varphi(v_r(k)))$.

- La sequenza di azioni descritte è quindi ripetuta sino alla determinazione di una coppia $v_r(k) \equiv \{\bar{s}_i(k)\}_{i=1\dots r}$ che minimizza la funzione dei costi (5.4.2) e contestualmente garantisce il rispetto dei vincoli.

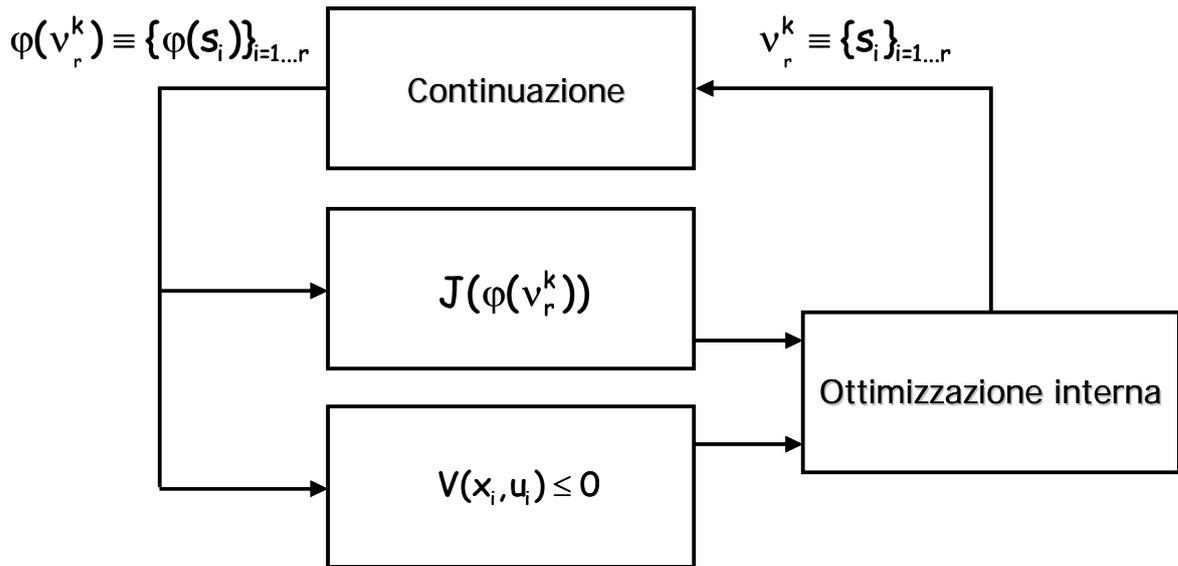


fig. 5.4.1 Schema a blocchi dell'algoritmo di ottimizzazione 5.4.1

Nel successivo paragrafo, è illustrata l'implementazione dell'algoritmo di ottimizzazione descritto ai fini della programmazione della transizione tra due soluzioni di regime stazionario instabili di un reattore continuo perfettamente miscelato.

5.5 Scheduling statico di un CSTR diabatico

Si prenda in esame il modello matematico (5.3.1) descrivente il comportamento dinamico di un reattore continuo perfettamente miscelato diabatico all'interno del quale ha luogo una reazione esotermica irreversibile con cinetica del primo ordine. I valori dei parametri del modello sono riportati in tabella (5.3.1).

Si assuma il reattore sia inizialmente esercito in corrispondenza della soluzione di regime stazionario instabile $x_1 \equiv (C_{A,1}, T_1, T_{c,1}, Q_1) \equiv (0.5, 349.6, 300.11, 100)$. L'obiettivo di controllo è realizzare la transizione dalla soluzione di regime stazionario x_1 alla soluzione di regime stazionario instabile $x_2 \equiv (C_{A,2}, T_2, T_{c,2}, Q_2) \equiv (0.49, 352.96, 293.60, 120.97)$. Si assumano i seguenti

vincoli di determinazione delle variabili di stato e delle variabili manipolabili: $0.48 < C_A < 0.51$, $348 < T < 361$, $260 < T_c < 320$, $90 < Q < 150$. La programmazione della transizione dal punto stazionario x_1 al punto stazionario x_2 è condotta attraverso implementazione dell'algoritmo di ottimizzazione 5.4.1. A tal fine, la temperatura di fluido refrigerante è impiegata come variabile manipolabile per la sintesi di sistemi di controllo di retroazione locali e la portata di alimentazione è gestita secondo una logica di controllo in anello aperto (i.e. assume istante per istante valore corrispondente alla soluzione di regime stazionario corrente). Ai fini del controllo del modello matematico (5.3.1) nell'intorno di ciascun punto stazionario sono stati sviluppati sistemi di controllo di retroazione locali ad azione limitata [Lin and Sontag, 1991; El Farra and Christofides, 2003]. Nella determinazione della funzione dei costi di processo (5.4.2) si è, quindi, assunto $M \equiv (20, 0; 0, 1)$, $N \equiv (20, 0; 0, 20)$, $T \equiv (20, 0; 0, 20)$. In figura 5.5.1 è mostrata la distribuzione di punti stazionari determinata attraverso implementazione dell'algoritmo (5.4.1). In figura 5.5.1a sono riportati i valori di portata di alimentazione e di temperatura di fluido refrigerante, ed in figura 5.5.1b i valori di temperatura di esercizio del reattore e di concentrazione della specie A corrispondenti delle soluzioni di regime stazionario determinate.

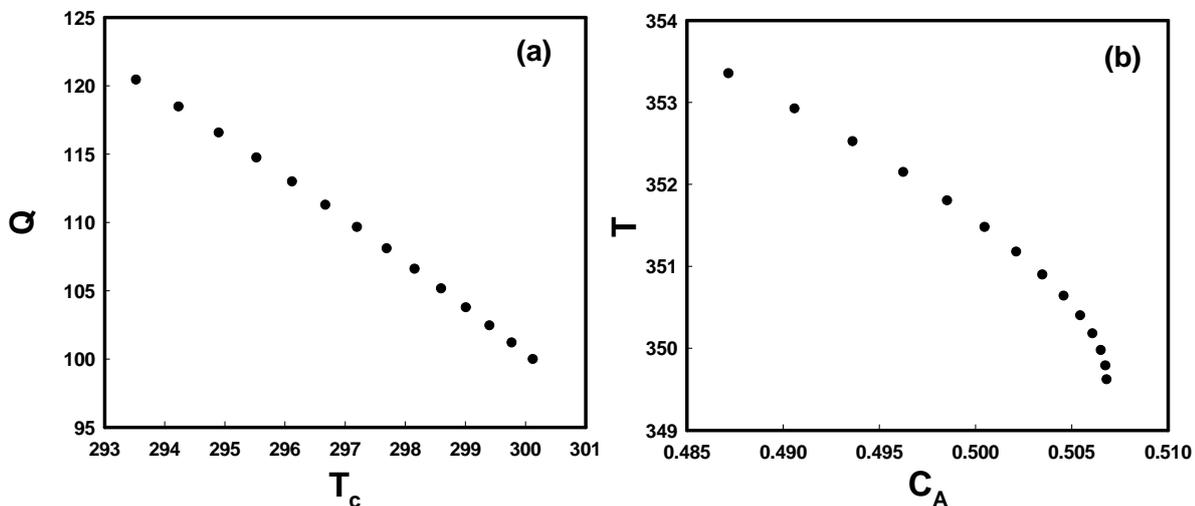


fig. 5.5.1 Soluzioni di regime stazionario determinate attraverso minimizzazione stazionaria della funzione dei costi di processo; a) determinazioni della temperatura di fluido refrigerante e della portata di alimentazione; b) determinazioni della temperatura di esercizio del reattore e della concentrazione in uscita della specie A.

I punti della sequenza rispettano i vincoli di determinazione delle variabili di stato e delle variabili manipolabili. La distanza tra due successivi punti della sequenza (i.e. $\delta \equiv (\delta_x, \delta_u)$) è stata inoltre

scelta opportunamente piccola in modo da garantire la possibilità di effettuare transizioni da un punto stazionario al successivo senza violare nel tempo i vincoli imposti.

Al fine di minimizzare il periodo di transizione e, contestualmente, garantire il rispetto dei vincoli di determinazione delle variabili di stato e delle variabili manipolabili, l'operazione di switch dei sistemi di controllo di retroazione locali è stata condotta attraverso una strategia reference-governor (Bemporad, 1998; Gilbert, 2002). In questa direzione, fissata la sequenza di punti stazionari $\{(C_{A,i}, T_i, T_{c,i}, Q_i)\}_{i=1\dots 9}$, attraverso implementazione dell'algoritmo 5.4.1, ripetute simulazioni numeriche del modello matematico (5.3.1) sono state condotte in successivi istanti di tempo al fine di massimizzare l'indice della sequenza rappresentativo del sistema di controllo locale verso cui effettuare lo switch, e verificare il rispetto dei vincoli di determinazione delle variabili di stato e delle variabili manipolabili. I risultati di implementazione della strategia di reference-governor sono riportati in figura (5.5.2). In particolare, la figura 5.5.2a descrive l'evoluzione della temperatura di fluido refrigerante determinata attraverso switch dei sistemi di controllo di retroazione locali secondo la strategia di reference-governor. In figura 5.5.2b è quindi riportato il corrispondente andamento della temperatura di esercizio del reattore e della concentrazione di uscita della specie A.

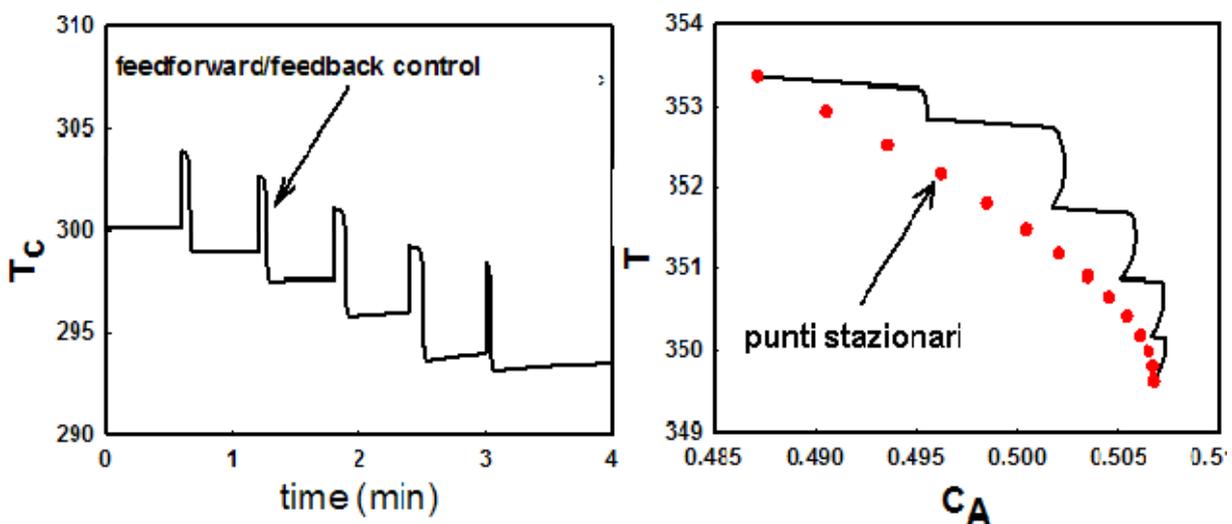


fig. 5.5.2 a) andamento della temperatura di fluido refrigerante; b) andamenti della temperatura di esercizio del reattore e della concentrazione di uscita della specie A

La gestione, attraverso reference-governor, del sistema di scheduling sviluppato garantisce il rispetto dei vincoli di determinazione delle variabili di stato e delle variabili manipolabili e contestualmente un modesto periodo di transizione.

5.6 Conclusioni

E' stato affrontato, in questo capitolo, il problema di controllo di transizioni di regime di reattori chimici. E' stato presentato, in questa direzione, un algoritmo di scheduling dinamico che permette di minimizzare il periodo di transizione garantendo contestualmente il rispetto dei vincoli di determinazione delle variabili manipolabili e delle variabili di stato. L'algoritmo proposto, porta allo sviluppo di un sistema di scheduling dove la distribuzione di punti stazionari e la sequenza di istanti di switch dei sistemi di controllo di retroazione locali sono determinate attraverso minimizzazione dell'integrale nel tempo di una funzione dei costi di processo. L'implementazione della strategia di scheduling dinamico proposta è stata illustrata attraverso il controllo di transizioni di regime stazionario di un reattore continuo perfettamente miscelato dove sia condotta una reazione esotermica irreversibile. Al fine di ridurre l'onere computazionale necessario ai fini dello sviluppo del sistema di scheduling, è stata successivamente proposta una strategia di scheduling statico. Si è, in particolare, rinunciato alla determinazione della sequenza ottimale di istanti di switch dei sistemi di controllo di retroazione locale mentre la distribuzione di punti stazionari intermedi è stata condotta attraverso minimizzazione statica di una funzione dei costi di processo.

