

连续搅拌槽式反应器中自催化化学反应的延迟反同步控制*

安媛 李勇 毕勤胜

(江苏大学理学院, 镇江 212013)

摘要 讨论了考虑延迟效应下化学反应体系的控制问题. 在自催化化学反应系统中, 将反应误差重新定义为实际反应状态与控制目标的差值, 并基于 Lyapunov 稳定性理论和反同步思想, 通过构造适当的控制器和控制输入信号可以使整个反应系统中各成分的浓度处于某种状态. 该方法对系统无特殊要求, 并且无需构造 Lyapunov 函数. 最后用数值模拟验证了方法的有效性.

关键词 延迟反同步控制, 化学反应, 连续搅拌槽式反应器, 反应误差

引言

自 BZ 反应中的振荡现象被揭示以来, 各种化学反应体系中的非线性现象一直是国内外研究的前沿课题之一^[1-2], 而对于反应过程的控制由于其在实际生产中的巨大应用价值, 许多学者在该领域从理论和实验等多方面做出了大量的工作^[3-5]. 我们可以通过设计适当的控制装置使反应处于某种状态, 以满足实际的需要.

在实际工程中, 连续搅拌槽式反应器 (CSTR) 在反应过程中被广泛应用, 其复杂行为直接影响到反应的最终结果^[6-8], 因此, 关于 CSTR 体系中反应过程控制的研究引起了人们的广泛关注, 例如, Abashar 和 Judd 揭示了两个耦合 CSTR 反应体系中的同步现象^[9]. 由于在工业上许多反应器实际上是由多个 CSTR 组成的系统, 而且在反应过程中溶液运输需要一定的时间, 即延迟总是存在的, 因此研究考虑延迟效应下的反应系统的控制问题具有理论和现实的意义. 本文受反同步原理的启发^[10], 考虑由两个 CSTR 组成的反应系统, 通过设计适当的控制器使整个反应系统处于某种状态, 并通过数值模拟验证了方法的有效性.

1 数学模型

我们采用 Lynch 提出的自催化反应系统^[11], 无量纲化后微分方程组可以表示为

$$\begin{aligned} \frac{dx_A}{dt} &= (1 - x_A) - a_1 x_A x_B^2 \\ \frac{dx_B}{dt} &= 1 - (1 + a_3)x_B + \gamma(a_1 x_A x_B^2 + a_2 x_C x_B^2) \\ \frac{dx_C}{dt} &= \beta - x_C - a_2 x_C x_B^2 \end{aligned} \quad (1)$$

式中 x_A, x_B, x_C 分别表征 A、B、C 三种物质, γ 为入料溶液中 A 物质的浓度与 B 物质浓度的比, β 为入料溶液中 C 物质的浓度与 A 物质浓度的比, a_1, a_2, a_3 为无量纲参数, 其具体表达式见文献[11].

上述方程组刻画了整个反应的演化过程, 其解对应于反应器中各成分的某种情况, 如平衡点对应于反应过程中的定常态, 即反应器中各成分的质量及浓度保持不变, 而周期解则表示反应过程中各成分的质量按照一定的频率周期性变化. 当参数 $\beta = 2.85, a_1 = 18000, a_2 = 400, a_3 = 80, \gamma = 1.47$ 时系统 (1) 处于混沌状态, 见图 1.

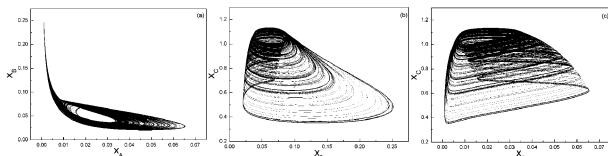


图 1 $\gamma = 1.47$ 时系统 (1) 的相图 (a) $x_A - x_B$ (b) $x_B - x_C$ (c) $x_A - x_C$
Fig. 1 The phase maps of system (1) for $\gamma = 1.47$ (a) $x_A - x_B$ (b) $x_B - x_C$ (c) $x_A - x_C$

由于在工业上许多反应系统实际上是由多个 CSTR 组成, 因此有必要分析此类系统的反应特征, 并设计有效的控制装置控制反应器中的反应. 本文

研究由两个完全相同的 CSTR 组成的反应器,它们由一个控制装置连接,为了便于研究,我们把两个 CSTR 分别看作驱动系统和响应系统,并用控制函数表示控制装置对单个 CSTR 反应的影响. 考虑由于溶液运输过程造成的延迟效应,则反应系统可以由图 2 表示.

