

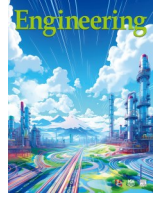


ELSEVIER

Contents lists available at ScienceDirect

Engineering

journal homepage: www.elsevier.com/locate/eng



Research
Smart Process Manufacturing toward Carbon Neutrality—Article

多目标自适应优化模型预测控制——降低氧化锌回转窑的碳排放

韦可, 黄科科*, 阳春华, 桂卫华

School of Automation, Central South University, Changsha 410083, China

ARTICLE INFO

Article history:

Received 23 August 2022
Revised 4 November 2022
Accepted 14 January 2023
Available online 22 July 2023

关键词

氧化锌回转窑
模型降阶
稀疏辨识
实时优化
模型预测控制
过程控制

摘要

氧化锌回转窑是锌冶炼工业过程中的重要装备,在过程控制领域面临新的挑战。中国“碳达峰、碳中和”指出:所有行业应实现绿色生产,减少资源过度消耗。这导致传统稳定控制方法难以满足多目标控制需求。虽然研究人员揭示了回转窑的运行原理并建立了计算流体动力学(CFD)仿真模型来研究其特性,但由于这些模型计算复杂度较高,无法直接应用于过程控制。为此,本文提出了一种基于稀疏辨识的多目标自适应优化模型预测控制(MAO-MPC)方法。具体而言,首先利用大量采集的CFD仿真模型数据,结合稀疏辨识方法获取降阶模型;接着提出了一种包括实时优化(RTO)层与模型预测控制(MPC)层的双层控制框架:在RTO层,将降低资源消耗与实现最佳运行性能作为优化目标,通过求解相应优化问题,将最优设定值送入MPC层,实现氧化锌回转窑最优运行。实验表明,本文所提出的方法能在保持回转窑高效运行的同时减少焦炭消耗,比同类方法更具优势。

© 2023 THE AUTHORS. Published by Elsevier LTD on behalf of Chinese Academy of Engineering and Higher Education Press Limited Company. This is an open access article under the CC BY-NC-ND license (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>).

1. 引言

面向实现“碳达峰、碳中和”的迫切需求,高能耗、高污染特性给锌冶炼过程中的氧化锌回收利用带来了新的挑战[1–4]。当前,每生产1 t产品锌,需要消耗460 kg的焦炭,等同于排放超过3 t的二氧化碳(CO₂) [5]。显而易见的是,燃烧的焦炭越多,排放的温室气体就越多;因此,减少焦炭消耗是实现碳中和的有效途径。回转窑作为锌冶炼行业的重要装备,消耗了绝大部分焦炭作为能源,以维持合适的反应气氛,进而产生大量温室气体[6]。更重要的是,回转窑作为典型分布式参数系统[7],难以获取所有传感信息来评估其反应氛围,最终导致如一氧化碳

(CO)等有害气体的排放。因此,必须详细研究氧化锌回转窑的特性,以提高其运行性能[8]。

过去几十年,学术界开展了大量建模方面的研究工作以揭示回转窑的运行原理,这为将回转窑从物理世界带入数字空间奠定了基础。例如,Boateng和Barr [9]等提出了回转窑的热力学模型,其中包括窑内的热传递机理;Wang等[10]建立了回转窑的数学模型,该模型不仅考虑了反应机理,还降低了计算复杂度。近年来,为了优化回转窑的运行性能,研究人员逐渐将重点放在建立回转窑的热力学模型上,因为温度的分布对反应氛围有很大影响[11–12]。与此同时,随着计算能力的发展,新的计算流体力学(CFD)技术被广泛引入大规模系统建模研究

* Corresponding author.

E-mail address: huangkeke@csu.edu.cn (K. Huang).

中。Witt等[13]建立了回转窑的CFD仿真模型，其中包括颗粒流动和传热模拟；借助CFD模型，Ditaranto和Bakken [14]设法改善回转窑的运行条件，以实现更高的燃烧效率。

尽管学术界在回转窑建模方面取得了很大进展，但这些工作无法直接应用于工业现场，因为CFD模型需要依赖高性能计算资源，并不能满足实践中实时决策的要求。这就导致大多数CFD模型都被用于指导确定回转窑的最佳设计参数。因此，研究人员试图寻找CFD模型的准确性与实时计算需求之间的平衡，进而研究出了模型降阶方法(ROM) [15]。与原始CFD模型相比，ROM的目的是在保证模型精度的同时显著降低计算复杂性。当前，两类广泛应用的模型降阶方法分别是基于投影模型降阶[16–18]与子空间模型辨识[19–21]。在基于投影方法中，向量将被分解为多个模态并将系统算子投影到低维子空间上，进而降低计算复杂度。而在子空间辨识中，基于状态空间模型，原始模型将被转换为多变量线性模型。这些方法已被证明在多个非线性系统中的有效性。尽管如此，它们仍然有一个缺陷：一旦获得降阶模型，变量的物理意义和原始系统的结构就会完全遗失，难以进一步开展过程监测和控制。

针对上述方法的局限性，受压缩传感和稀疏回归的启发，稀疏识别方法不断被提出[22–24]。在稀疏识别中，原始数据在没有额外变换的情况下被用于建立基函数库。通过非线性稀疏回归，可以利用最少函数项准确表示系统特性。Kaiser等[25]利用稀疏辨识在数据受限情况下实现非线性动力学系统的模型预测控制(MPC)；Bhadriraju等[26]提出了一种可操作的自适应稀疏识别与深度神经网络相结合的方法来解决模型失配问题；Li等[27]考虑噪声对稀疏识别的影响，提出了一种鲁棒的稀疏识别方法。这些工作提供了获得降阶模型的新思路，并展示了稀疏辨识广泛的应用前景。

由于降阶模型可以节省计算资源并满足实时计算的要求，因此为利用先进的控制策略来提高氧化锌回转窑的性能奠定了基础。模型预测控制(MPC)是一种在工业过程中广泛应用的高效控制方法。它包括三个基本要素：被控对象的预测模型、参考轨迹和通过滚动优化获得的最优控制器[28–30]。在回转窑的研究中，大多数研究人员关注的是如何实现反应区温度的稳定控制[31–32]。例如，Stadler等[33]及Machalek和Powell [34]将机理模型与MPC框架相结合以优化反应区的性能。然而，面向实现“碳达峰、碳中和”的迫切需要，仅靠稳定控制并不能确保最佳的经济效益。如果给定的设定值不合理，即使多数指标保持稳定，反应氛围也会逐渐恶化，导致更多温室气体或污染气

体的排放。为了满足最优控制的新要求，一种新的实时优化(RTO)双层控制框架被提出[35–36]。RTO-MPC框架不仅可以实现被控对象的稳定运行，还能根据经济指标确定最佳设定值，从而为回转窑的优化控制提供了新的方向。

受复杂工业过程建模和优化控制的发展以及氧化锌回转窑新的生产需求的启发，本文提出了一种基于机理模型和稀疏辨识的多目标自适应优化模型预测控制方法(MAO-MPC)。首先，基于能量守恒定律，建立了氧化锌回转窑的CFD动力学模型。然后，鉴于CFD模型过于复杂，难以满足实时计算需求，本文提出了一种基于稀疏识别的模型降阶方法。具体而言，利用从CFD模型获得的原始数据，构建基函数库，求解稀疏回归问题，获取降阶模型。最后，提出了一种双层优化控制框架。在RTO层，建立了一个以实现最佳工艺操作性能为目标的优化问题。通过实时解决优化问题，可以向MPC层发送合适的设定值，以确保氧化锌回转窑始终处于最佳状态。实验表面该方法能显著提高控制效果。总体上，本文共有三个贡献点：