Capitolo 6

Controllo della distanza da punti di biforcazione

L'implementazione delle metodologie di bifurcation tailoring e di ottimizzazione del comportamento biforcazionale di un sistema dinamico, presentate ai capitoli 3 e 4, restituisce, attraverso misure in linea di disturbi, la determinazione di una legge di variazione delle variabili manipolabili finalizzata alla determinazione del desiderato (resp. ottimizzato) diagramma delle soluzioni di regime di un sistema dinamico. Il diagramma delle soluzioni di regime di sistemi controllati in anello aperto, attraverso le metodologie illustrate, rivela frequentemente la presenza di punti di biforcazione lungo il ramo di soluzioni di regime desiderate. Le soluzioni di regime desiderate possono, pertanto, risultare instabili all'interno di ampi intervalli di variazione del parametro di biforcazione. Le motivazioni della instabilità delle soluzioni di regime desiderate sono state ampiamente discusse. La stabilizzazione del ramo di soluzioni di regime desiderate è stata condotta attraverso l'introduzione di sistemi di controllo in retroazione.

Non è stato, tuttavia, prodotto uno studio dei costi inerenti alla stabilizzazione di soluzioni di regime instabili attraverso retroazione. Quando si trovino determinazioni eccessive dell'energia di controllo (incremento dei costi di processo conseguente di variazioni delle variabili manipolabili) e/o della rapidità di variazione delle manipolabili, richieste ai fini della stabilizzazione, l'impiego di sistemi di controllo in retroazione risulta inadeguato.

In questi casi è auspicabile che il ramo di soluzioni di regime desiderate risulti invariabilmente stabile all'interno dell'intervallo di variazione del parametro di biforcazione esaminato, escludendo o ridimensionando l'azione di sistemi di controllo in retroazione. Questo obiettivo può essere raggiunto attraverso una modificazione dell'algoritmo di ottimizzazione (3.2.8)-(3.2.11) del diagramma delle soluzioni di regime di un sistema dinamico quando espressioni funzionali della distanza di condizioni operative di funzionamento da punti di biforcazione risultino disponibili. E' allora possibile introdurre vincoli di stabilità robusta delle soluzioni di regime desiderate all'interno dell'algoritmo di ottimizzazione (3.2.8)-(3.2.11). In particolare, i vincoli di stabilità robusta devono imporre che la distanza delle condizioni operative di funzionamento, corrispondenti delle soluzioni di regime desiderate, dal più vicino punto di biforcazione, sia maggiore di un prefissato margine. In funzione della dimensione del margine prefissato, il ramo di soluzioni di regime, individuato attraverso l'algoritmo di ottimizzazione (3.2.8)-(3.2.11), risulterà più o meno robusto rispetto a variazioni delle condizioni operative di funzionamento e delle incertezze nelle previsioni del modello matematico utilizzato nella descrizione della dinamica.

Il problema di determinazione dei punti di biforcazione maggiormente prossimi alle condizioni operative di funzionamento di un sistema di processo è stato oggetto di crescente interesse della comunità scientifica nel corso dell'ultimo decennio [Dobson, 2002]. Innumerevoli metodologie di valutazione della distanza delle condizioni operative di funzionamento da luoghi di punti di biforcazione sono stati proposti. Esempi di algoritmi di valutazione dei più vicini punti di biforcazione prevedono l'implementazione di algoritmi di ottimizzazione genetica [Dong et al., 1998;] e metodi di continuazione parametrica [Canizares, 1998; Makarov and Hiskens, 1994].

Seguendo l'idea sviluppata in [Dobson, 1993] il problema di determinazione dei punti di biforcazione maggiormente prossimi alle condizioni operative di funzionamento di un sistema di processo è formulato come un problema di minimizzazione della distanza da varietà multidimensionali dello spazio dei parametri. Un algoritmo di determinazione della distanza minima da luoghi di punti di biforcazione ed una modificazione dell'algoritmo di ottimizzazione (3.2.8)-(3.2.11), conseguente dell'introduzione di vincoli di stabilità robusta, sono quindi illustrati. La discussione è condotta in riferimento a biforcazioni di codimensione unitaria di regimi stazionari di sistemi dinamici tempo continui.

Nel paragrafo 6.1 è illustrata la metodologia di determinazione della distanza delle condizioni operative di funzionamento da luoghi di punti di biforcazione. E', contestualmente, suggerita un'implementazione in anello aperto della metodologia illustrata al fine di garantire stabilità robusta delle soluzioni di regime desiderate rispetto a disturbi misurabili lentamente variabili. Nel paragrafo 6.2 sono riportati i risultati dell'implementazione in linea della metodologia illustrata ai fini del controllo della distanza da un luogo di punti di biforcazione di Hopf, nella gestione di un reattore continuo perfettamente miscelato dove sia condotta una reazione esotermica irreversibile.

6.1 Determinazione della distanza da luoghi di punti di biforcazione attraverso ottimizzazione

Si prenda in esame il sistema dinamico:

$$\frac{dx}{dt} = F(x, \alpha) \quad (6.1.1)$$

con $x \in \mathbb{R}^n$ vettore delle variabili di stato, $\alpha \in \mathbb{R}^m$ vettore dei parametri del sistema dinamico. Si prenda in esame il sistema di equazioni non lineari descrivente l'insieme delle soluzioni di regime stazionario del sistema dinamico (6.1.1):

$$F(x, \alpha) = 0 \quad (6.1.2)$$

Sia $(x^{(0)}, \alpha^{(0)})$ una soluzione del sistema di equazioni non lineari (6.1.2). Quando lo jacobiano del campo F risulti non singolare in $(x^{(0)}, \alpha^{(0)})$ il sistema di equazioni non lineari (6.1.2) descrive, al variare del vettore dei parametri α una varietà differenziabile di dimensione m nell'intorno del punto $(x^{(0)}, \alpha^{(0)})$ dello spazio \mathbb{R}^{n+m} :

$$M^s = \{(x, \alpha) \in \mathbb{R}^{n+m} \text{ t.c } F(x, \alpha) = 0 \} \quad (6.1.3)$$

I punti di biforcazione delle soluzioni di regime stazionario del sistema dinamico (6.1.1) possono essere valutati accoppiando il sistema di equazioni non lineari (6.1.2) ad un secondo sistema di equazioni non lineari. In particolare i luoghi dei punti di biforcazione di soluzioni di regime stazionario del sistema dinamico (6.1.1) sono implicitamente definiti attraverso sistemi di equazioni non lineari nella forma:

$$\begin{aligned} F(x, \alpha) &= 0 \\ G(x, \tilde{x}, \alpha) &= 0 \end{aligned} \quad (6.1.4)$$

dove $\tilde{x} \in \mathbb{R}^l$ è un vettore di variabili ausiliarie. Il significato del vettore di variabili ausiliarie $\tilde{x} \in \mathbb{R}^l$, della funzione vettoriale $G(x, \tilde{x}, \alpha) \in \mathbb{R}^{l+\text{codim}}$ sarà chiarito tra breve attraverso un esempio. Si assumerà nel seguito, al fine di semplificare la notazione:

$$\begin{aligned} \Psi &= (F, G) \\ \xi &= (x, \tilde{x}) \end{aligned} \quad (6.1.5)$$

Quando lo jacobiano della funzione vettoriale Ψ è non singolare nella soluzione $(x^{(0)}, \tilde{x}^{(0)}, \alpha^{(0)})$ di (6.1.3), la risoluzione del sistema di equazioni non lineari (6.1.4), al variare del vettore dei parametri $\alpha \in \mathbb{R}^m$, descrive, in un intorno della soluzione $(x^{(0)}, \tilde{x}^{(0)}, \alpha^{(0)})$ una varietà differenziabile di dimensione $(m - \text{codim})$ dello spazio \mathbb{R}^{n+l+m} :

$$M^c = \left\{ (x, \tilde{x}, \alpha) \in \mathbb{R}^{n+1+m} \text{ t.c. } \Psi(x, \tilde{x}, \alpha) = 0 \right\} \quad (6.1.6)$$

E' inoltre possibile provare che l'insieme dei vettori normali alla variet  differenziabile implicitamente definita dal sistema di equazioni non lineari (6.1.4)   generato dalla seguente base di vettori:

$$b_1 = \begin{pmatrix} \nabla_{\xi} \Psi_1 \\ \nabla_q \Psi_1 \end{pmatrix}, \dots, b_{n+1+\text{codim}} = \begin{pmatrix} \nabla_{\xi} \Psi_{n+1+\text{codim}} \\ \nabla_q \Psi_{n+1+\text{codim}} \end{pmatrix} \quad (6.1.7)$$

Poich  siamo interessati a determinare la distanza da luoghi di punti di biforcazione nello spazio dei parametri dobbiamo prendere in esame vettori normali alla variet  differenziabile implicitamente definita da (6.1.4) che presentino componenti nulle rispetto alle prime n+1 variabili. Queste variabili si riferiscono infatti al vettore delle variabili di stato x e al vettore delle variabili ausiliarie \tilde{x} . Pertanto dovranno ricercarsi vettori $k \in \mathbb{R}^{n+1+m}$ tale per cui risulti:

$$\begin{pmatrix} \nabla_{\xi} \Psi_1 | \dots | \nabla_{\xi} \Psi_{n+1+\text{codim}} \end{pmatrix} k = 0 \quad (6.1.8)$$

$$k_0 k - 1 = 0$$

dove k_0   un vettore non normale a k. La seconda equazione nelle (6.1.8) assicura l'esclusione della soluzione banale $k = 0$ nella risoluzione delle (6.1.8). In questa direzione un vettore normale alla proiezione, nello spazio dei parametri, del luogo dei punti di biforcazione descritto in (6.1.4) pu  essere espresso come combinazione lineare delle restanti componenti dei vettori dello spazio normale:

$$n = \begin{pmatrix} \nabla_{\xi} \Psi_1 | \dots | \nabla_{\xi} \Psi_{n+1+\text{codim}} \end{pmatrix} k \quad (6.1.9)$$

Pertanto, quando risulti nota la funzione vettoriale G   possibile determinare attraverso la procedura descritta una dipendenza funzionale per i vettori normali ai luoghi di punti delle biforcazioni nello spazio dei parametri.

Al fine di chiarire il significato della funzione vettoriale G riportata in (6.1.4) si riporta di seguito, come esempio, il sistema di equazioni non lineari che dovrebbe essere risolto ai fini della determinazione dei punti di biforcazione di Hopf del sistema dinamico (6.1.1):

$$\begin{aligned}
F &= 0 \\
F_x w^{(1)} + \omega w^{(2)} &= 0 \\
F_x w^{(2)} - \omega w^{(1)} &= 0 \\
\bar{w}^T w - 1 &= 0 \\
w^{(1)T} w^{(2)} &= 0
\end{aligned} \tag{6.1.10}$$

La biforcazione di Hopf è una biforcazione dinamica di soluzioni di regime stazionario che si trova quando una coppia di autovalori complessi coniugati attraversa l'asse immaginario con derivata prima non nulla della parte reale degli autovalori rispetto al parametro di biforcazione. In (6.1.10), F_x è lo jacobiano del campo F , $w = w^{(1)} + iw^{(2)}$ è uno dei due autovettori corrispondenti agli autovalori critici della matrice jacobiana F_x , $\lambda = i\omega$ il corrispondente autovalore, e \bar{w} il complesso coniugato dell'autovettore w [Kutnetsov,1999]. Le (6.1.10) descrivono un sistema di equazioni non lineari nelle $3n + 2$ incognite $((x_1, \dots, x_n, w_1^{(1)}, \dots, w_n^{(1)}, w_1^{(2)}, \dots, w_n^{(2)}, \omega, q_1)$. In tal caso, in particolare risulta, con riferimento alla notazione precedentemente utilizzata $l = 2n + 2$ e $\text{codim} = 1$, mentre la funzione G riportata in (6.1.4) è descritta dalle ultime quattro equazioni vettoriali riportate in (6.1.10).