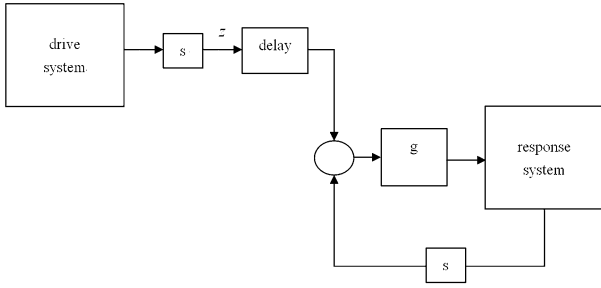


图2 反应系统示意图

Fig. 2 The schematic diagram of reaction system

把驱动系统表示为如下形式

$$\dot{x} = F(x) \quad (2)$$

其中, $x \in R^3$, $F: R^3 \rightarrow R^3$, 根据图 2, 响应系统可以表示为^[12]

$$\dot{y} = F(y) + g(z(t-\tau) - s(y)) \quad (3)$$

其中, $y \in R^3$, $g: R^3 \rightarrow R^3$ 是控制函数, $z(t)$ 为系统(2)的输出信号, s 为控制输入信号, 表征反应过程中两系统的某些状态量, $\tau > 0$ 为延迟时间.

我们的目的是设计适当的控制装置使整个反应系统中各成分的浓度处于一定的状态. 考虑由于溶液运输造成的延迟效应, 响应系统在时间 t 时与驱动系统在时间 $t-\tau$ 时的状态量之和将趋于某种状态, 即通过设计控制函数和控制输入信号实现 $y(t) + x(t-\tau) = P$, 其中 $P = [a, b, c]^T$ 为控制目标. 定义反应误差为实际反应状态与设计目标的差值, 即 $e(t) = y(t) + x(t-\tau) - P$. 如果满足

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \|e\| = \lim_{t \rightarrow \infty} \|y(t) + x(t-\tau) - P\| = 0$$

则能实现控制目标.

2 控制函数设计

由系统(2)和系统(3)可以得到反应误差方程

$$\dot{e}(t) = \dot{y}(t) + \dot{x}(t-\tau) = F(y(t)) + g(z(t-\tau) - s(y)) + F(x(t-\tau)) \quad (4)$$

把系统(2)写成如下形式

$$\dot{x} = F(x) = Ax + M(x) + N \quad (5)$$

式中 Ax 为 $F(x)$ 的线性部分, $M(x)$ 为非线性部分,

N 为常数项.

$$A = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1-a_3 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix},$$

$$M(x) = \begin{bmatrix} -a_1 x_A x_B^2 \\ \gamma(a_1 x_A x_B^2 + a_2 x_C x_B^2) \\ -a_2 x_C x_B^2 \end{bmatrix}, N = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

取系统(2)的输出信号 $z(t) = -s(x)$, 并选择控制输入信号 $s(x)$ 为如下形式

$$s(x) = M(x) + Kx + N + \frac{A-K}{2}P$$

式中 $K = \text{diag}[k_1, k_2, k_3]$, 进一步令

$$g(-s(x(t-\tau)) - s(y(t))) = -s(x(t-\tau)) - s(y(t))$$

则响应系统(3)可变为

$$\dot{y} = Ay - M(x(t-\tau)) - K(x(t-\tau) - y) - N - (A-K)P$$

由系统(4)我们可以得到

$$\begin{aligned} \dot{e} &= F(y) + g(z(t-\tau) - s(y)) + F(x(t-\tau)) = \\ & Ay + M(y) + N - s(x(t-\tau)) - s(y) + Ax(t-\tau) + \\ & M(x(t-\tau)) + N = A(y + x(t-\tau) - P + P) - \\ & M(x(t-\tau)) - Kx(t-\tau) - N - \frac{A-K}{2}P - M(y) - Ky - N - \\ & \frac{A-K}{2}P + M(x(t-\tau)) + N = Ae + AP - K(y + x(t-\tau) - \\ & P) - (A-K)P = Ae + AP - Ke - KP - AP + \\ & KP = (A-K)e = Be \end{aligned} \quad (6)$$