(1) 为了克服传统动力学CFD模型计算复杂度高的问题，提出了一种基于稀疏识别的模型降阶方法，实现氧化锌回转窑的动态特性实时获取。

(2) RTO层中设计了一个优化求解问题，该问题考虑了过程的经济性能和减少温室气体排放的需求，以获取过程控制最优设定值。

(3) 针对工业氧化锌回转窑，提出了双层控制方法(MAO-MPC)；该方法既能保证窑炉的高效运行，又能降低焦炭消耗量。

本文剩余部分内容为：在第2部分中，对氧化锌回转窑工艺进行简要介绍，并详细介绍机理模型构建方法；在第3部分中，将详细介绍所提出的基于稀疏辨识的模型降阶方法与双层控制架构；在第4部分中，对实验结果进行详细分析和讨论；在第5部分，将给出本文的研究结论。

2. 过程描述

在该部分，首先简要介绍了氧化锌回转窑的工艺过程。然后，将基于能量守恒定律，介绍如何构建氧化锌回转窑CFD动力学模型，该模型产生的数据将为后续的方法奠定基础。

2.1. 氧化锌回转窑过程

氧化锌回转窑是锌冶炼工业过程中的一个重要设备，决定了生产原料利用率。锌冶炼工艺的生产流程如图1所

示。生产原料送入焙烧炉后将产生锌精矿，锌精矿通过湿法冶金过程中的一系列离子和电化学反应，获得了纯锌产品。在湿法冶金过程中，浸出过程的目的是将原料中的锌元素溶解到溶液中，而铅和银等其他元素作为副产物保留在浸出渣中。然而，在实际生产过程中，一些未充分反应的氧化锌将被混合到浸出残渣中。为此，通常利用回转窑回收残余的氧化锌。具体而言，将浸出渣送往回转窑，通过高温煅烧和氧化还原反应将氧化锌从中分离出来，最终送回湿法冶金过程，提高资源利用率。

氧化锌回转窑的示意图如图2所示。根据温度的分布情况，回转窑内部可以分为几个区域：干燥区、预热区、反应区和冷却区。在生产过程中，窑体保持倾斜并不断缓慢旋转，窑内的原料在沿着窑壁进行圆周运动的同时，将从顶部（窑尾）缓慢地移动到底部（窑头）。当焦炭与浸出渣混合的原料被送入窑尾时，将先后经过干燥区和预热区，去除多余水分。氧化还原反应主要发生在反应区，产生高达1000~1200 °C的锌蒸气。当锌蒸气抵达冷却区时，

将鼓入大量空气，将其氧化为氧化锌蒸气，并将产物吹回窑尾部。由此可见，反应区中的反应气氛决定了回转窑的性能优劣。因为窑内温度分布情况会直接影响反应氛围，所以需要研究回转窑内温度沿轴向分布规律。

2.2. 回转窑轴向温度场建模

基于能量守恒方程，回转窑轴向温度场模型分为三相：气相、固相、窑壁。回转窑的横截面图如图3所示，其中， T_g 表示气相温度， T_s 表示固相温度， T_w 表示窑壁温度， T_o 表示环境温度。

为了简化建模过程，所建立模型符合以下假设[10,37]：

- 固体和气体的轴向线速度变化可以忽略不计。
- 忽略固体与气体轴向混合，将这两相运动情况视为活塞流模型。气体的固体阻力可以忽略不计。
- 传热系数和比热容系数是恒定的。
- 反应引起的固体和气体沿轴向的质量变化可以忽略不计。

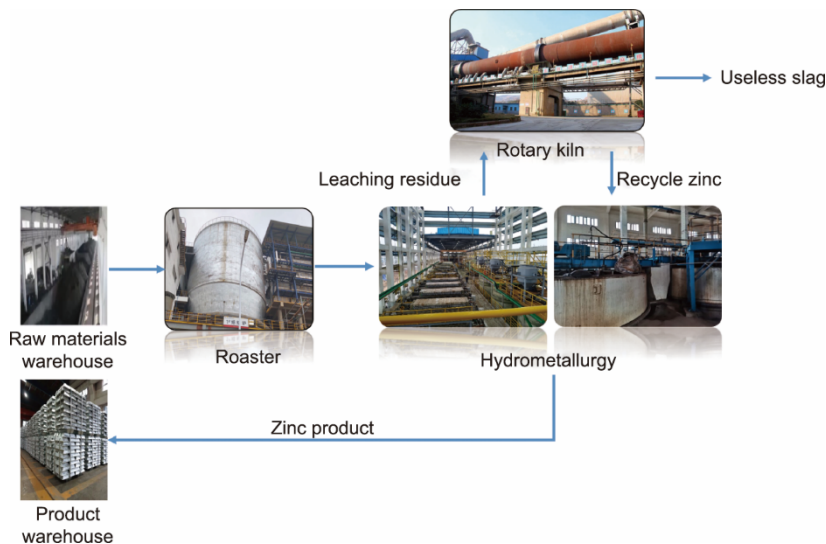


图1. 锌冶炼工业过程。

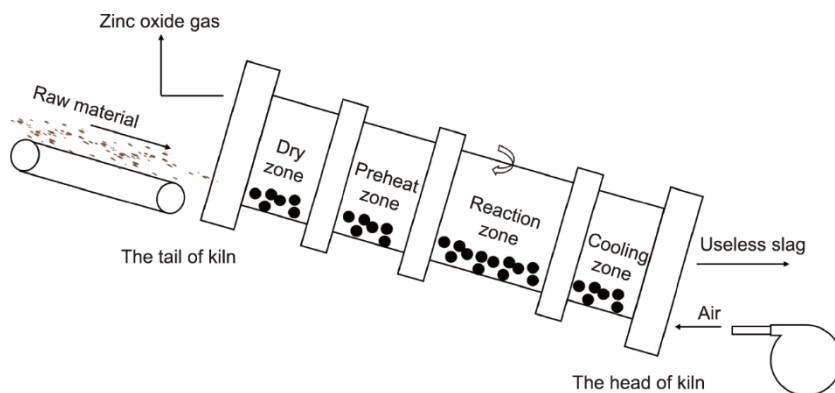


图2. 氧化锌回转窑示意图。

- 焦炭燃烧是主要热源，反应热可以忽略不计。
- 窑壁无法储存或消耗任何能量，这意味着其净能量为零。

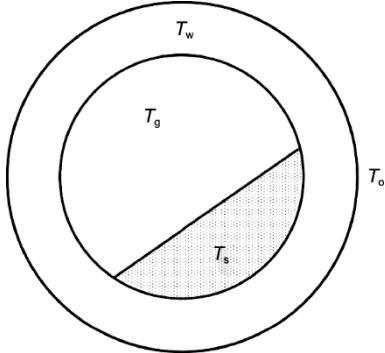


图3. 回转窑横截面示意图。

基于上述假设，回转窑的动力学模型可以表示为[10–12]:

气相:

$$c_g m_g \frac{\partial T_g}{\partial t} = -v_g c_g m_g \frac{\partial T_g}{\partial x} + \psi_{sg} A_{sg} (T_s - T_g) + \psi_{wg} A_{wg} (T_w - T_g) + \sigma \epsilon_s \epsilon_g A_{sg} (T_s^4 - T_g^4) + \sigma \epsilon_w \epsilon_g A_{wg} (T_w^4 - T_g^4) + Q_c^i \quad (1)$$

固相:

$$c_s m_s \frac{\partial T_s}{\partial t} = -v_s c_s m_s \frac{\partial T_s}{\partial x} + \psi_{sg} A_{sg} (T_g - T_s) + \psi_{ws} A_{ws} (T_w - T_s) + \sigma \epsilon_s \epsilon_g A_{sg} (T_g^4 - T_s^4) + \sigma \epsilon_w \epsilon_s A_{ws} (T_w^4 - T_s^4) \quad (2)$$

窑壁:

$$c_w m_w \frac{\partial T_w}{\partial t} = \psi_{wg} A_{wg} (T_g - T_w) + \psi_{ws} A_{ws} (T_w - T_s) + \sigma \epsilon_w \epsilon_g A_{wg} (T_g^4 - T_w^4) + \sigma \epsilon_w \epsilon_s A_{ws} (T_s^4 - T_w^4) + \psi_{wo} A_{wo} (T_o - T_w) \quad (3)$$

式中, x 、 t 分别表示空间域和时间域; v_g 、 v_s 分别表示气相和固相的移动速度; 公式(1)中的 Q_c^i 表示在位置 i 处由焦炭燃烧产生的热量, 其表达式[37]如下所示:

$$Q_c^i = m_{\text{coal}} Q_{\text{net}} \left(e^{\frac{-3.912L_{i+1}}{L_i^2}} - e^{\frac{-3.912L_i}{L_i^2}} \right) \quad (4)$$

式中, m_{coal} 表示焦炭质量; Q_{net} 表示焦炭燃烧热值, 本文中其数值为 $29 \text{ MJ} \cdot \text{kg}^{-1}$; L_f 表示火焰长度; L_i 表示窑内位置 i 与火眼中心的距离。表1提供了所有参数的物理含义, 表2列出了这些参数的取值, 这些参数的取值主要来源于参考文献[38]和现场回转窑设计图纸。借助COMSOL等CFD仿真软件, 可以获取上述动力学模型的解, 为回转窑反应氛围的优化控制奠定基础。

表1 回转窑动力学模型参数表

Parameter	Physical meaning
c_g	Specific heat of gas
c_s	Specific heat of solid
c_w	Specific heat of kiln wall
m_g	Mass of gas
m_s	Mass of solid
m_w	Mass of kiln wall
A_{sg}	Surface area between gas and solid
A_{wg}	Surface area between gas and wall
A_{ws}	Surface area between solid and wall
A_{wo}	Surface area between environment and wall
ψ_{sg}	Convection coefficient between gas and solid
ψ_{wg}	Convection coefficient between gas and wall
ψ_{ws}	Convection coefficient between solid and wall
ψ_{wo}	Convection coefficient between environment and wall
σ	Coefficient of radiation
ϵ_g	Emissivity of gas
ϵ_s	Emissivity of solid
ϵ_w	Emissivity of wall

表2 回转窑动力学模型参数取值

Parameter term	Value
$c_g m_g$	450.00
$c_s m_s$	550.00
$c_w m_w$	55.00
$\psi_{sg} A_{sg}$	74.50
$\psi_{wg} A_{wg}$	5.10
$\psi_{ws} A_{ws}$	2.50
$\psi_{wo} A_{wo}$	119.30
$\sigma \epsilon_s \epsilon_g A_{sg}$	5.04×10^{-8}
$\sigma \epsilon_w \epsilon_s A_{ws}$	5.22×10^{-8}
$\sigma \epsilon_w \epsilon_g A_{wg}$	5.32×10^{-8}

3. 提出方法

本部分将详细介绍了所提出的基于稀疏辨识的MAO-MPC方法, 旨在提高回转窑的运行性能。

3.1. 动机

基于CFD动力学模型, 能通过收集大量数据来分析 and 监测回转窑的运行状态。然而, 若涉及制定先进控制策略来改善回转窑反应氛围时, CFD模型因为计算复杂度过高, 实际应用价值将大幅降低。另外, 随着对实现“碳达峰、碳中和”目标的需求日益增加, 传统的稳定控制难以在确保高效生产的情况下同时减少环境污染和资源消耗。因此, 为了进一步提高回转窑的性能, 本文提出了

一种基于稀疏辨识的MAO-MPC方法。提出的方法有两个重要部分：模型降阶和RTO-MPC双层控制框架。基于稀疏回归强大的表示能力，稀疏辨识能在准确提取CFD模型关键动态特性的前提下，大幅降低模型阶次和计算复杂度。RTO层则设计了一个优化问题，其目标是实现最佳的工艺操作性能。通过实时优化获取最佳设定值，确保回转窑始终处于最佳状态。

3.2. 基于稀疏辨识模型降阶

稀疏辨识过程的示意图如图4所示，从公式(1)~(3)可以发现，CFD模型是一个来源于能量守恒、物理规律、现象总结的偏微分方程组(PDE)。因此，其一般表示形式如下所示：

$$u_t = N(1, x, u, u^2, \dots, u_x, u_{xx}, \dots) \quad (5)$$

式中， $N(\cdot)$ 表示一个非线性函数； u_t 、 u_x 分别表示对时间、空间维度的偏微分； x 表示空间位置信息；1表示偏微分方程中的常数项。由于 $N(\cdot)$ 很难获取，并且唯一能获取的信息只有偏微分方程产生的数据，因此，本文将利用稀疏辨识重构 $N(\cdot)$ 的非线性动态特性，具体如公式(6)所示：

$$\hat{u}_t = \sum_{j=1}^p \xi_j \theta_j(u) \quad (6)$$

式中， $\theta_j(u)$ 表示由多项式、三角函数或其他系统动态特性函数组成的非线性基函数库[15,22,26]； j 表示每个候选函数的位置编号； p 表示候选函数的总数量； ξ_j 表示所有候选项的参数向量，其中的非零项将对应被选中的候选项函数前的权值。

为从数据中重构 $N(\cdot)$ ，将从PDE系统中采集的历史数据 $U(x,t)$ 逼近它们对应的时间与空间偏导数 U_t 和 U_x 。这些偏导项通常可以通过直接测量获取或是利用历史数据 $U(x,t)$ 进行估算。所有采集的数据如下所示：

$$U(x,t) = \begin{bmatrix} u(x_0, t_0) & u(x_0, t_1) & \cdots & u(x_0, t_n) \\ u(x_1, t_0) & u(x_1, t_1) & \cdots & u(x_1, t_n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ u(x_m, t_0) & u(x_m, t_1) & \cdots & u(x_m, t_n) \end{bmatrix} \quad (7)$$

$$U_t(x,t) = \begin{bmatrix} u_t(x_0, t_0) & u_t(x_0, t_1) & \cdots & u_t(x_0, t_n) \\ u_t(x_1, t_0) & u_t(x_1, t_1) & \cdots & u_t(x_1, t_n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ u_t(x_m, t_0) & u_t(x_m, t_1) & \cdots & u_t(x_m, t_n) \end{bmatrix} \quad (8)$$

$$U_x(x,t) = \begin{bmatrix} u_x(x_0, t_0) & u_x(x_0, t_1) & \cdots & u_x(x_0, t_n) \\ u_x(x_1, t_0) & u_x(x_1, t_1) & \cdots & u_x(x_1, t_n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ u_x(x_m, t_0) & u_x(x_m, t_1) & \cdots & u_x(x_m, t_n) \end{bmatrix} \quad (9)$$