Quando la determinazione di vettori normali ai luoghi dei punti di biforcazione nello spazio dei parametri è condotta attraverso la procedura precedentemente descritta è possibile modificare l'algoritmo di ottimizzazione del diagramma delle soluzioni di regime presentato in (3.1.8)-(3.1.11) in modo da garantire robusta stabilità delle soluzioni di regime desiderate rispetto a disturbi nelle condizioni operative di funzionamento. In particolare, l'algoritmo assume la forma:

$$(g(p), q(p)) = \min_{x,q} \varphi(x, p, q) \quad p \in [p_a, p_b] \tag{6.1.11}$$

$$F(g(p), p, q(p)) = 0 \tag{6.1.12}$$

$$F(x_c, p_c, q_c) = 0 \tag{6.1.13}$$

$$G(x_c, \bar{x}_c, p_c, q_c) = 0 \tag{6.1.14}$$

$$d \cdot n - (\alpha_c - \alpha) = 0 \tag{6.1.15}$$

$$d > 0 \tag{6.1.16}$$

$$l_i < g_i(p) < m_i \quad i = 1, \dots, m \tag{6.1.17}$$

$$r_i < q_i(p) < w_i \quad i = 1, \dots, m \tag{6.1.18}$$

con $\alpha = (p, q)$. Nelle precedenti p_c, q_c devono intendersi come determinazioni del vettore delle variabili di stato, del vettore dei parametri di biforcazione e del vettore dei parametri operativi in corrispondenza del punto di biforcazione maggiormente prossimo, nello spazio dei parametri, alle condizioni operative di funzionamento correnti p, q . Il versore n , in (6.1.15), individua la direzione dello spazio dei parametri passante per il punto delle condizioni operative di funzionamento correnti p, q e normale al luogo dei punti di biforcazione. Pertanto, le (6.1.15)-(6.1.16) impongono che la distanza lungo la direzione definita dal versore n sia pari ad un limite d . In questa direzione d fornisce una misura della robustezza delle soluzioni di regime desiderate.

Nel successivo paragrafo è riportata un'applicazione dell'algoritmo di ottimizzazione (6.1.11)-(6.1.18) ai fini del controllo di un reattore perfettamente miscelato all'interno dove sia condotta una reazione esotermica irreversibile.

6.2 Controllo della distanza da punti di biforcazione di Hopf nella gestione di un processo reattivo esotermico irreversibile

Si prenda in esame un reattore perfettamente miscelato raffreddato attraverso un fluido circolante all'interno di una camicia esterna, all'interno del quale sia condotta la reazione esotermica irreversibile con cinetica del primo ordine:



Le equazioni di bilancio di materia ed energia in forma adimensionale assumono, pertanto, la forma:

$$\frac{du_a}{dt} = Q \cdot (u_{a_m} - u_a) - Da \cdot \exp\left(\frac{\theta \gamma_1}{\gamma_1 + \theta}\right) \cdot u_a \quad (6.2.2)$$

$$\frac{d\theta}{dt} = Q \cdot (\theta_{in} - \theta) + B \cdot Da \cdot \exp\left(\frac{\theta \gamma_1}{\gamma_1 + \theta}\right) \cdot u_a - St \cdot (\theta - \theta_c) \quad (6.2.3)$$

Il significato dei gruppi dimensionali riportati in (6.2.2) ed (6.2.3) è descritto in tabella al termine della relazione.

In figura 6.2.1 è riportato il diagramma delle soluzioni di regime del reattore al variare della temperatura di alimentazione. Come variabile di stato rappresentativa dello stato del sistema di è scelta la temperatura di esercizio del reattore.

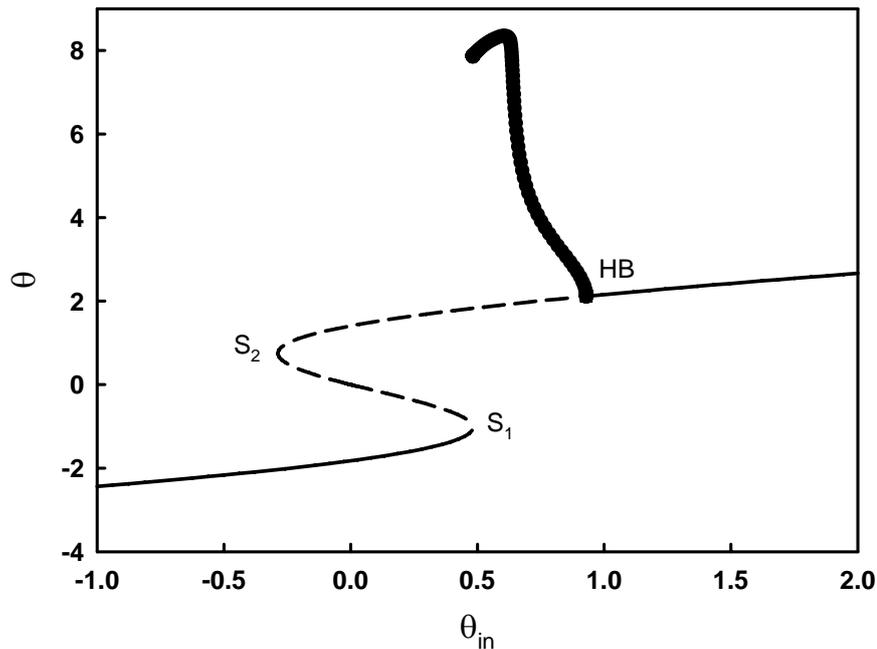


fig. 6.2.1 Diagramma delle soluzioni di regime al variare della temperatura di alimentazione.

In corrispondenza di elevate temperature di alimentazione θ_{in} si trova un'unica soluzione di regime stazionario stabile di alta conversione. Al diminuire del parametro di biforcazione la soluzione di regime di alta conversione diviene instabile per effetto di una biforcazione di Hopf supercritica, trovandosi la nascita di un ramo di soluzioni di regime periodico. Le soluzioni di regime periodico si estinguono, al diminuire della temperatura di alimentazione, per effetto di un biforcazione globale omoclinica. All'interno dell'intervallo delimitato dai punti di biforcazione sella nodo S_1 ed S_2 si trova coesistenza di tre soluzioni di regime stazionario: una soluzione di regime stazionario stabile di bassa conversione, una soluzione di regime stazionario instabile di alta conversione, ed una soluzione di regime stazionaria instabile intermedia. In corrispondenza di valori del parametro di biforcazione inferiori del punto di biforcazione sella nodo S_2 si trova un'unica soluzione di regime stazionario stabile di bassa conversione.

L'analisi biforcazionale del reattore suggerisce determinazioni della temperatura di alimentazione maggiori del punto di biforcazione di Hopf HB, garantendo il raggiungimento di una soluzione di regime stazionario stabile di alta conversione. Quando il reattore sia esercito nelle condizioni operative di funzionamento descritte una riduzione della temperatura di alimentazione può condurre alla nascita di ampie oscillazioni autonome della temperatura di esercizio del reattore.

Attraverso l'algoritmo di determinazione della distanza minima da luoghi di punti di biforcazione descritto al precedente paragrafo è stato quindi sviluppato un sistema di controllo in anello aperto in modo da garantire robustezza delle condizioni operative di funzionamento rispetto a variazioni della

temperatura di alimentazione. Come variabile manipolabile è stata assunta la temperatura del fluido refrigerante circolante all'interno della camicia esterna.

In figura 6.2.2 sono riportati i risultati dell'implementazione dell'algoritmo di controllo.

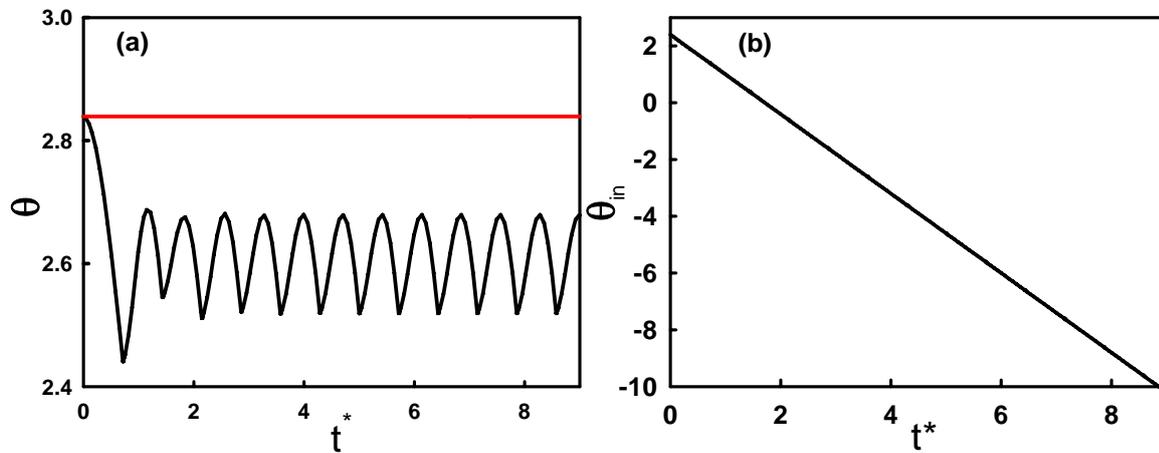


fig. 6.2.2 (a) Simulazione numerica della temperatura di esercizio del reattore controllato in anello aperto; (b) andamento nel tempo della temperatura di alimentazione.

La figura 6.2.2a descrive l'andamento della temperatura di esercizio del reattore quando la temperatura di alimentazione segue l'andamento riportato in figura 6.2.2b. La figura 6.2.2b descrive l'andamento della temperatura di fluido refrigerante imposto dal sistema di controllo in anello aperto al variare della temperatura di alimentazione. La determinazione di un ritardo nell'implementazione dell'algoritmo di controllo produce discontinuità nella derivata prima dei profili della temperatura di esercizio. In particolare, il ritardo nell'implementazione dell'algoritmo di controllo restituisce una deviazione, mediamente costante nel tempo, della temperatura di esercizio del reattore rispetto al corrispondente valore ottimale (riportato in rosso).

L'azione del sistema di controllo in anello aperto è illustrata in figura 6.2.3.

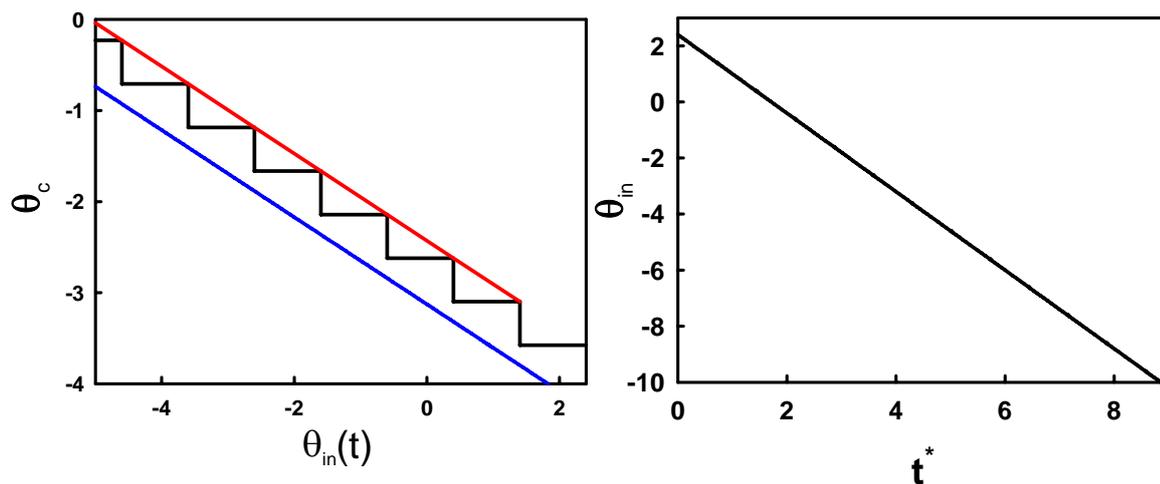


fig. 6.2.3 (a) Andamento della temperatura del fluido refrigerante imposto dal sistema di controllo in anello aperto al variare della temperatura di alimentazione; (b) andamento nel tempo della temperatura di alimentazione.