其中

$$B = \begin{bmatrix} -1 - k_1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 - a_3 - k_2 & 0 \\ 0 & 0 & -1 - k_3 \end{bmatrix}$$

矩阵的特征值分别为 $\lambda_1 = -1 - k_1$, $\lambda_2 = -1 - a_3 - k_2$, $\lambda_3 = -1 - k_3$, 只要满足 $k_1 > -1$, $k_2 > -1 - a_3$, $k_3 > -1$, 矩阵 B 的所有特征值就均为负实数, 由(6)可知, $e(t)$ 的零点为平衡点, 根据线性系统稳定性准则, 反应误差的零点为渐进稳定, 满足 $e \rightarrow 0 (t \rightarrow \infty)$, 此时即实现控制目标.

3 数值模拟

从上面的分析可以看出, 我们可以构造适当的控制函数, 从而设计控制装置实现整个反应系统中各成分的浓度处于某种状态. 下面我们用数值模拟来验证上述方法的可行性. 选取参数

$$\beta = 2.85, a_1 = 18000, a_2 = 400, a_3 = 80, \gamma = 1.47$$

此时只要 $k_1 > -1, k_2 > -81, k_3 > -1$, 就满足 B 的所有特征值就均为负实数. 选取 $k_1 = 2.0, k_2 = 2.0, k_3 = 2.0$, 延迟时间 $\tau = 1.0$, 确定控制目标为 $P = [a, b, c]^T = [1, 2, 1]^T$, 给定初值

$$(x_A(0), x_B(0), x_C(0)) = (0.01, 0.01, 0.01)$$

$$(y_A(0), y_B(0), y_C(0)) = (0.001, 0.001, 0.001)$$

图3给出了反应误差系统 $e = [e_A, e_B, e_C]^T$ 的收敛曲线.

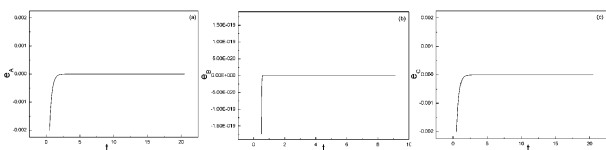


图3 反应误差的时间历程图(a) e_A (b) e_B (c) e_C

Fig. 3 The time histories diagrams of reaction error system(a) e_A (b) e_B (c) e_C

从图3可以看出,反应误差 $e = [e_A, e_B, e_C]^T$ 在很短的时间内快速收敛于零,数值结果验证了理论分析.图4和图5分别给出了控制目标 $x(t) + y(t)$ 的时间历程曲线以及驱动、响应系统的时间历程曲线.

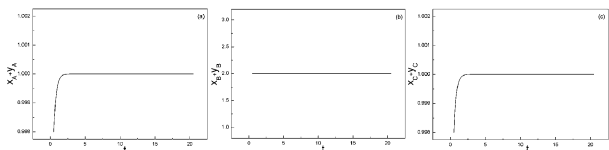


图4 控制目标为定常态时 $x(t) + y(t)$ 的时间历程图

$$(a) x_A + y_A (b) x_B + y_B (c) x_C + y_C$$

Fig. 4 The time histories diagrams of control objective $x(t) + y(t)$ (a) e_A (b) e_B (c) e_C

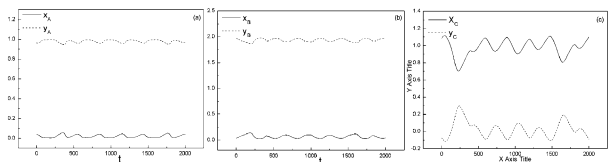


图5 驱动系统和响应系统的时间历程图

$$(a) x_A, y_A (b) x_B, y_B (c) x_C, y_C$$

Fig. 5 The time histories diagrams of drive system and response system (a) x_A, y_A (b) x_B, y_B (c) x_C, y_C

图4和图5表明,通过选择适当的控制函数,我们可以实现使整个反应系统内各成分的浓度稳定在某一量值.