接着，一个包括多项式、三角函数、偏微分项的非线性函数库 $\Theta(U)$ 如下所示：

$$\Theta(U) = [1, X, U, U^2, U^3, \dots, \sin U, \cos U, \dots, U_x, U_{xx}, \dots] \quad (10)$$

类比公式(6)，动态系统可以近似为：

$$U_t \approx \Theta(U) \cdot \Xi \quad (11)$$

对于公式(11)，最重要的是找到一个合适的 Ξ ，因为其是每个候选非线性函数的系数向量，需要配合函数库

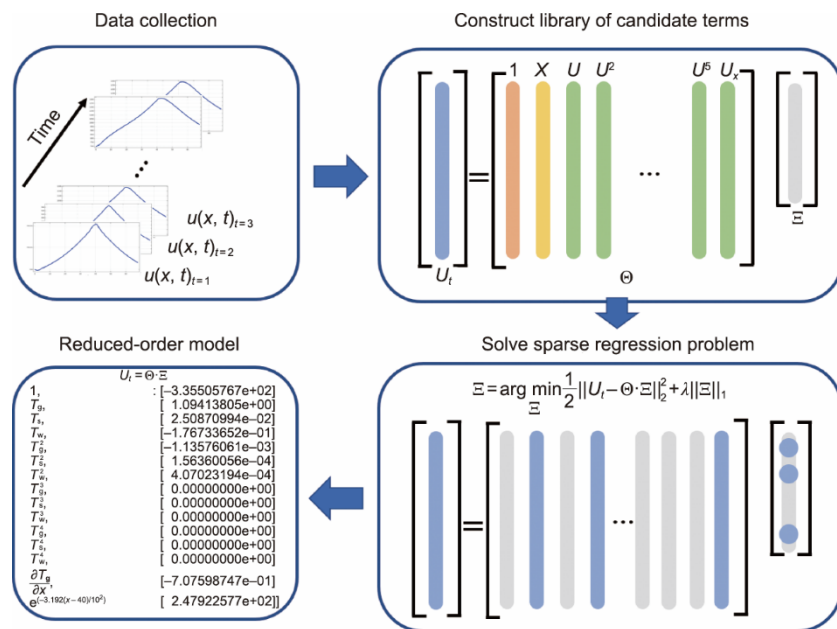


图4. 稀疏辨识过程示意图。

Θ 才能完美重构 $N(\cdot)$ 。因为 Θ 是过完备的，所以有理由假设只有函数库中的某些项将被选中来重构 $N(\cdot)$ [15,23]，进而公式 (11) 可以转换为如下的稀疏回归问题：

$$\Xi = \underset{\Xi}{\operatorname{argmin}} \frac{1}{2} \|U_i - \Theta \cdot \Xi\|_2^2 + \lambda \|\Xi\|_1 \quad (12)$$

式中， λ 表示决定参数向量 Ξ 稀疏度的超参数。上述优化问题是一个典型的稀疏回归问题，可以通过算法 1 中所示的顺序阈值最小二乘法来解决。通过稀疏辨识，将提取对 CFD 模型动态特性至关重要的函数项，以此建立降阶模型，显著降低计算复杂度，满足实时计算的需求。

算法 1 顺序阈值最小二乘法

输入：时间偏微分项 U_i ，候选函数库 Θ ，阈值 ε

- (1) 初始化： $\Xi^0 = \Theta^\dagger \cdot U_i$
- (2) 当 $k <$ 最大迭代次数，执行
- (3) 找到小于阈值的参数项： $I_{\text{small}} \leftarrow \operatorname{abs}(\Xi^k) < \varepsilon$
- (4) 将所有小于阈值参数项置零： $\Xi^k(I_{\text{small}}) = 0$
- (5) 获取大于阈值参数项的索引： $I_{\text{big}} \leftarrow \operatorname{abs}(\Xi^k) \geq \varepsilon$
- (6) 更新参数 Ξ^k ： $\Xi^k = \Theta(I_{\text{big}})^\dagger \cdot U_i$
- (7) $k = k + 1$
- (8) 结束循环

输出：稀疏参数向量 Ξ

3.3. 多目标自适应优化预测控制

利用所获得的降阶模型，可以满足实时计算的要求，并研发先进的控制策略。对氧化锌回转窑而言，控制目标是控制进料量 m_{coal} 和进料速度 v_s 来尽可能优化反应区固相温度 T_s 。由于“碳达峰、碳中和”对锌冶炼行业提出了新的要求，例如，在保持高效益的同时确保低资源消耗和绿色生产，这让传统稳定控制方法逐渐暴露出其局限性和缺点。因此，本文提出了一种包括实时优化（RTO）层和模型预测控制（MPC）层的多目标自适应优化预测控制（MAO-MPC）方法。方法整体架构图如图 5 所示，其中， $r(t)$ 表示设定输出， $u(t)$ 表示控制变量， $y(t)$ 表示系统输出， $\hat{y}(t)$ 表示预测模型输出， $e(t)$ 表示预测模型误差， d 表示环境扰动。

3.3.1. 模型预测控制

在模型预测控制（MPC）层中，其目标是通过在线滚动优化得到最优控制量 $u(t)$ ，保证系统尽可能去追踪实时优化（RTO）层给出的参考轨迹 $r(t)$ 。本文中，在给定预测与控制步长 T_p 、 T_c 的情况下，优化问题可以表示如下：

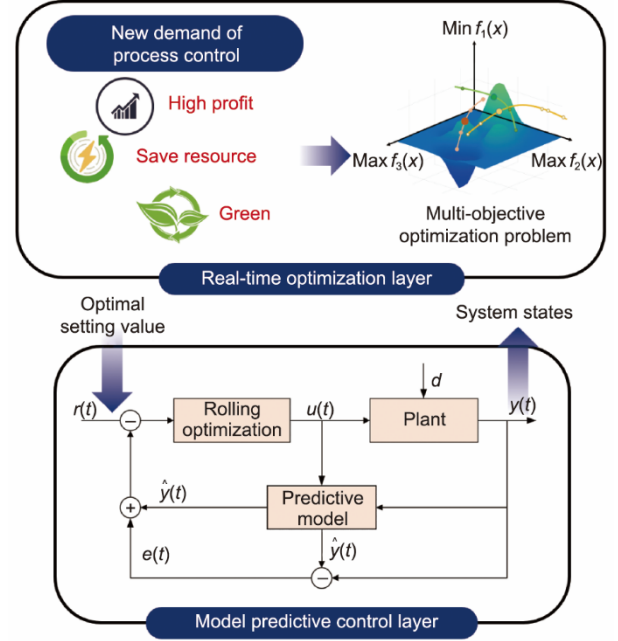


图 5. 双层控制架构示意图。

$$\begin{aligned} \min_{U(t)} J(t) &= \min_{U(t)} \left[\mathbf{R}(t) - \hat{\mathbf{Y}}(t) \right]^T a \left[\mathbf{R}(t) - \hat{\mathbf{Y}}(t) \right] + \\ &\Delta \mathbf{U}(t)^T b \Delta \mathbf{U}(t) \\ \text{Subject to} \\ \hat{y}(t) &= f_d(v_s, m_{\text{coal}}) \\ |\Delta u(t)| &\leq \Delta u_{\text{max}} \\ u_{\text{min}} &\leq u(t) \leq u_{\text{max}} \\ \hat{y}_{\text{min}} &\leq \hat{y}(t) \leq \hat{y}_{\text{max}} \end{aligned} \quad (13)$$