La figura 6.2.3a descrive l'andamento della temperatura di fluido refrigerante imposto dal sistema di controllo in anello aperto quando la temperatura di alimentazione segue l'andamento riportato in figura 6.2.3b. In figura 6.2.3a si trova a causa del ritardo nell'implementazione dell'algoritmo di controllo un'evoluzione a gradino della temperatura del fluido refrigerante al diminuire della temperatura di alimentazione. Tuttavia l'andamento della temperatura di fluido refrigerante non segue mediamente nel tempo il profilo ottimale riportato in rosso. In particolare, nonostante il disturbo indotto attraverso ritardo nell'implementazione dell'azione di controllo si trova che le condizioni operative di funzionamento non superano in alcuna occasione il limite costituito dal luogo dei punti di biforcazione di Hopf (riportato in blu).

6.3 Conclusioni

E' stata presentata, in questo capitolo, una metodologia di controllo delle biforcazioni in anello aperto finalizzata a garantire stabilità robusta delle soluzioni di regime di un sistema dinamico non lineare al variare di disturbi misurabili lentamente variabili. La metodologia illustrata esamina l'eventualità in cui, nell'implementazione della metodologia di ottimizzazione del comportamento biforcazionale, l'introduzione di un sistema di controllo in anello chiuso, ai fini della stabilizzazione delle soluzioni di regime desiderate, risulti inadeguata. In tal caso il sistema di controllo in anello aperto deve garantire stabilità delle soluzioni di regime desiderate. Questo obiettivo è stato raggiunto introducendo all'interno dell'algoritmo di ottimizzazione del diagramma delle soluzioni di regime vincoli che tengono conto della distanza delle condizioni operative di funzionamento dai punti di biforcazione vicini. E' stato in questo modo sviluppato un algoritmo di controllo in anello aperto in grado di assicurare stabilità delle soluzioni di regime desiderate e prefissati margini delle

condizioni operative di funzionamento rispetto a luoghi di punti di biforcazioni catastrofiche. Sono stati, in questa direzione, illustrati i risultati di implementazione della metodologia illustrata ai fini del controllo della distanza da un luogo di punti di biforcazione di Hopf nella gestione di un reattore continuo perfettamente miscelato dove sia condotta una reazione esotermica irreversibile.

Capitolo 7

Riduzione della dimensione di modelli ai principi primi

Centrale ai fini della progettazione di un robusto ed efficiente sistema di controllo è la riduzione dei complessi modelli matematici descriventi la dinamica di reattori chimici. Modelli ai principi primi sono frequentemente descritti da sistemi di equazioni differenziali alle derivate parziali non lineari. Tradizionali schemi di riduzione (elementi finiti, residui pesati, etc.) conducono alla determinazione di sistemi di equazioni differenziali ordinarie di ordine particolarmente elevato, inadeguati ai fini del raggiungimento di obiettivi di controllo.

L'impiego di modelli di dimensioni ridotte risulta, intanto, determinante ai fini di una accurata analisi dinamica del sistema di processo non controllato. Una dettagliata descrizione della dinamica del sistema non controllato può fornire preziose indicazioni in merito alla struttura di controllo maggiormente adeguata al raggiungimento degli obiettivi di processo (e.g. scelta delle variabili manipolabili), ed individua, pertanto, un'obbligata fase di studio, preliminare rispetto alla progettazione del sistema di controllo. Quando si utilizzano modelli di dimensioni elevate, l'analisi dinamica del sistema di processo al variare dei parametri operativi può risultare, tuttavia, eccessivamente onerosa sotto il profilo computazionale, in alcuni casi improponibile.

Lo sviluppo di modelli di dimensioni ridotte in grado di descrivere fedelmente la dinamica del sistema di processo nel campo di interesse delle condizioni operative di funzionamento, risulta, inoltre, determinante ai fini della efficiente implementazione della strategia di controllo. L'implementazione di strategie di controllo prevede frequentemente la risoluzione in linea di problemi di ottimizzazione attraverso integrazione numerica delle equazioni del modello (e.g. controllo ottimo, controllo predittivo). Pertanto, l'integrazione numerica di modelli di dimensioni elevate, accompagnando un notevole onere computazionale, precluderebbe la possibilità di una pronta, efficiente applicazione della legge di controllo.

La riduzione di modelli ai principi primi assume un ruolo di primo piano ai fini della progettazione di un robusto osservatore del sistema di processo. L'implementazione di strategie di controllo frequentemente richiede la determinazione in linea di tutte le variabili di stato del sistema. Nelle applicazioni, tuttavia, solo alcune variabili di stato e/o funzioni delle variabili di stato (i.e. variabili di uscita) possono essere valutate attraverso misure in linea. La completa determinazione del vettore delle variabili di stato è effettuata attraverso l'impiego di sistemi dinamici definiti osservatori. La simulazione numerica dell'osservatore consente di ricostruire il vettore delle variabili di stato a partire da misure delle variabili di ingresso e di uscita del sistema di processo. Un osservatore è un

sistema dinamico di dimensioni dell'ordine del sistema di processo. Pertanto, la determinazione in linea dello stato del sistema di processo attraverso integrazione numerica delle equazioni dell'osservatore, risulta inadeguata quando siano considerati modelli di elevate dimensioni.

Innumerevoli sforzi sono stati compiuti nel corso degli ultimi decenni nella ricerca di efficienti tecniche di riduzione di sistemi a parametri distribuiti. Un promettente approccio nell'analisi di modelli caratterizzati da forti non linearità è fornito dal metodo della proper orthogonal decomposition (POD) [Holmes et al., 1996]. Questo metodo trova il suo fondamento teorico nella natura dissipativa delle equazioni differenziali alle derivate parziali che descrivono la maggior parte dei fenomeni fisici, ed è indirizzato alla determinazione di una proiezione di dimensione finita dello spazio delle variabili di stato in infinite dimensioni. Nell'applicazione del metodo della proper orthogonal decomposition una proiezione dello spazio delle variabili di stato è realizzata in modo da catturare i modi dominanti del comportamento dinamico del sistema di processo. Preliminarmente, attraverso applicazione di tradizionali schemi di discretizzazione, l'originario sistema di equazioni differenziali alle derivate parziali è ridotto ad un sistema di equazioni differenziali ordinarie di elevate dimensioni. Dettagliate simulazioni numeriche del sistema di equazioni differenziali ordinarie così ottenuto sono quindi condotte variando i parametri e le condizioni iniziali all'interno del campo di interesse. I dati acquisiti attraverso simulazione numerica sono successivamente impiegati ai fini della determinazione di una base di funzioni definita nello spazio delle variabili di stato (metodo delle snapshots) [Graham and Kevrekidis, 1996]. La base funzionale individuata attraverso proper orthogonal decomposition risulta ottimale ai fini della descrizione del comportamento dinamico del sistema. Infatti è possibile mostrare che, a parità di numero di elementi considerati, la base in questo modo determinata consente di realizzare proiezioni dello spazio di stato che meglio catturano i modi del comportamento dinamico del sistema di processo rispetto a qualsivoglia altra base di funzioni [Graham and Kevrekidis, 1996].

Ampiamente utilizzato ai fini della caratterizzazione di strutture coerenti in flussi di moto turbolento [Holmes et al., 1996; Berkooz et al., 1993; Sirovich, 1987], e nell'analisi del comportamento dinamico di sistemi caotici [Sirovich and Rodriguez, 1987], il metodo della proper orthogonal decomposition ha trovato nel corso degli ultimi anni frequenti applicazioni nella riduzione di modelli di equazioni differenziali alle derivate parziali ai fini della progettazione di sistemi di controllo [Alonso et al. (1,2), 2004; Atwell and King, 2004; Kunisch et al., 2004; Lall et al., 2002; Ravindran, 2002; Banks et al., 2002; Shvartsman et al., 2000; Banks et al., 2000].

Recentemente uno studio dell'osservabilità di sistemi a parametri distribuiti, attraverso applicazione del metodo della proper orthogonal decomposition, è stata condotta da Kevrekidis ed i suoi collaboratori. In particolare, un criterio di localizzazione di sensori di misura, ottimale ai fini della

ricostruzione del campo delle variabili di stato, è stato sviluppato, fornendo contestualmente linee guida nella progettazione di un robusto osservatore di sistemi a parametri distribuiti [Alonso et al. (1,2), 2004].

Un esempio di applicazione del metodo della proper orthogonal decomposition nell'analisi di problemi di controllo predittivo ad orizzonte infinito di sistemi a parametri distribuiti è riportato in [Kunisch et al., 2004].

L'applicazione del metodo della proper orthogonal decomposition prevede la determinazione di una base funzionale dello spazio di stato attraverso analisi statistica dei dati risultanti di una collezione di dettagliate simulazioni numeriche (snapshots). Il modello sviluppato risulterà chiaramente predittivo nella regione dello spazio di stato e dei parametri preliminarmente caratterizzata attraverso simulazione numerica. Una procedura adattativa di valutazione della base funzionale impiegata ai fini della realizzazione di una proiezione dello spazio di stato, nell'applicazione del metodo della proper orthogonal decomposition, è suggerita in [Ravindran, 2002]. La metodologia proposta prevede un continuo aggiornamento della collezione di snapshots ed è implementata nell'analisi di un problema di controllo ottimo delle equazioni di Navier-Stokes [Ravindran, 2002].

L'applicazione del metodo della proper orthogonal decomposition nella progettazione di sistemi di controllo di sistemi a parametri distribuiti è usualmente indirizzato ad una riduzione del sistema non controllato. Il modello di dimensione ridotta così ottenuto è successivamente utilizzato ai fini dell'implementazione della strategia di controllo. Atwell and King (2004) propongono, diversamente, un approccio basato su una preliminare progettazione del sistema di controllo, e la successiva riduzione dell'ordine del controllore attraverso applicazione del metodo della proper orthogonal decomposition. In [Atwell and King, 2004] è anche riportato un confronto tra i due differenti approcci.

Un'interessante discussione dell'applicazione del metodo della proper orthogonal decomposition nella riduzione di modelli di equazioni differenziali alle derivate parziali di interesse dell'ingegneria chimica è riportata in [Shvartsman et al., 2000].

Nel paragrafo 7.1 sono descritte le linee guida di applicazione del metodo della proper orthogonal decomposition ai fini della riduzione di modelli matematici descritti attraverso sistemi di equazioni differenziali alle derivate parziali. Nel paragrafo 7.2 sono riportati i risultati dell'implementazione della metodologia della proper orthogonal decomposition ai fini della riduzione del modello matematico di un combustore catalitico.

7.1 Metodo delle autofunzioni empiriche: proper orthogonal decomposition

Si prenda in esame la seguente equazione differenziale alle derivate parziali:

$$u_t = L(u) + \sigma(u) \quad (7.1.1)$$

dove $\sigma(u)$ è una funzione non lineare della variabile u ed $L(\cdot)$ descrive un operatore parabolico lineare (e.g. il termine convettivo nelle equazioni di bilancio di materia differenziale per un reattore tubolare). La soluzione $u(x,t)$ dell'equazione differenziale alle derivate parziali (7.1.1) è definita campo quando $x = (x_1, x_2, x_3)$ definisca un vettore di coordinate spaziali. L'equazione differenziale alle derivate parziali (7.1.1) descrive un sistema dinamico in infinite dimensioni. Più chiaramente, l'insieme delle variabili di stato del sistema (7.1.1) non è costituito da vettori, ovvero ennuple dello spazio \mathbb{R}^n , bensì da funzioni. Lo spazio all'interno del quale si trovano le soluzioni della (7.1.1) è, pertanto, uno spazio funzionale. Ai fini della descrizione della metodologia della proper orthogonal decomposition è essenziale estendere a spazi funzionali alcuni concetti ricorrenti nello studio di spazi vettoriali, in particolare, di prodotto interno, norma e base di uno spazio funzionale. Si riportano pertanto nel seguito la definizione prodotto interno tra due funzioni:

$$\langle f, g \rangle = \int_D f(x)g(x)dx \quad (7.1.2)$$

E' ora possibile definire in analogia al caso vettoriale la norma di una funzione. Si ricorda, infatti, che la norma di un vettore è la radice quadrata del prodotto scalare del vettore per se stesso. In modo equivalente, in accordo alla (7.1.2), definiamo la norma di una funzione f sul dominio D come segue:

$$\|f\|_2^2 = \langle f, f \rangle = \int_D f(x)f(x)dx \quad (7.1.3)$$

Nello studio degli spazi vettoriali assume notevole importanza il concetto di base. Estendiamo ora questo concetto allo studio di spazi funzionali. In particolare, si ricorda che un insieme di vettori $B = \{v_1, \dots, v_n\}$ definisce una base ortonormale dello spazio vettoriale V quando gli elementi di B risultino mutuamente ortogonali:

$$\langle v_i, v_j \rangle = \begin{cases} 1 & \text{per } i = j \\ 0 & \text{per } i \neq j \end{cases} \quad (7.1.4)$$

ed ogni elemento dello spazio vettoriale V possa essere espresso come combinazione lineare degli elementi della base B :

$$u = \sum_{i=1}^n u_i v_i \quad \forall u \in V \quad (7.1.5)$$

Gli scalari u_i definiscono le componenti del vettore u rispetto nella base B e sono dati dal prodotto scalare del vettore u per l' i -esimo elemento della base:

$$u_i = \langle u, v_i \rangle \quad (7.1.6)$$

In analogia al caso vettoriale ed in accordo alle (7.1.2) e (7.1.3) possiamo ora definire il concetto di base per spazi funzionali. Un insieme di funzioni $S = \{\Psi_i(x)\}_{i=1}^{\infty}$ di uno spazio funzionale H definisce per H una base ortonormale, quando gli elementi di S presentano prodotti scalari mutuamente nulli:

$$\langle \Psi_i, \Psi_j \rangle = \int_D \Psi_i(x) \Psi_j(x) dx = \begin{cases} 1 & \text{per } i = j \\ 0 & \text{per } i \neq j \end{cases} \quad (7.1.7)$$

ed ogni elemento dello spazio funzionale H può esprimersi come combinazione lineare degli elementi della base:

$$f(x) = \sum_{i=1}^{\infty} c_i \Psi_i \quad \forall f \in H \quad (7.1.8)$$

I coefficienti c_i definiscono le componenti della funzione f rispetto alla base B e sono dati dal prodotto scalare della funzione f per gli elementi della base S :

$$c_i = \langle f, \Psi_i \rangle = \int_D f(x) \Psi_i(x) dx \quad (7.1.9)$$

Obiettivo della metodologia della proper orthogonal decomposition è la determinazione di una base dello spazio funzionale $\{\varphi_i(x)\}_{i=1}^{\infty}$ delle soluzioni del sistema infinito dimensionale (7.1.1) in modo da esprimere la $u(x, t)$ nella seguente forma:

$$u(x, t) = \sum_{i=1}^{\infty} c_i(t) \varphi_i(x) \quad (7.1.10)$$

Nell'applicazione della metodologia (POD) la base funzionale è costituita dalle autofunzioni della funzione autocorrelazione della soluzione $u(x, t)$. In particolare le funzioni $\varphi_i(x)$ in (7.1.10) sono determinate risolvendo il seguente problema:

$$\varphi_i(x) = \mu_i \int_D R(x, x') \varphi_i(x) dx \quad (7.1.11)$$

dove μ_i è l'autovalore associato all'i-esima autofunzione $\varphi_i(x)$ ed $R(x, x')$ è la funzione di autocorrelazione della soluzione $u(x, t)$:

$$R(x, x') = \int_{t=0}^{t=\infty} u(x, t) u(x', t) dt \quad (7.1.12)$$

Nella pratica, il sistema dinamico (7.1.1) è inizialmente ridotto ad un sistema di equazioni differenziali ordinarie (di solito in numero molto elevato) attraverso tradizionali schemi di discretizzazione (e.g. elementi finiti). Si realizza quindi una fitta rete di simulazioni numeriche del sistema così ottenuto. Sulla base dei risultati della simulazioni numeriche è successivamente prodotta una rappresentazione in forma discreta della funzione di autocorrelazione. La (7.1.12) si riduce pertanto ad una matrice, ed il problema descritto in (7.1.11) si riduce alla determinazione degli autovettori ed autovalori della matrice di autocorrelazione.

La base ottenuta attraverso l'applicazione della metodologia (POD) risulta ottimale. E' infatti possibile dimostrare che, l'errore (in media quadratica) che si commette nella descrizione del comportamento con la base (POD) è sempre inferiore, a parità di numero di funzioni della base considerati, all'errore commesso utilizzando qualsivoglia altra base funzionale.

Una volta determinata una base funzionale (POD), il sistema (7.1.1) può essere ridotto attraverso proiezione lungo le autodirezioni della funzione di autocorrelazione. La natura dissipativa delle

equazioni di bilancio di materia, energia e quantità di moto impone che pochi elementi della base individuata sono generalmente sufficienti a descrivere il comportamento dinamico del sistema in prossimità di una soluzione di regime. In particolare, e' possibile dimostrare che gli elementi della base che descrivono meglio la dinamica del sistema sono quelli corrispondenti agli autovalori in valori assoluto più alti della funzione di autocorrelazione. Pertanto fissato un numero finito $\{\varphi_i(x)\}_{i=1}^k$ di elementi della base si trova che risulta:

$$u(x, t) \sim \sum_{i=1}^k c_i(t) \varphi_i(x) \quad (7.1.13)$$

La determinazione di un sistema di dimensione ridotta è quindi realizzata proiettando le (7.1.1) lungo le funzioni $\{\varphi_i(x)\}_{i=1}^k$ che meglio descrivono la dinamica del sistema. In particolare si impone:

$$\langle u_t - L(u) - \sigma(u), \varphi_j \rangle = 0 \quad (7.1.14)$$

dove la $u(x, t)$ è espressa attraverso la (7.1.13). Si giunge, pertanto, alla formulazione di un sistema di equazioni differenziali ordinarie di dimensione k nelle incognite componenti $\{c_i(t)\}_{i=1}^k$ della funzione $u(x, t)$:

$$c_t = Ac + f(c) \quad (7.1.15)$$

Nel successivo paragrafo un'applicazione della metodologia (POD) è presentata nella riduzione del modello matematico di un reattore a letto catalitico.

7.2 Riduzione della dimensione del modello matematico di un reattore a letto catalitico attraverso proper orthogonal decomposition

Nel seguito si riporta la descrizione del modello matematico di un reattore a letto catalitico di combustione di miscele gassose a basso tenore di composti organici volatili.

Il modello si basa sulle seguenti assunzioni:

- 1) La fase gassosa è assunta ideale.
- 2) Le capacità termiche e i coefficienti di trasporto sono considerati indipendenti dalla temperatura e dalla conversione del sistema.

- 1) Si trascurano le variazioni della densità della fase gassosa
- 2) La dispersione assiale di materia è caratterizzata da un coefficiente di dispersione effettivo.
- 3) La conduzione assiale, sia in fase gas che in fase solida, è caratterizzata da un coefficiente effettivo di conduttività.
- 4) I gradienti di temperatura e concentrazione radiali si ritengono trascurabili.
- 5) Si assume una cinetica allo stato stazionario.
- 6) I gradienti intraparticellari di temperatura e concentrazione si ritengono trascurabili.
- 7) Si trascurano le variazioni di pressione lungo il reattore.

In base alle precedenti ipotesi si hanno i seguenti bilancio di materia e di entalpia:

Bilanci di massa ed energia nella fase gassosa:

$$\frac{\partial y_g}{\partial \tau} = \frac{1}{Pe_m^g} \frac{\partial^2 y_g}{\partial z^2} - \frac{\partial y_g}{\partial z} + J_m^g (y_s - y_g) \quad (7.2.1)$$

$$\frac{\partial \theta_g}{\partial \tau} = \frac{1}{Pe_h^g} \frac{\partial^2 \theta_g}{\partial z^2} - \frac{\partial \theta_g}{\partial z} + J_h^g (\theta_s - \theta_g) - a_w (\theta_g - \theta_w) \quad (7.2.2)$$

Bilanci di massa ed energia nella fase solida:

$$\frac{\partial y_s}{\partial \tau} = -J_m^s (y_s - y_g) + \eta \cdot Da \cdot (1 - y_s) \cdot \exp\left(\frac{\theta_s}{1 + \frac{\theta_s}{\gamma}}\right) \quad (7.2.3)$$

$$\frac{\partial \theta_s}{\partial \tau} = \frac{1}{Pe_h^s} \frac{\partial^2 \theta_s}{\partial z^2} - J_h^s (\theta_s - \theta_g) + B \cdot \eta \cdot Da \cdot (1 - y_s) \cdot \exp\left(\frac{\theta_s}{1 + \frac{\theta_s}{\gamma}}\right) \quad (7.2.4)$$

Le variabili dipendenti ed indipendenti delle quattro equazioni sono state adimensionalizzate nel seguente modo:

$$z = x/L \quad \tau = v \cdot t/L \quad y = (c_0 - c)/c_0 \quad \theta = E(T - T_0)/RT_0^2 \quad (7.2.5)$$

dove L è la lunghezza del reattore, c_0 è la concentrazione d'ingresso e T_0 è una temperatura di riferimento.

I parametri adimensionali adottati sono i seguenti:

$$Da = L \cdot k_0 \cdot \exp(-E/RT_0) / v \cdot (1 - \varepsilon) \quad (7.2.6)$$

$$\gamma = E/RT_0 \quad (7.2.7)$$

$$Pe_m^g = L \cdot v / D_{ea} \quad (7.2.8)$$

$$Pe_h^g = \rho_g \cdot c_{pg} \cdot v \cdot L / \lambda_{eg} \quad (7.2.9)$$

$$Pe_h^g = \rho_s \cdot c_{ps} \cdot v \cdot L / \lambda_{es} \quad (7.2.10)$$

$$J_m^g = k_g \cdot a_v \cdot L / v \cdot \varepsilon \quad (7.2.11)$$

$$J_m^g = k_g \cdot a_v \cdot L / v \cdot (1 - \varepsilon) \quad (7.2.12)$$

$$J_h^g = h_f \cdot a_v \cdot L / \rho_g \cdot c_{pg} \cdot v \cdot \varepsilon \quad (7.2.13)$$

$$J_h^g = h_f \cdot a_v \cdot L / \rho_s \cdot c_{ps} \cdot v \cdot (1 - \varepsilon) \quad (7.2.14)$$

$$a_w = 4 \cdot h_w \cdot L / \rho_g \cdot c_{pg} \cdot v \cdot \varepsilon \cdot d_r \quad (7.2.15)$$

$$B = \Delta H \cdot c_0 \cdot E / \rho_s \cdot c_{ps} \cdot RT_0^2 \quad (7.2.16)$$

Le condizioni al contorno adimensionalizzate sono:

$$1) z = 0 \quad (7.2.17)$$

$$\frac{\partial y_g}{\partial z} - Pe_m^g y_g = 0 \quad ; \quad \frac{\partial \theta_g}{\partial z} - Pe_h^g \theta_g = 0$$

$$\frac{\partial y_s}{\partial z} = 0 \quad ; \quad \frac{\partial \theta_s}{\partial z} = 0$$

$$2) z = 1 \quad (7.2.18)$$

$$\frac{\partial y_s}{\partial z} = 0 \quad ; \quad \frac{\partial y_g}{\partial z} = 0 \quad ; \quad \frac{\partial \theta_s}{\partial z} = 0 \quad ; \quad \frac{\partial \theta_g}{\partial z} = 0$$

Il modello matematico (7.2.1)-(7.2.4) con le condizioni al contorno (7.2.17)-(7.2.18) è stato preliminarmente ridotto ad un sistema di 108 equazioni differenziali ordinarie attraverso l'applicazione della metodologia della collocazione ortogonale (Villandsen, 1977). Sulla base del sistema così ottenuto è stata condotta un'analisi biforcazionale al variare della temperatura di alimentazione. In figura 7.2.1 è mostrato il diagramma delle soluzioni di regime del reattore al variare della temperatura di alimentazione.