4 结论

在由两个连续搅拌槽式反应器组成的自催化

反应系统中,考虑由于溶液运输过程中造成的延迟效应,给出了反应误差的定义,通过构造适当的控制函数和控制输入信号使整个反应系统中各成分的浓度处于某种状态.该方法避免了求解 Lyapunov 指数及构造 Lyapunov 函数的复杂性工作,最后的数值模拟验证了所提方法的有效性.这些结果对设计符合实际需要的反应控制装置,从而对反应过程进行控制有一定的指导意义.

参 考 文 献

- 1 Davies M L, Schreiber I, Scott S K. Dynamical behaviour of the Belousov-Zhabotinsky reaction in a fed - batch reactor. *Chem Eng Sci*, 2004, 59: 139 ~ 148
- 2 柴俊, 张正娣. 三变量 CSTR 化学反应的复杂动力学行为分析. *动力学与控制学报*, 2007, 5(1): 34 ~ 38 (Cai Jun, Zhang Zhendi. Dynamics analysis of 3-variable nonlinear chemical reaction in CSTR system. *Journal of Dynamics and Control*, 2007, 5(1): 34 ~ 38 (in Chinese))
- 3 Li Y N, Chen L, Cai Z S. Study on chaos synchronization in the Belousov-Zhabotinsky chemical system. *Chaos, Solitons and Fractals*, 2003, 17: 699 ~ 707
- 4 Li Q S, Zhu R. Chaos to periodicity and periodicity to chaos by periodic perturbations in the Belousov-Zhabotinsky reaction. *Chaos, Solitons and Fractals*, 2004, 19: 195 ~ 201
- 5 Xu W G, Li Q S. Chemical chaotic schemes derived from NSG system. *Chaos, Solitons and Fractals*, 2003, 15: 663 ~ 671
- 6 Gyorgyi L, Turanyi T, Field R J. A three-variable model of deterministic chaos in the Belousov-Zhabotinsky reaction. *Nature*, 1992, 355: 808 ~ 810
- 7 Sriram K. Effects of positive electrical feedback in the oscillating Belousov-Zhabotinsky reaction: Experiments and simulations. *Chaos, Solitons and Fractals*, 2006, 28: 1055 ~ 1066
- 8 Gary P, Scott S K. Autocatalytic reactions in the isothermal, continuous stirred tank reactor Isolas and other forms of multistability. *Chem Eng Sci*, 1983, 38: 29 ~ 43
- 9 Abashar M E E, Judd M R. Synchronization of chaotic nonlinear oscillators: Study of Two Coupled CSTRs. *Chem Eng Sci*, 1998, 53: 3741 ~ 3750
- 10 王兴元, 王勇. 基于主动控制的三维自治混沌系统的异结构反同步. *动力学与控制学报*, 2007, 5(1): 13 ~ 17 (Wang Xingyuan, Wang Yong. Anti-synchronization of

- three-dimensional autonomous different-structural chaotic systems via active control. *Journal of Dynamics and Control*, 2007, 5(1): 13 ~ 17 (in Chinese))
- 11 Lynch D T. Chaotic behavior of reaction system; parallel cubic autocatalators. *Chem Eng Sci*, 1992, 47: 347 ~ 355
- 12 Li C D, Liao X F. Lag synchronization of Rossler system and Chua circuit via a scalar signal. *Phys Lett A*, 2004, 329: 301 ~ 308

LAG ANTI-SYNCHRONIZATION CONTROL OF AUTOCATALYTIC CHEMICAL REACTION SYSTEM IN CONTINUOUS STIRRING TANK REACTOR*

An Yuan Li Yong Bi Qinsheng

(Faculty of Science, Jiangsu University, Zhenjiang 212013, China)

Abstract The control of chemical reaction system considering delayed effect was explored. In autocatalytic chemical reaction system, the reaction error was defined as the difference between actual reaction state and control objective, and based on Lyapunov stability theory and anti-synchronization thought, a general scheme was presented, which can be used to control the concentration of the whole reaction system in some special states by selecting the controller and the input signal. The scheme has no special requirements on system, and without structuring Lyapunov functions. Finally numerical simulations were performed to demonstrate the effectiveness of the proposed scheme.

Key words lag anti-synchronization control, chemical reacton, continuous stirring tank reactor, reaction error