式中， a 和 b 表示权重参数； $\mathbf{R}(t) = [r(t+1), r(t+2), \dots, r(t+T_p)]$ 表示设定输出； $\hat{\mathbf{Y}}(t) = [\hat{y}(t+1), \hat{y}(t+2), \dots, \hat{y}(t+T_p)]$ 表示预测输出； $\mathbf{U}(t) = [u(t+1), u(t+2), \dots, u(t+T_c)]$ 表示最优控制律； $\Delta \mathbf{U}(t) = [\Delta u(t+1), \Delta u(t+2), \dots, \Delta u(t+T_c)]$ 表示控制增量； $f_d(\cdot)$ 表示固相温度的动态模型，该模型可通过稀疏辨识方法获得。

对于公式 (13) 的优化问题，梯度下降法（GD）是一种有效求解方法，因为问题中的所有函数是连续且可导的。具体而言，梯度下降优化方法的表达式如下所示：

$$U_{k+1}(t) = U_k(t) + \Delta U_k(t) \quad (14)$$

$$\Delta U_k(t) = \eta_1 \left[- \frac{\partial J(t)}{\partial U_k(t)} \right] \quad (15)$$

式中， $\eta_1 > 0$ 表示学习率； k 表示迭代次数。根据公式 (13)，目标函数 $J(t)$ 的求导过程可以表示如下：

$$\frac{\partial J(t)}{\partial U_k(t)} = -a \left[\frac{\partial \hat{\mathbf{Y}}(t)}{\partial U_k(t)} \right]^T \left[\mathbf{R}(t) - \hat{\mathbf{Y}}(t) \right] + b \Delta U_k(t) \quad (16)$$

因此，公式 (15) 可以表示为：

$$\begin{aligned}\Delta \mathbf{U}_k(t) &= \eta_1 \left\{ a \left[\frac{\partial \hat{\mathbf{Y}}(t)}{\partial \mathbf{U}_k(t)} \right]^T \left[\mathbf{R}(t) - \hat{\mathbf{Y}}(t) \right] - b \Delta \mathbf{U}_k(t) \right\} \\ &= \frac{l}{l + \eta_1 b} \eta_1 a \left[\frac{\partial \hat{\mathbf{Y}}(t)}{\partial \mathbf{U}_k(t)} \right]^T \left[\mathbf{R}(t) - \hat{\mathbf{Y}}(t) \right]\end{aligned}\quad (17)$$

对于梯度下降法，优化问题的约束条件通常可以利用投影梯度方法解决，该方法会将优化变量投影到高维空间进行求解。因为本文所涉及的优化问题中的约束均为盒约束（常数或线性约束），公式（14）、（15）可以表示为[39]：

$$\mathbf{U}_{k+1}(t) = P_1[\mathbf{U}_k(t) + \Delta \mathbf{U}_k(t)] \quad (18)$$

$$\Delta \mathbf{U}_k(t) = P_2 \eta_1 \left[- \frac{\partial \mathbf{J}(t)}{\partial \mathbf{U}_k(t)} \right] \quad (19)$$

式中， $P_1^k[\mathbf{U}_k(t)]$ 、 $P_2^k[\Delta \mathbf{U}_k(t)]$ 表示向量 $\mathbf{U}_k(t)$ 、 $\Delta \mathbf{U}_k(t)$ 的投影形式，向量 $\mathbf{U}_k(t)$ 、 $\Delta \mathbf{U}_k(t)$ 经过投影后的每项可以表示为：

$$\begin{aligned}P_1^k[u_k(t)] &= \min \{ u_{\max}, \max [u_{\min}, u_k(t)] \} \\ &= \begin{cases} u_{\max}, & \text{if } u_k(t) > u_{\max} \\ u_k(t), & \text{if } u_{\min} \leq u_k(t) \leq u_{\max} \\ u_{\min}, & \text{if } u_k(t) < u_{\min} \end{cases}\end{aligned}\quad (20)$$

$$\begin{aligned}P_2^k[\Delta u_k(t)] &= \min \{ \Delta u_{\max}, \max [-\Delta u_{\max}, \Delta u_k(t)] \} \\ &= \begin{cases} \Delta u_{\max}, & \text{if } \Delta u_k(t) > \Delta u_{\max} \\ \Delta u_k(t), & \text{if } -\Delta u_{\max} \leq \Delta u_k(t) \leq \Delta u_{\max} \\ -\Delta u_{\max}, & \text{if } \Delta u_k(t) < -\Delta u_{\max} \end{cases}\end{aligned}\quad (21)$$

式中， u_{\max} 表示 $u_k(t)$ 上界约束； u_{\min} 表示 $u_k(t)$ 下界约束； Δu_{\max} 表示控制增量 $\Delta u_k(t)$ 的取值范围。关于系统状态约束，如处理控制输入约束，通过将投影方法添加到预测模型中，以确保满足约束。为了加快优化过程，本文提出了一种改进的自适应梯度下降方法，该方法使用自然对数来衰减学习率；这使得可以加快所提出的方法的收敛速度：

$$\eta_1^{k+1} = \eta_1^k e^{-\omega k} \quad (22)$$

式中， ω 表示每次迭代的衰减率； k 表示迭代次数。

通过求解优化问题，将获得最优控制序列 $u(t)$ 。之后，将 $u(t)$ 的第一个元素作为控制信号输入被控系统以实现系统的输出，可以跟踪参考轨迹，保证回转窑在最佳状态下运行。

3.3.2. 实时优化

在实时优化（RTO）层中，其基本目标是根据过程控制的几个新要求，设计一个合适的多目标优化问题。之后通过对所设计的优化问题的求解，可以获得最优设定值，从而确保过程在最优状态下工作。同时，系统的实时状态

将会连续送入RTO层，从而及时更新最优设定值。对于回转窑，考虑两个方面来制定多目标优化问题：焦炭消耗量和产品质量。为了从这两个方面更好地评估生产过程的性能，本文定义了一个成本函数如下：

$$C = C_{\text{Material}} + C_{\text{Production}} \quad (23)$$

式中， C_{Material} 表示原料成本，主要来源于焦炭消耗。其具体表达式如下所示：

$$C_{\text{Material}} = \alpha \cdot m_{\text{coal}} \quad (24)$$

式中， α 表示焦炭市场价。 $C_{\text{Production}}$ 表示生产成本，其主要取决于产品质量，因为更好的产品质量能降低重复生产的次数。根据先前对氧化锌回转窑的分析，可以知道其作用是提高废渣中锌的回收率，以提高资源利用率。很明显，锌的再循环速率取决于反应区中的固体温度，因为更高的温度可以加快反应速率以产生更多的锌。基于上述分析， $C_{\text{Production}}$ 可以表示为：

$$C_{\text{Production}} = \beta \cdot e^{-\tau T_s} \quad (25)$$

式中， β 表示重复生产的成本； τ 表示一个用于衡量产品质量对生产成本影响的超参数。因此，RTO层的目标是最小化生产成本，其优化问题可以表示为：

$$\begin{aligned}\min_{T_s^*} C &= \min_{T_s^*} \alpha \cdot m_{\text{coal}} + \beta \cdot e^{-\tau T_s^*} \\ \text{Subject to} & \\ T_s^* &= f_s(v_s, m_{\text{coal}}) \\ v_{\min} &\leq v_s \leq v_{\max} \\ m_{\min} &\leq m_{\text{coal}} \leq m_{\max}\end{aligned}\quad (26)$$