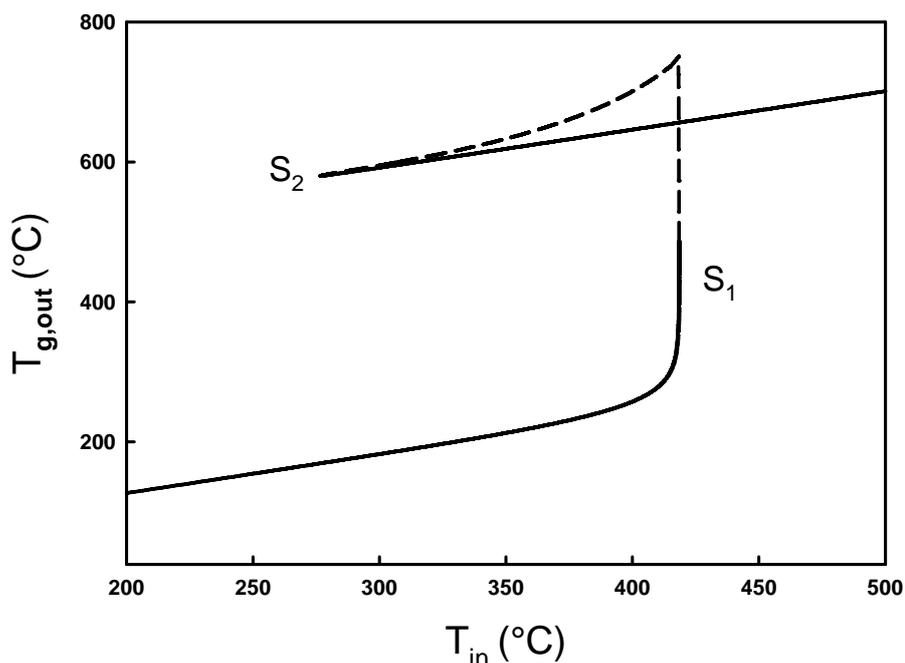


fig. 7.2.1 Diagramma delle soluzioni di regime al variare della temperatura di alimentazione.

Come variabile di stato rappresentativa dello stato del sistema è stata scelta la temperatura di uscita della fase gassosa. All'interno dell'intervallo delimitato dai punti di biforcazione S_1 ed S_2 si trova la coesistenza di tre soluzioni di regime stazionario: una soluzione di alta conversione, una soluzione intermedia instabile ed una soluzione stabile di bassa conversione. In corrispondenza di valori maggiori del parametro di biforcazione si trova un'unica soluzione di regime stazionario stabile di alta conversione. A sinistra del punto di biforcazione S_2 non sono trovate soluzioni di regime di alta conversione.

Il punto di biforcazione S_2 individua la temperatura di alimentazione limite al di sotto della quale non è più possibile condurre il processo reattivo. Quando il reattore sia esercito in prossimità del punto di biforcazione sella nodo S_2 un disturbo nelle condizioni operative di funzionamento può condurre all'estinzione del processo reattivo.

Si rivela pertanto adeguata l'introduzione di un sistema di controllo in linea del punto di biforcazione sella nodo S_2 . In questa direzione, assume un ruolo di primo piano la determinazione di un modello matematico del letto di ridotte dimensioni. Un sistema di 108 equazioni differenziali, come quello prodotto attraverso collocazione ortogonale a partire da equazioni ai principi primi, risulta inadeguato ai fini di un controllo in linea basato su modello.

La tecnica della proper orthogonal decomposition descritta al precedente paragrafo è stata quindi applicata al sistema di equazioni differenziali ordinarie ottenuto attraverso collocazione ortogonale. E' stato in tal modo realizzato un modello di dimensione ridotta in grado di descrivere fedelmente il

comportamento dinamico del letto in corrispondenza di condizioni operative di funzionamento localizzate in un intorno del punto di biforcazione sella nodo S_2 .

Una rappresentazione locale della funzione di autocorrelazione del sistema è stata ottenuta attraverso simulazione numerica del sistema iniziale. Al fine di realizzare una dettagliata descrizione del comportamento dinamico del sistema, al variare delle condizioni operative di funzionamento, nel corso della simulazione numerica sono stati prodotti forzamenti random della temperatura di alimentazione e della concentrazione di ingresso secondo le evoluzioni descritte in figura 7.2.2.

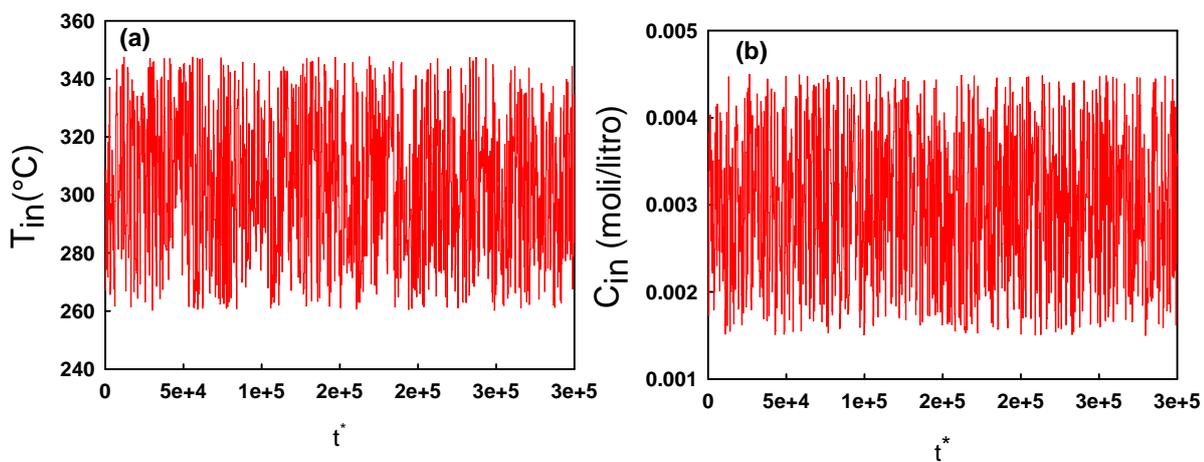


fig. 7.2.2 (a) Forzamento random della temperatura di alimentazione; (b) forzamento random della concentrazione di alimentazione.

Una prima parte dei dati ottenuti è stata utilizzata per ricavare la funzione di autocorrelazione e determinare una base funzionale del sistema di processo. La restante parte dei risultati delle simulazioni numeriche è stata impiegata per testare il modello ottenuto. E' infatti buona regola utilizzare, nello studio dell'affidabilità di un modello di dimensione ridotta, dati che non siano stati utilizzati per la sua realizzazione.

Il calcolo degli autovalori della matrice di autocorrelazione ha mostrato che 8 soli elementi della base funzionale sono sufficienti a catturare il 99.99% dell'energia del flusso dinamico del sistema al variare delle condizioni operative di funzionamento.

La figura 7.2.3, di pagina seguente, confronta i risultati della simulazione numerica del sistema iniziale (108 equazioni differenziali) e quelli del sistema di dimensione ridotta ottenuto con la tecnica (POD) (6 equazioni differenziali). In rosso sono riportate le previsioni del modello ridotto ed in nero quelle del modello iniziale. La figura in alto descrive gli andamenti della temperatura di uscita dal reattore della fase gassosa. La figura in basso confronta le evoluzioni della temperatura del letto in prossimità della sezione di ingresso previste dai due modelli. Si trova che le previsioni

del modello di dimensione ridotta sono in perfetto accordo con quelle del modello iniziale sia per quanto riguarda i dati utilizzati ai fini della riduzione sia per quel che riguarda i restanti dati.

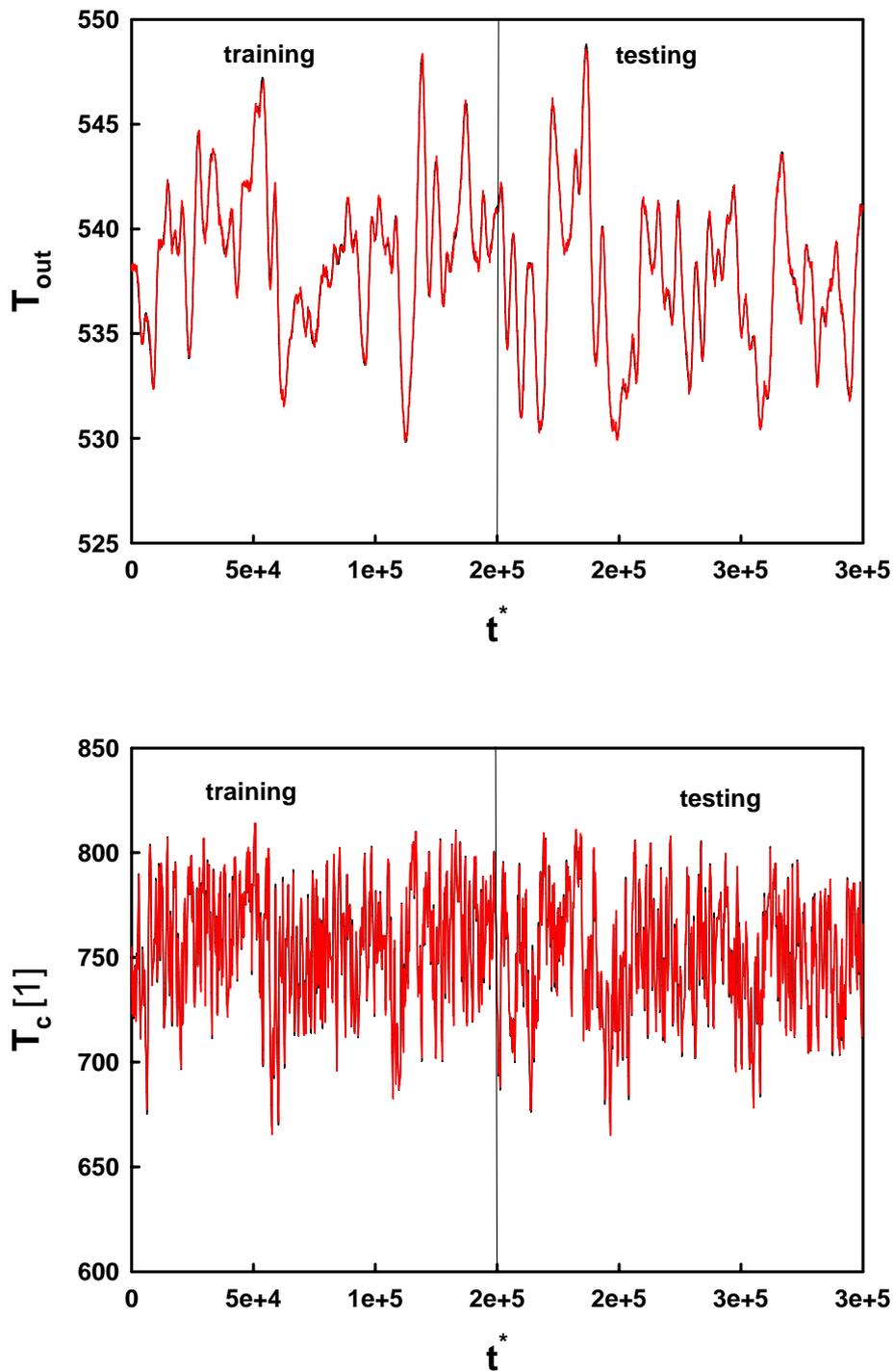


fig. 7.21.3 Confronto tra gli andamenti della temperatura della corrente gassosa in uscita (in alto); confronto tra gli andamenti della temperatura del letto in prossimità della sezione di alimentazione.

7.3 Conclusioni

Le metodologie di controllo sviluppate in questo lavoro di tesi (e.g. ottimizzazione di comportamento biforcazionale, scheduling ottimo) prevedono la risoluzione in linea di algoritmi di ottimizzazione basati su modello. Pertanto, ai fini dell'implementazione delle strategie di controllo illustrate è necessario disporre di modelli di ridotte dimensioni. In questa direzione, è stato affrontato, in questo capitolo, il problema di riduzione delle dimensioni di sistemi di equazioni differenziali alle derivate parziali attraverso la tecnica della proper orthogonal decomposition. La tecnica di riduzione indicata è stata applicata alla riduzione del modello di un reattore catalitico per la combustione di composti organici volatili.

Conclusioni

L'analisi dei controlli attivi dell'industria di processo è partita dall'adeguamento del bifurcation tailoring ai fini del controllo di fenomeni di runaway nella gestione di processi reattivi. E' risultato che la assegnazione a priori del diagramma delle soluzioni di regime in una delle variabili di processo può condurre alla determinazione di leggi di controllo in anello aperto inattuabili e/o ad indesiderati andamenti di alcune variabili di processo al variare delle condizioni operative. In questa direzione, è stato sviluppato un algoritmo di ottimizzazione del diagramma delle soluzioni di regime stazionario dei processi. L'algoritmo sviluppato realizza al variare del parametro di biforcazione una ottimizzazione in linea della funzione dei costi di processo nel rispetto dei limiti sulle variabili manipolabili e sulle variabili di stato. Tale algoritmo porta allo sviluppo di sistemi di controllo in anello aperto e non è, pertanto, in grado di assicurare stabilità ed unicità delle soluzioni di regime desiderate. Tuttavia, quando una adeguata strategia di controllo in retroazione sia implementata accanto a tale controllo in anello aperto, ne risulta un efficiente e robusto sistema di controllo adatto in caso di possibili fenomeni di runaway nella gestione di processi reattivi esotermici.