式中， v_s 表示物料运动速度； $f_s(\cdot)$ 表示固相温度稳态模型，其可以从降阶后的模型获取。利用梯度下降法，可以求解公式（26）的优化问题，从而将优化设定值送入模型预测控制（MPC）层，提升回转窑运行性能。

4. 实验

在该部分，将开展一系列实验，验证所提方法的优越性。所有方法的性能将使用平均绝对百分比误差（MAPE）、均方根误差（RMSE）、控制变量平均变化量（ $\overline{\Delta u}$ ）指标进行衡量。这些指标的表达式如下所示：

$$\text{MAPE} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left| \frac{y_i - \hat{y}_i}{y_i} \right| \times 100\% \quad (27)$$

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i - r_i)^2} \quad (28)$$

$$\overline{\Delta u} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |\Delta u(i)| \quad (29)$$

式中， r_i 表示设定追踪轨迹； y_i 表示系统实际输出； \hat{y}_i 表示预测模型输出； $\Delta u(i)$ 表示控制变量改变量。

4.1. 验证降阶模型

首先，降阶模型能否精确表示回转窑 CFD 模型很大程度决定了对反应区固相温度的控制效果。因此，通过开展一系列对比实验，以检验基于稀疏辨识的降阶模型是否可靠。回转窑作为一个典型分布式参数系统，其温度与时间和空间有很强的关系；因此，有必要从稳态和动态两个方面对降阶模型进行验证。

4.1.1. 稳态验证

回转窑 CFD 模型的稳态模型假设系统状态不会进一步改变。因此，它主要关注温度沿空间位置的分布情况。一般而言，回转窑中固相温度从最低点开始，因为原料通常在未被加热情况下直接送入窑内。当原料逐渐进入反应区时，温度逐渐攀升，最终在反应区的某处达到最大值。然后，当固体通过冷却区时，其温度急剧下降。对比实验的结果如图 6 所示，从中可以发现：无论温度分布曲线的趋势还是每个位置的温度值，基于稀疏辨识的降阶模型都与原始 CFD 模型相似，表明了所提方法的可靠性。

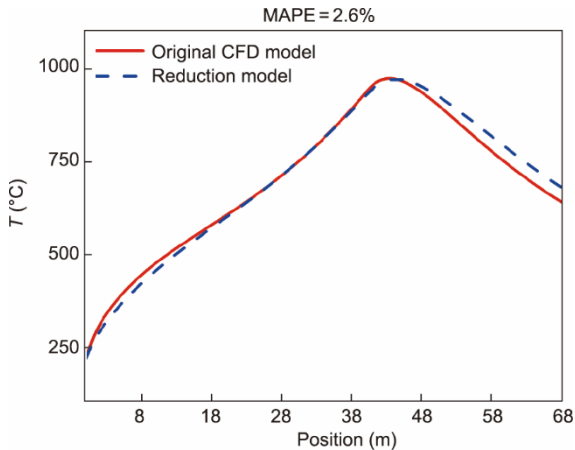


图 6. CFD 模型和降阶模型的温度稳态分布对比实验结果。

4.1.2. 动态验证

回转窑 CFD 模型的动态特性表示窑内固相温度随时间的变化情况。对于回转窑内的任何位置，给定初始状态，如果控制变量保持不变，随着时间的推移，固体的温度将逐渐接近稳定状态。对比实验结果如图 7 所示，可以发现：降阶模型能保留 CFD 模型中的大量动态特征，为后续过程控制奠定基础。

验证降阶模型动态特性是否准确的另一个方面是研究其对控制变量引发的动态响应是否符合氧化锌回转窑的原理。根据现场工人操作经验，焦炭消耗量 m_{coal} 和固体运动速度 v_s 对固相温度有较大影响。对于焦炭消耗量，一个显而易见的结论是：消耗更多焦炭将产生更多热量，导致温

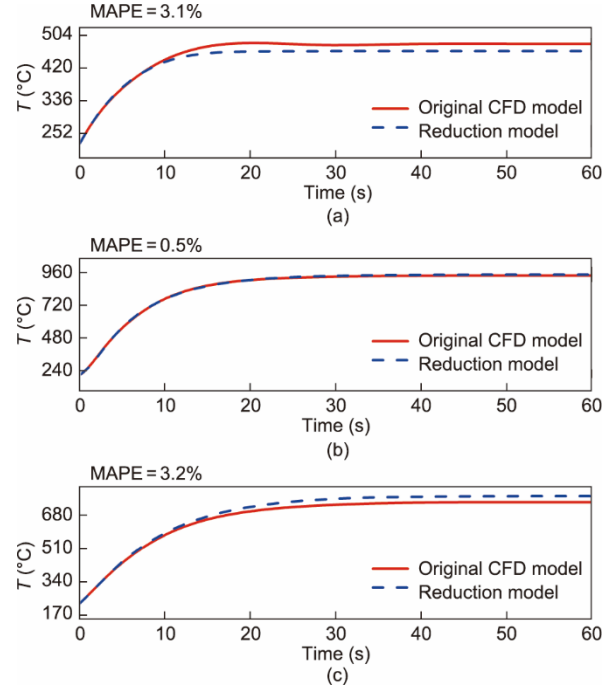


图 7. CFD 模型和降阶模型在不同位置的温度动态变化情况对比实验结果。(a) 10 m; (b) 40 m; (c) 60 m。

度升高。而对于固体运行速度，其决定了物料在窑内停留时间。停留时间越长，其温度越高。在本实验中，为了研究所提出的降阶模型的动态响应，控制变量将在某个时间点发生阶跃变化。实验结果如图 8 所示，从中可以发现：与原始 CFD 模型相比，所提降阶模型的动态响应完全符合回转窑的原理。通过这些验证实验，验证了所提出的降阶模型的有效性，其可以取代原来的模型来满足最优控制的实时性要求。

4.2. 回转窑控制效果

在该部分，将所提出的最优控制方法的控制效果与来自现场工作的两种控制方案进行了比较：(a) 将回转窑窑尾温度保持在 600~700 °C；(b) 将回转窑反应区的温度保持在 1000~1200 °C。两种对比方法均采用 MPC 方法，MPC 的预测模型为所提出的降阶模型。实验中，来自工人经验的设定值分别为 670 °C 和 1100 °C，所提出的优化 MPC 方法的超参数为 $a = 1, b = 1, \alpha = 0.035, \beta = 4.8, \tau = 3.5 \times 10^{-3}$ ；预测步长为 $T_p = 2$ ；控制步长为 $T_c = 1$ 。所有方法的实验结果如图 9 和表 3 所示。

从图 9 和表 3 可以发现：所有的方法都可以完美地实现温度设定值的稳定性控制。然而，为实现“碳达峰、碳中和”总体目标，需要满足更高标准，如减少焦炭消耗。上述两种对比方法无法根据回转窑的运行状态调整温度最优设定值，将导致更大的焦炭消耗和温室气体或污染气体