E' stato successivamente affrontato il problema del controllo delle transizioni di regime in reattori chimici. E' stato così sviluppato un algoritmo di scheduling dinamico che permette di minimizzare il periodo di transizione garantendo contestualmente il rispetto dei vincoli sulle variabili manipolabili e sulle variabili di stato. Tale algoritmo è basato sulla scelta ottimale di una sequenza di condizioni di regime stazionario e di una sequenza di istanti di switch che rendano la funzione dei costi di processo scelta minima. L'efficienza del nuovo controllo delle transizioni proposto è stata dimostrata attraverso una implementazione per un reattore continuo perfettamente miscelato dove sia condotta una reazione esotermica irreversibile. Una procedura semplificata che riduce l'onere computazionale necessario ai fini dello sviluppo del sistema di scheduling, è stata successivamente proposta. Tale procedura è basata su uno scheduling statico rinunciando alla determinazione della sequenza ottimale di istanti di switch ed individuando la distribuzione di punti stazionari intermedi minimizzazione statica della funzione obiettivo.

E' stata, in seguito, esaminata la possibilità, nell'implementazione della metodologia di ottimizzazione del comportamento biforcazionale, di assicurare stabilità del controllo in anello aperto anche senza alcun controllo in retroazione. Questo obiettivo è stato raggiunto introducendo all'interno dell'algoritmo di ottimizzazione del diagramma delle soluzioni di regime vincoli che tengono conto della distanza delle condizioni operative di funzionamento dai punti di biforcazione vicini. E' stato in questo modo sviluppato un innovativo algoritmo di controllo in anello aperto in

grado di assicurare stabilità delle soluzioni di regime desiderate, lasciando al controllore di retroazione solo il compito di garantire maggiore robustezza.

Le metodologie di controllo sviluppate in questa tesi prevedono un controllo in linea del sistema di processo basato su modello. Pertanto, ai fini dell'implementazione è necessario disporre di modelli di ridotte dimensioni. In questa direzione, è stato affrontato il problema di riduzione delle dimensioni di sistemi di equazioni differenziali alle derivate parziali attraverso una tecnica basata sulla proper orthogonal decomposition. L'efficienza della tecnica sviluppata è stata dimostrata attraverso l'applicazione alla riduzione del modello di un reattore catalitico per la combustione di composti organici volatili.

Bibliografia

- Abed, E. H. and Fu, J. H. [1986] "Local Feedback stabilization and bifurcation control I. Hopf bifurcation", *Syst. Cont. Lett.* **7**, 11-17
- Abed, E. H. and Fu, J. H. [1987] "Local Feedback stabilization and bifurcation control II. Stationary bifurcation", *Syst. Cont. Lett.* **8**, 467-473
- Abed, E. H., Wang, H. O., and Chen, R. C. [1994] "Stabilization of period doubling bifurcations for control of chaos" *Physica D*, **70**, 154-164
- Abed, E. H. and Wang, H. O. [1995] "Feedback control of bifurcation and chaos in dynamical systems" *Nonlinear Dynamics and Stochastic Mechanics*, eds Kliemann, W. and Sri Namachchivaya, N. (CRC Press, Boca Raton, FL), pp. 153-173
- Alonso, A. A., Frouzakis, C. E. and Kevrekidis, I. G. [2004] "Optimal sensor placement for state reconstruction of distributed process systems", *AIChE J.*, **50**, pp. 1438-1452
- Alonso, A. A., Kevrekidis, I. G., Banga, J. R., Frouzakis, C. E. [2004] "Optimal sensor location and reduced order design for distributed process systems", *Comp. Chem. Eng. Sci.*, **28**, pp. 27-35
- Alhumaizi, K. and Elnashaie, S. E. H. [1997] "Effect of control loop configuration on the bifurcation behaviour and gasoline yield of industrial fluid catalytic cracking (FCC) units", *Math. Comp. Modelling* **25**, pp. 37-56
- Atwell, J. A. and King, B. B. [2004] "Reduced order controllers for spatially distributed systems via proper orthogonal decomposition", *SIAM J. SCI. COMPUT.*, **26**(1), pp. 128-151
- Balakotaiah, V. [1989] "Simple runaway criteria for cooled reactors", *AIChE J.*, **35**, p. 1039

- Balakotaiah, V and Luss, D. [1991] “Explicit runaway criterion for catalytic reactors with transport limitations” *AIChE J.*, **37**, p. 1780
- Balakotaiah, V., Kodra, D. and Nguyen, D. [1994] “Runaway limits for homogeneous and catalytic reactors”, *Chem. Eng. Sci.*, **50**, p. 1149
- Banks, H. T., Beeler, S. C., Kepler, G. S. And Tran, H. T. [2002] “ Reduced order modelling and control of thin film growth in an HPVCD reactor”, *SIAM J. APP. MATH.*, **62**(4), pp.1251-1280
- Basso, M., and Genesio, R. [2003] “Analysis and Control of Limit Cycle Bifurcations”, *Bifurcation Control: Theory and Applications*, Springer-Verlag, pp. 127-154
- Basso, M., Genesio, R., Tesi, A. [1997] A frequency method for predicting limit cycle bifurcations. *Nonlinear Dynamics*, **13**, pp. 421-428
- Bemporad, A., [1998] “Reference governor for constrained nonlinear systems”, *IEE Transactions on Automatic Control*, **42**, pp. 415-419
- Bemporad, A., and Morari, M., [1999] “ Control of systems integrating logic, dynamics, and constraints”, *Automatica*, **35**, pp. 407-427
- Berns, D. W., Moiola, J. L. and Chen, G. [1998] “Feedback control of limit cycle amplitudes from a frequency domain approach”, *Automatica*, **34**, pp. 1567-1573
- Berkooz, G., Holmes, P., Lumley, J. L. [1993] “The proper orthogonal decomposition in the analysis of turbulent flows”, *Annual Review of Fluid Mechanics*, **25**, pp. 539-575
- Biegler, L., T., [1992] “Optimization strategies for complex process models”, *Ind. Eng. Che. Res.*, **18**, 197-256
- Branicky, M., S., Borkar, V., S., Mitter, S., K., [1998] “ A unified framework for hybrid control: model and optimal control theory”, *IEE Transactions on Automatic Control*, **43**, 1, p. 31

- Bryson A. E. and Yu-Chi-Ho, [1976] *Applied optimal control*, Wiley and Sons, New York
- Calandrini, G., Paolini, E., Muiola, J. L. and Chen, G. [1999] “Controlling limit cycle and bifurcations”, *Controlling Chaos and Bifurcations in Engineering Systems*, ed. Chen, G. (CRC Press), pp. 200-227
- Canizares, C. A. [1998] “Calculating optimal system parameters to maximize the distance to saddle node bifurcations” *IEEE Transactions on Circuits and Systems*, 45(3), pp. 225-237
- Charles, G. A., di Bernardo, M., Lowenberg, M. H., Stoten, D. P. and Wang, X. [2002a] “On line bifurcation tailoring applied to a nonlinear aircraft model”, *Int. Federation of Automatic Control World Congress (IFAC=02)*, Barcelona, Spain
- Chen, H., and Allgower, F., [1998] “A quasi-infinite horizon nonlinear model predictive control scheme with guaranteed stability”, *Automatica*, 34, 10, pp. 1205-1217
- Charles, G. A., di Bernardo, M., Lowenberg, M. H., Stoten, D. P. and Wang, X. [2002b] “Bifurcation tailoring of equilibria: A feedback control approach”, *Latin Amer. Appl. Res.* **31**, 199-210
- Chen, D., Wang, H. O. and Chin, W. [1998a] “Suppression cardiac alternans: Analysis and control of a border collision bifurcation in a cardiac conduction model”, *Proc. IEEE Int. Symp. Circ. Syst.*, Monterey, CA, III 635-III 638
- Chen, D., Wang, H. O. and Chen, G. [1998b] “Anticontrol of Hopf bifurcation through washout filters”, *Proc. 37th IEEE Conf. Decision and Control*, Tampa, FL, Dec. 16-18, 1998, pp. 3040-3045
- Chen, D., Wang, H. O. and Chen, G. [2001] “Anticontrol of Hopf bifurcations”, *IEEE Transactions on circuits and systems*, vol.48, no.6
- Chen, G. and Dong, X. [1998] *From Chaos to order: Methodologies, Perspectives and applications*, World Scientific Series on Nonlinear Science, series A, vol. 24

- Chen, G., Moiola, J. L., Wang, H. O., [2000] “Bifurcation Control: Theories, Methods, and Applications”, *Int. Journal of Bifurcation and Chaos*, 10, pp. 511-548
- Cibrario, M. and Levine, J. [1991] “Saddle-node bifurcation control with application to thermal runaway of continuous stirred tank reactors”, *Proceedings of 30th Conference on Decision and Control*, Brighton, England.
- di Bernardo, M. [2003] “Bifurcation analysis for control system applications”, *Bifurcation Control: Theory and Applications*, Springer-Verlag, pp. 249-264
- Dobson I., M. [1993] “Computing a closest bifurcation instability in multidimensional parameter space”, *Journal of Nonlinear Science*, 3(3), pp. 249-264
- Dobson I., M. [2003] “Distance to bifurcation in multidimensional parameter space: Margin sensitivity and Closest bifurcation”, *Bifurcation Control: Theory and Applications*, Springer-Verlag, pp. 249-264
- Doedel, E. J., Champneys, A. R., Fairgrieve, T. F., Kuznetsov, Y. A., Sanstede, B., & Wang, X. (1997). *AUTO97: continuation and bifurcation software for ordinary differential equations*. July
- Doedel, E. (1997). *Lecture Notes on Numerical Analysis of Bifurcation Problems*, Hamburg, Germany; [ftp.cs.concordia.ca in pub/doedel/doc/hamburg.ps.z](http://ftp.cs.concordia.ca/inpub/doedel/doc/hamburg.ps.z).
- Dong, Y. D., Makarov, Y. V., Hill, D., J. [1998] “Analysis of small signal stability margins using genetic optimization” *Electric Power Systems Research*, 46, pp.195-204
- El Farra, N., H., and Christofides, P., D., [2003] “Bounded robust control of constrained multivariable nonlinear processes”, *Chem. Eng. Sci.*, 58, pp. 3025-3047
- El Farra, N., H., Mhaskar, Christofides, P., D., [2005] “ Output feedback control of switched nonlinear systems using multiple lyapunov functions”, *Systems and Control Letters*, 54, pp. 1153-1182

- Fearther, D., Harrell, D., Lieberman, R., Doyle III, F., J., [2004] “Hybrid approach to polymer grade transition control”, *AICHE Journal*, 50, pp. 2502-2513
- Flores-Tlacuahuac, A., Alvarez, J., Saldivar-Guerra, E., Oaxaca, G., [2005a] “Optimal transitions and robust control design for exothermic continuous reactors”, *AICHE Journal*, 51, 3, pp.895-908
- Flores-Tlacuahuac, A., Biegler, L., T., Saldivar-Guerra, E., [2005b] “Dynamic optimization of HIPS open-loop unstable polymerization reactors”, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 44, pp.2659-2674
- Floudas, C., A., [1999] “Deterministic global optimization”, Kluwer, New York
- Genesisio, R., Tesi, A., Wang, H. O. and Abed, E. H. [1993] “Control of period doubling bifurcations using harmonic balance”, *Proc. Conf. Decis. Contr.*, San Antonio, TX, pp. 492-497
- Gilbert, E., and Kolmanovsky, I., [2002] “Nonlinear tracking control in the presence of state and control constraints: a generalized reference governor”, *Automatica*, 38, pp. 2063-2073
- Guckenheimer, J., and Holmes, P. [1986] *Nonlinear Oscillations, Dynamical Systems, and Bifurcations of Vector Fields*, Springer-Verlag, New York
- Hahn, J., Monnigmann, M., Marquardt, W., [2004] “A method for robustness analysis of controlled nonlinear systems”, *Chem. Eng. Sci.*, 59, 20, pp.4325-4338.
- Howard, L.N. [1979] “Nonlinear Oscillations”, in *Nonlinear Oscillations in Biology*, F.C.Hoppensteadt, ed.Amer.Math.Soc., Providence, R.I.
- Holmes, P., Lumley, J.L. and Berkooz, G. [1996] *Turbulence, Coherent Structures, Dynamical Systems and Symmetry*, Cambridge Univ. Press, Cambridge
- Isidori, A. [1995], *Nonlinear Control Systems*, 2nd ed., Springer-Verlag, New York
- Jongen, H. T., Jonker, P. and Twilt, F. [1986] *Optimization in R^n* (Peter Lang Verlag, Frankfurt am Main)