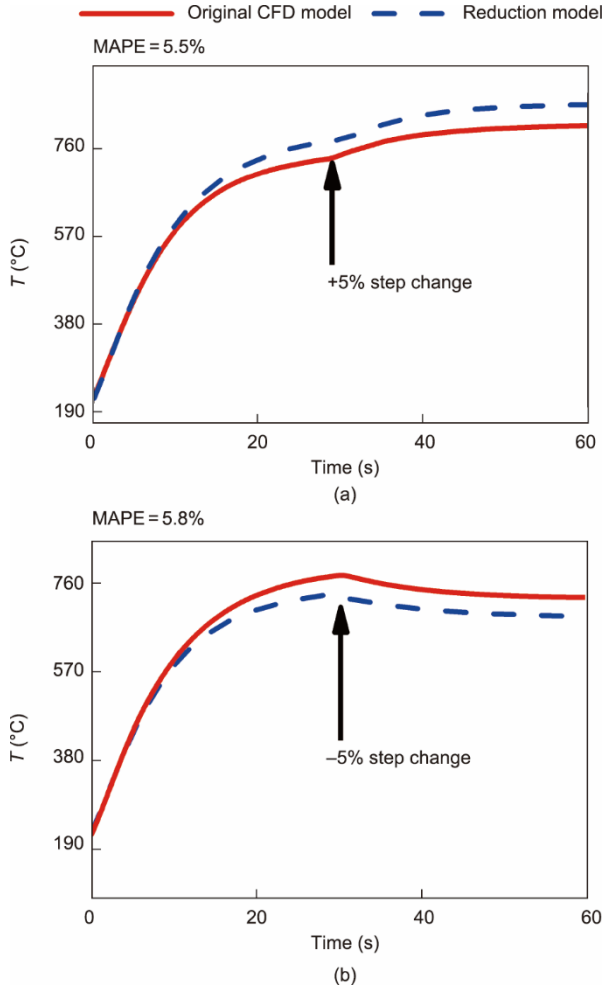


图8. 对控制变量阶跃变化的动态响应实验结果。(a) 增加5%控制量阶跃；(b) 减少5%控制量阶跃。

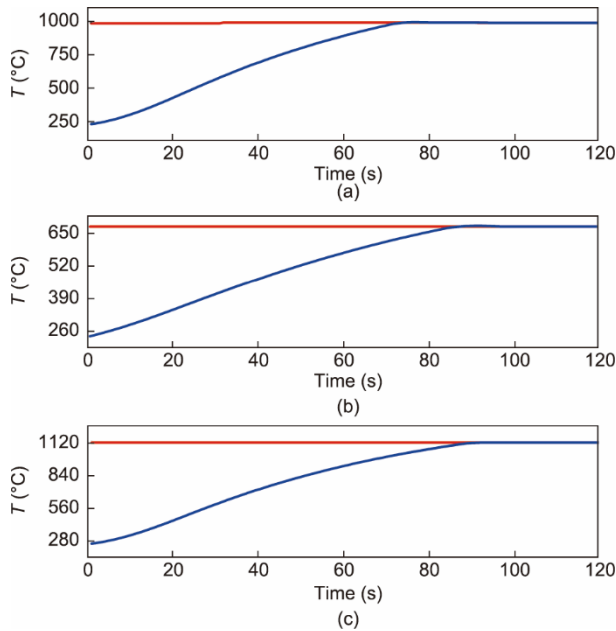


图9. 回转窑温度控制结果。(a) MAO-MPC；(b) MPC（窑尾）；(c) MPC（窑内反应区）。

表3 所有控制方法对比情况

Method	RMSE	$\overline{\Delta u}$	Coal consumption	Production cost
MPC (tail)	0.747	0.062	5.572	0.384
MPC (reaction zone)	0.874	0.046	5.896	0.394
MAO-MPC	0.497	0.077	5.331	0.379

The minimum values of each method are in bold.

的排放。本文所提出的最优控制方法在RTO层设计了一个多目标优化问题，该问题考虑了新的控制需求，可以及时确定回转窑的最佳温度设定值。因此，该方法不仅保持了回转窑的稳定，而且达到了最佳的经济性能，降低了焦炭消耗。

为了比较每种方法时间计算成本，此处开展了相关消耗时间对比实验，相关结果如图10所示，可以发现：本文提出的方法所花费的时间与设定值优化的频率密切相关，因为每轮优化过程需要借助降阶模型求解回转窑的稳态模型。优化过程进行得越频繁，所花费的时间就越多。此外，由于回转窑是一个缓慢变化的过程，因此优化设定值的频率越高，控制效果并不一定会越好。所以，实际应用时最佳设定值将在一段时间内保持不变。因此，所提出的方法所需的时间取决于优化设定值的频率，相关的优化频率可以通过实际应用的需求来确定。

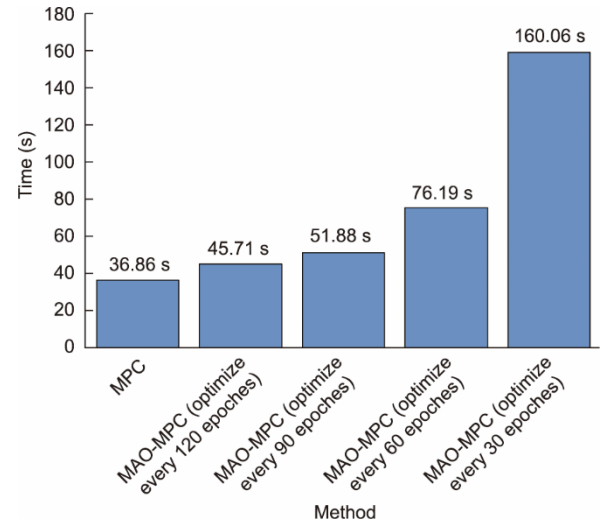


图10. 普通MPC和所提方法在不同优化频率下消耗时间的比较。

5. 结论

为满足氧化锌回转窑过程控制的新需求，本文提出了一种新型模型降阶和双层最优控制框架。首先，基于稀疏辨识，对回转窑CFD动力学模型进行简化，以满足实时计算。然后，在双层最优控制框架中，RTO层以实现最

优流程运行性能为目标的优化问题，通过实时求解优化问题，将最优设定值发送至MPC层，确保氧化锌回转窑始终工作在最优状态。多次实验表明，本方法可以使回转窑获得更好的控制性能，并可以降低焦炭消耗。未来，将继续研究如何提高机理模型的精度与设计优化目标函数的形式，以进一步提高回转窑的性能。

致谢

本研究得到了国家科技部重点研发计划(2022YFB3304900)、国家自然科学基金项目(61988101、62073340、61860206014)、鹏城实验室重大攻关项目(PCL2021A09)、湖南科技创新项目(2022JJ10083、2021RC3018、2021RC4054)、中南大学创新驱动项目(2019CX020)的资助。

Compliance with ethics guidelines

Ke Wei, Keke Huang, Chunhua Yang, and Weihua Gui declare that they have no conflict of interest or financial conflicts to disclose.

References

- [1] Zeng Z, Gui W, Chen X, Xie Y, Zhang H, Sun Y. A cell condition-sensitive frequency segmentation method based on the sub-band instantaneous energy spectrum of aluminum electrolysis cell voltage. *Engineering* 2021;7(9):1282–92.
- [2] Dai H, Su Y, Kuang L, Liu J, Gu D, Zou C. Contemplation on China's energy development strategies and initiatives in the context of its carbon neutrality goal. *Engineering* 2021;7(12):1684–7.
- [3] Cai B, Zhang L, Lei Y, Wang J. A deeper understanding of the CO₂ emission pathway under China's carbon emission peak and carbon neutrality goals. *Engineering*. In press.
- [4] Zhang X, Gao X. The pathway toward carbon neutrality: challenges and countermeasures. *Engineering* 2022;14:1–2.
- [5] Zuo J, Zhong Y, Yang Y, Fu C, He X, Bao B, et al. Analysis of carbon emission, carbon displacement and heterogeneity of Guangdong power industry. *Energy Rep* 2022;8(Suppl 6):438–50.
- [6] Mujumdar KS, Ranade VV. CFD modeling of rotary cement kilns. *Asia-Pac J Chem Eng* 2008;3(2):106–18.
- [7] Li W, Wang D, Chai T. Burning state recognition of rotary kiln using ELMs with heterogeneous features. *Neurocomputing* 2013;102:144–53.
- [8] Chai T, Ding J. Smart and optimal manufacturing for process industry. *Strateg Study Chin Acad Eng* 2018;20(4):51–8. Chinese.
- [9] Boateng AA, Barr PV. A thermal model for the rotary kiln including heat transfer within the bed. *Int J Heat Mass Transf* 1996;39(10):2131–47.
- [10] Wang Z, Wang TR, Yuan M, Wang H. Dynamic model for simulation and control of cement rotary kilns. *J Syst Simul* 2008;20(19):5131–5.
- [11] Hanein T, Glasser FP, Bannerman MN. One-dimensional steady-state thermal model for rotary kilns used in the manufacture of cement. *Adv Appl Ceramics* 2017;116(4):207–15.
- [12] Rodrigues DCQ, Soares Jr AP, Costa Jr EF, Costa AOS. Dynamic analysis of the temperature and the concentration profiles of an industrial rotary kiln used in clinker production. *An Acad Bras Ciênc* 2017;89(4):3123–36.
- [13] Witt PJ, Sinnott MD, Cleary PW, Schwarz MP. A hierarchical simulation methodology for rotary kilns including granular flow and heat transfer. *Miner Eng* 2018;119:244–62.
- [14] Ditaranto M, Bakken J. Study of a full scale oxy-fuel cement rotary kiln. *Int J Greenh Gas Control* 2019;83:166–75.
- [15] Narasingam A, Sang-II KJ. Data-driven identification of interpretable reduced-order models using sparse regression. *Comput Chem Eng* 2018;119:101–11.
- [16] Pitschaiah S, Armaou A. Output feedback control of dissipative PDE systems with partial sensor information based on adaptive model reduction. *AIChE J* 2013;59(3):747–60.
- [17] Benner P, Gugercin S, Willcox K. A survey of projection-based model reduction methods for parametric dynamical systems. *SIAM Rev* 2015;57(4):483–531.
- [18] Yang M, Armaou A. Synthesis of equation-free control structures for dissipative distributed parameter systems using proper orthogonal decomposition and discrete empirical interpolation methods. *Ind Eng Chem Res* 2017;56(36):10110–22.
- [19] Van Overschee P, De Moor B. N4SID: subspace algorithms for the identification of combined deterministic-stochastic systems. *Automatica* 1994;30(1):75–93.
- [20] Viberg M. Subspace-based methods for the identification of linear timeinvariant systems. *Automatica* 1995;31(12):1835–51.
- [21] Qin SJ. An overview of subspace identification. *Comput Chem Eng* 2006;30(10–12):1502–13.
- [22] Brunton SL, Proctor JL, Kutz JN. Discovering governing equations from data by sparse identification of nonlinear dynamical systems. *Proc Natl Acad Sci USA* 2016;113(15):3932–7.
- [23] Rudy SH, Brunton SL, Proctor JL, Kutz JN. Data-driven discovery of partial differential equations. *Sci Adv* 2017;3(4):1602614.
- [24] Huang K, Tao Z, Wang C, Guo T, Yang C, Gui W. Cloud-edge collaborative method for industrial process monitoring based on error-triggered dictionary learning. *IEEE Trans Ind Inform* 2022;18(12):8957–66.
- [25] Kaiser E, Kutz JN, Brunton SL. Sparse identification of nonlinear dynamics for model predictive control in the low-data limit. *Proc R Soc A* 2018;474(2219):20180335.
- [26] Bhadriraju B, Bangi MSF, Narasingam A, Sang-II KJ. Operable adaptive sparse identification of systems: application to chemical processes. *AIChE J* 2020;66(11):e16980.
- [27] Li J, Sun G, Zhao G, Lehman LH. Robust low-rank discovery of data-driven partial differential equations. *Proc AAAI Conf Artif Intell* 2020;34(1):767–74.
- [28] Han H, Qiao J. Nonlinear model-predictive control for industrial processes: an application to wastewater treatment process. *IEEE Trans Ind Electron* 2014;61(4):1970–82.
- [29] Han HG, Zhang L, Hou Y, Qiao JF. Nonlinear model predictive control based on a self-organizing recurrent neural network. *IEEE Trans Neural Netw Learn Syst* 2016;27(2):402–15.
- [30] Wang G, Jia QS, Qiao J, Bi J, Zhou MC. Deep learning-based model predictive control for continuous stirred-tank reactor system. *IEEE Trans Neural Netw Learn Syst* 2021;32(8):3643–52.
- [31] Teja R, Sridhar P, Guruprasath M. Control and optimization of a triple string rotary cement kiln using model predictive control. *IFAC-PapersOnLine* 2016;49(1):748–53.
- [32] Wurzingner A, Leibinger H, Jakubek S, Kozek M. Data driven modeling and nonlinear model predictive control design for a rotary cement kiln. *IFAC PapersOnLine* 2019;52(16):759–64.
- [33] Stadler KS, Poland J, Gallestey E. Model predictive control of a rotary cement kiln. *Control Eng Pract* 2011;19(1):1–9.
- [34] Machalek D, Powell KM. Model predictive control of a rotary kiln for fast electric demand response. *Miner Eng* 2019;144:106021.
- [35] Rawlings JB, Amrit R. Optimizing process economic performance using model predictive control. In: Magni L, Raimondo DM, Allgöwer F, editors. *Nonlinear model predictive control: towards new challenging applications*. Heidelberg: Springer, Berlin; 2009. p. 119–38.
- [36] Wu Q, Du W, Nagy Z. Steady-state target calculation integrating economic optimization for constrained model predictive control. *Comput Chem Eng* 2021;145:107145.
- [37] Fan X, Li J, Chen X, Wang Y, Gan M. Temperature field simulation model for rotary kiln of iron ore oxidized pellet. *J Iron Steel Res Int* 2013;20(4):16–9.
- [38] Li SQ, Ma LB, Wan W, Yao Q. A mathematical model of heat transfer in a rotary kiln thermo-reactor. *Chem Eng Technol* 2005;28(12):1480–9.
- [39] Viljoen JH, Muller CJ, Craig IK. Hybrid nonlinear model predictive control of a cooling water network. *Control Eng Pract* 2020;97:104319.