- Kuznetsov, Y. A. [1998]. *Elements of applied bifurcation theory*. 2nd ed., Springer Verlag, New York.
- Kunisch, K., Volkwein, S. and Xie, L. [2004] “HJB-POD-based feedback design for the optimal control of evolution problems”, *SIAM JOURNAL ON APPLIED DYNAMICAL SYSTEMS*, **3**(4), pp. 701-722
- Kuznetsov, Y. A., Levitin, V.V., & Skovoroda, A. R. [1996]. Continuation of stationary solutions to evolution problems in CONTENT. Report AM-R9611, Centrum voor Wiskunde en Informatica, Kruislaan 413, 1098 SJ Amsterdam, The Netherlands.
- Kailath, T. [1980] *Linear Systems*, Prentice Hall, Englewood Cliffs, NJ
- Kwatny, H., G., and Chang, B., C., [1998] “Constructing linear families from parameter dependent nonlinear dynamics”, *IEE Transactions on Automatic Control*, 43, 8, p. 1143
- Landau, I. D. [1979] *Adaptive Control: The Model Reference Approach* (Dekker, NY)
- Lall, S., Mardsen, J. E. and Glavaski, S. [2002] “A subspace approach to balanced truncation for model reduction of nonlinear control systems”, *Int. J. Robust Nonlinear Control*, **12**, pp. 519-535
- Lee, H. C. and Abed E. H. [1991] “Washout filters in the bifurcation control of high alpha flight dynamics”, *Proc. Ame. Control Conf.*, Boston, pp. 206-211
- Leonessa, A., Haddad, W., M., Chellaboina, V., [2001] “Nonlinear systems stabilization via hierarchical switching control” *IEE Transactions on Automatic Control*, 46, 1, p. 17
- Lin, Y., Sontag, E., [1991] “A universal formula for stabilization with bounded controls” *System and Control Letters*, 16, p. 393
- Lowenberg, M. H. [1998a] “Bifurcation analysis of multiple-attractor flight dynamics”, *Phil. Trans. R. Soc. London* **A356**, 2297-2319

- Lowenberg, M. H. [1998b] “Bifurcation Development of control schedules to modify spin behavior”, *Proc. AIAA Atmospheric Flight Mechanics Conf.* 1998, paper no. AIAA-98-4267, pp. 286-296
- Magni, L., De Nicolao, G., Magnani, L., Scattolini, R., [2001] “ A stabilizing model-based predictive control algorithm for nonlinear systems”, *Automatica*, 37, pp. 1351-1362
- Mancusi, E., Merola, G., Maffettone, P. L., and Cresciteli, S. [2000] “Multistability and Hysteresis in an industrial ammonia reactor”, *AIChE Journal*, 46, p. 824
- Makarov, Y. V., Hiskens, I. A. [1994] A continuation method approach to finding closest saddle node bifurcation point
- Mayne, D. Q., Rawlings, J. B., Rao, C. V., Skokaert, P. O. M., [2000] “ Constrained model predictive control: stability and optimality”, *Automatica*, 36, pp.789-814
- McAuley, K. B., and MacGregor, J. F. [1992] “Optimal grade transitions in gas phase polyethylene reactor”, *AIChE Journal*, 38, pp. 1564-1576
- McConley, M. W., Appleby, B. D., Dahleh, M. A., Feron, E. [2000] “A computationally efficient Lyapunov-based scheduling procedure for control of nonlinear systems with stability guarantees”, *IEEE Transactions on Automatic Control*, 45, 1, p. 33
- Mhaskar, P., El Farra, N. H., Christofides, P. D., [2005] “Predictive control of switched nonlinear systems with scheduled mode transitions”, *IEEE Transactions on Automatic Control*, 50, 11, p. 1670
- Moiola, J. L. and Chen, G. [1993] Frequency domain approach to computation and analysis of bifurcations of limit cycles: A tutorial. *Int. J. Bifur. Chaos*, 3, pp. 843-867
- Monnigmann, M. and Marquardt, W. [2002] “Bifurcation placement of Hopf points for stabilization of equilibria”, *Int. Federation of Automatic Control World Congress, (IFAC02)*, Barcelona, Spain

- Morbidelli, M. and Varma, A. [1986] “Parametric sensitivity in fixed bed reactors: the role of interparticle transfer resistances”, *AIChE J.*, **32**, p. 297
- Morbidelli, M., Varma, A. and Wu, H. [1999] *Parametric sensitivity in chemical systems*, Cambridge University Press, Cambridge
- Morbidelli, M. and Varma, A. [1982] “Parametric sensitivity and runaway in tubular reactors”, *AIChE J.*, **28**, p. 705
- Morud, J. C. and Skogestad [1998] “Analysis of instability in an industrial ammonia reactor” *AIChE Journal*, *44*, pp. 888—895
- Naess, L., A. Mjåavatten and J-O Li [1993] “Using dynamic process simulation from conception to normal operation of process plants”, *Comp. Chem. Eng.*, *17*(5/6), pp.585-600
- Nijmeijer, H., and Van der Schaft, A. [1990] *Nonlinear Dynamical Systems*, Springer-Verlag, New York
- Ogunnaike, B.A. and Ray, W.H. [1994] *Process Dynamics, Modelling and Control*, Oxford, New York
- Patil, V. K., Sudhakar, S. and Balakotaiah, V. [1997] “Singularity theory approach for calculating the runaway boundaries of Heterogeneous reactor models”, *Ind. Eng. Che. Res.*, **36**, pp. 3230-3241
- Recke, B., Andersen, B. R. and Jorgensen, S. B. [2000] “Bifurcation control of sample chemical reaction systems” *Proceedings of the international symposium on advanced control of chemical processes*, IFAC, Pisa, Italy, p. 398
- Richardson, T., Lowenberg, M., di Bernardo M., Charles, G., [2006] “Design of a gain-scheduled flight control system using bifurcation analysis”, *Journal of Guidance Control and Dynamics*, *29*, *2*, pp. 444-453.

- Rugh, W., J., and Smania, J., S., [2000] "Research on gain-scheduling", *Automatica*, 36, p. 1401
- Russo, L., Mancusi, E., Maffettone, P. L. and Silvestro Cresciteli [2002] "Symmetry properties and bifurcation analysis of a class of periodically forced reactors", *Chem. Eng. Sci.*, **57**, 5065-5082
- Ravindran, S. S. [2002] "Adaptive reduced order controllers for a thermal flow system using proper orthogonal decomposition", *SIAM J. SCI. COMPUT.*, **23**(6), pp. 1924-1942
- Shvartsman, S. Y., Theodoropoulos, C., Rico-Martinez, R., Kevrekidis, I. G., Titi, E. S., Mountziaris, T. J. [2000] "Order reduction for nonlinear dynamic models of distributed reacting systems", *Journal of Process Control*, **10**, pp. 177-184
- Sirovich, L. [1987] "Turbulence and dynamics of coherent structures-parts I-III", *Quarterly of Applied Mathematics*, **45**(3), pp.561-590
- Sirovich, L. and Rodriguez, J. D. [1987] "Coherent structures and chaos: a model problem", *Physics Letters A*, **120**(5), pp. 211-214
- Sastry, S. and Bodson, M. [1989] *Adaptive control: stability, convergence and robustness*, Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey
- Stephanopoulos, G., [1984] *Chemical Process Control*, Prentice Hall, Englewood Cliffs
- Stoten, D. P. and Benchoubane, H. [1990a] "Empirical studies of an MRAC algorithm with minimal control synthesis", *Int J. Contr.*, **51**, 823-849
- Stoten, D. P. and Benchoubane, H. [1990a] "Robustness of a minimal control synthesis algorithm", *Int J. Contr.*, **51**, 851-861
- Stoten, D. P. and di Bernardo, M. [1996] "An application of the minimal control synthesis algorithm to the control and synchronization of chaos", *Int J. Contr.*, **6**, 925-938

- Takeda, M., and Ray, W., H., [1999] "Optimal grade transition strategies for multistage polyolefin reactors", *AIChE Journal*, 45, 8, pp.1776-1793
- Tesi, A., Abed, E. H., Genesio, R., Wang, H. O. [1996] "Harmonic balance analysis of period doubling bifurcations with implications for control of nonlinear dynamics", *Automatica*, **32**, pp. 1255-1271
- Van Walsenaere, R. J. and Froment, G. F. [1970] "Parametric sensitivity and runaway in fixed bed catalytic reactors", *Chem. Eng. Sci.*, **25**, p. 1503
- Wang, H. O. and Abed, E. H. [1995] "Bifurcation control of a chaotic system", *Automatica* **31**, pp. 1213-1226.
- Wang, H. O., Adomaitis, R. A. and Abed, E. H. [1993] "Active stabilization of rotating stall in axial flow gas compressor", *Proc. IEEE Conf. Decision and Control*, Orlando, pp. 3287-3292
- Wang, X., di Bernardo, M., Lowenberg, M. H., Stoten, D. P., Charles, G. A. [2002] "Bifurcation tailoring of nonlinear systems", *Int. Federation of Automatic Control World Congress (IFAC=02)*, Barcelona, Spain
- Wang, X., di bernardo, M., Stoten, D. P., Lowenberg, M. H. and Charles, G. [2003] "Bifurcation tailoring via Newton flow-aided adaptive control", *International Journal of Bifurcation and Chaos*, **13**, pp.677-684
- Wiggins S. [1990], *Introduction to Applied Nonlinear Dynamical Systems and Chaos*, Springer-Verlag, New York
- Xu, X. [2001] "Analysis and design of switched systems", PhD dissertation, Univ. Notre Dame, Notre Dame, IN, 2001
- Xu, X., and Antsaklis, P., J., [2004] "Optimal control of switched systems based on parameterization of the switching instants", *IEE Transactions on Automatic Control*, 49, 1, p. 2

Tabella 3.4 Variabili adimensionali

$u_a = \frac{C_a}{C_{ain}}$	concentrazione adimensionale del reagente A
$u_b = \frac{C_b}{C_{ain}}$	concentrazione adimensionale del reagente B
$\theta = \left(\frac{T - T_{rif}}{T_{rif}} \right) \cdot \gamma_1$	temperatura adimensionale del reattore
$\tau_R = \frac{\tau}{\tau_{rif}}$	tempo di permanenza adimensionale
$\gamma_1 = \frac{E_1}{R_g \cdot T_{rif}}$	energia di attivazione adimensionale della prima reazione
$\gamma_2 = \frac{E_2}{R_g \cdot T_{rif}}$	energia di attivazione adimensionale della seconda reazione
$\xi = \frac{t}{\tau}$	tempo adimensionale
$\tau = \frac{V}{q}$	tempo di permanenza
$\tau_{rif} = \frac{V}{q_{rif}}$	tempo di permanenza di riferimento
$Da = \tau_{rif} \cdot k_1(T_{rif})$	numero di Damckoeleer
$R_r^i = \frac{k_2(T_{rif})}{k_1(T_{rif})}$	rapporto delle costanti cinetiche a temperatura di riferimento
$H_r = \frac{(-\Delta h_2)}{(-\Delta h_1)}$	rapporto tra le variazioni di entalpia della prima e della seconda reazione

$B = \frac{(-\Delta h_1) \cdot \tau_{rif}}{\rho \cdot c_p \cdot T_{rif}} \cdot \gamma_1$	variazione di temperatura adiabatica adimensionale
$St = \frac{U \cdot \tau_{rif}}{\rho \cdot c_p}$	numero di Stanton
$\theta_c = \left(\frac{T_c - T_{rif}}{T_{rif}} \right) \cdot \gamma_1$	temperatura del fluido refrigerante adimensionale