



SVT - ÜBUNG 3

LÖSUNG - OPTIMIERUNG EINER POLYKONDENSATIONSSTUFE

1 VORBEMERKUNGEN

- Die Polykondensation war bereits Gegenstand in:
 - 6. Übung PAVP: Versuchsplanung
 - 7. Übung PAVP: Experimentelle, statistische Modellbildung durch Regressionsanalyse

In der hier zu lösenden Aufgabe wird das Modell für die Lösung einer Optimierungsaufgabe herangezogen. Dies ist eine wichtige Form der Anwendung mathematischer Modelle!

- Für die konkrete Aufgabenstellung reduziert sich die Menge der Entscheidungsvariablen auf p und T . Alle anderen Größen (Durchsatz, Eingangsviskosität, usw.) bleiben konstant. Das Modell wird für diesen Fall angepasst, d.h. einige Terme werden zu Konstanten bzw. lassen sich mit den Koeffizienten zusammenfassen. Das bereits angepasste Restmodell besitzt dann die in der Aufgabenstellung angegebene Form:

$$\eta_a = a_0 + a_1 T + a_2 T^2 + a_3 p \quad (1)$$

- Das Zielkriterium (Betriebskosten je Zeiteinheit)

$$K = k_1 (T - T_e) + k_2 \frac{p_0}{p} \quad (2)$$

berücksichtigt:

- Kosten steigen mit steigender Temperatur
- Kosten steigen mit sinkendem Druck bzw. steigendem Vakuum
- Es handelt sich um eine Pilotanlage, daher sind die absoluten Kosten relativ gering

2 AUFGABEN

2.1 DARSTELLUNG

Ausgangspunkt ist die Kostenfunktion

$$K = k_1 (T - T_e) + k_2 \frac{p_0}{p} \quad (3)$$

Auf einer Höhenlinie sind die Betriebskosten konstant, d.h. $K = \text{const.} = K_c$. Durch Auflösen nach p erhält man:

$$\boxed{p = \frac{k_2 \rho_0}{K_c - k_1 (T - T_e)}} \quad (4)$$

Ziel der folgenden Untersuchungen ist die Darstellung der Funktion $p(T)$ mit dem Parameter K_c in der T - p -Ebene um das Lösungsgebiet zu visualisieren.

Kurvendiskussion

Für Darstellung der Zielfunktion gilt durch Einführung $\Delta T = T - T_e$ gilt:

$$p = \frac{k_2 \rho_0}{K_c - k_1 \Delta T} \quad (5)$$

Nun kann zunächst der Kurvenverlauf von p über T für ein konstantes K_c ermittelt werden:

- **Schnittpunkt mit der p-Achse** (linker Rand):

$$p^0 = p(\Delta T = 0) = \frac{k_2 \rho_0}{K_c}$$

- **Pol** (rechter Rand):

$$\Delta T \rightarrow \frac{K_c}{k_1} \rightarrow p \rightarrow \infty \rightarrow \Delta T_P = \frac{K_c}{k_1}$$

- **Hyperbolischer Verlauf** (Verlauf zwischen Nullstelle und Polstelle):

$$\Delta T \uparrow \rightarrow (K_c - k_1 \Delta T) \downarrow \rightarrow p \uparrow$$

Verschiedene Höhenlinien für konstante K_c erhält man anschließend durch Variation von K_c :

- **Schnittpunkt mit der p-Achse** (linker Rand):

$$K_c \uparrow \rightarrow p^0 \downarrow$$

- **Pol** (rechter Rand):

$$K_c \uparrow \rightarrow \Delta T_P \uparrow$$

- Für beliebiges $\Delta T = \text{const.}$ (Verlauf zwischen Nullstelle und Polstelle):

$$K_c \uparrow \rightarrow p \downarrow$$

Für die Darstellung der Nebenbedingungen gilt:

- Nebenbedingungen in Ungleichungsform (physikalische, technische Bedingungen):

- Untere Grenze des Druckbereichs:

$$p > p_0 \rightarrow p = p_0$$

- Obere Grenze des Temperaturbereichs:

$$\Delta T < \Delta T_{\text{Grenz}} \rightarrow \Delta T = \Delta T_{\text{Grenz}}$$

- Nebenbedingung in Gleichungsform: Modelgleichung $\eta_a = \eta_{\text{soll}}$ ist eine nach unten hin geöffnete quadratische Gleichung mit:

$$\eta_{\text{soll}} = a_0 + a_1 T + a_2 T^2 + a_3 p \quad (6)$$

$$p = \frac{1}{a_3} \left[\eta_{\text{soll}} - a_0 - a_1 T - a_2 T^2 \right] \quad (7)$$

Tabellierung (alternativer Ansatz)

Vereinfachen der Zielfunktion durch Zusammenfassen von Konstanten in jeweiliger Variable:

$$p^* = \frac{1}{K_c - \Delta T^*} \quad \text{mit} \quad p^* = \frac{p}{k_2 p_0} \quad \text{und} \quad \Delta T^* = k_1 \Delta T \quad (8)$$

Tab. 1: Berechnete Werte für den Kurvenverlauf

K_c	ΔT^*			
	2	5	7	10
0	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{5}$	$\frac{1}{7}$	$\frac{1}{10}$
1	$\frac{1}{1}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{6}$	$\frac{1}{9}$
2	∞	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{5}$	$\frac{1}{8}$
3	-	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{7}$
4	-	$\frac{1}{1}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{6}$
5	-	∞	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{5}$

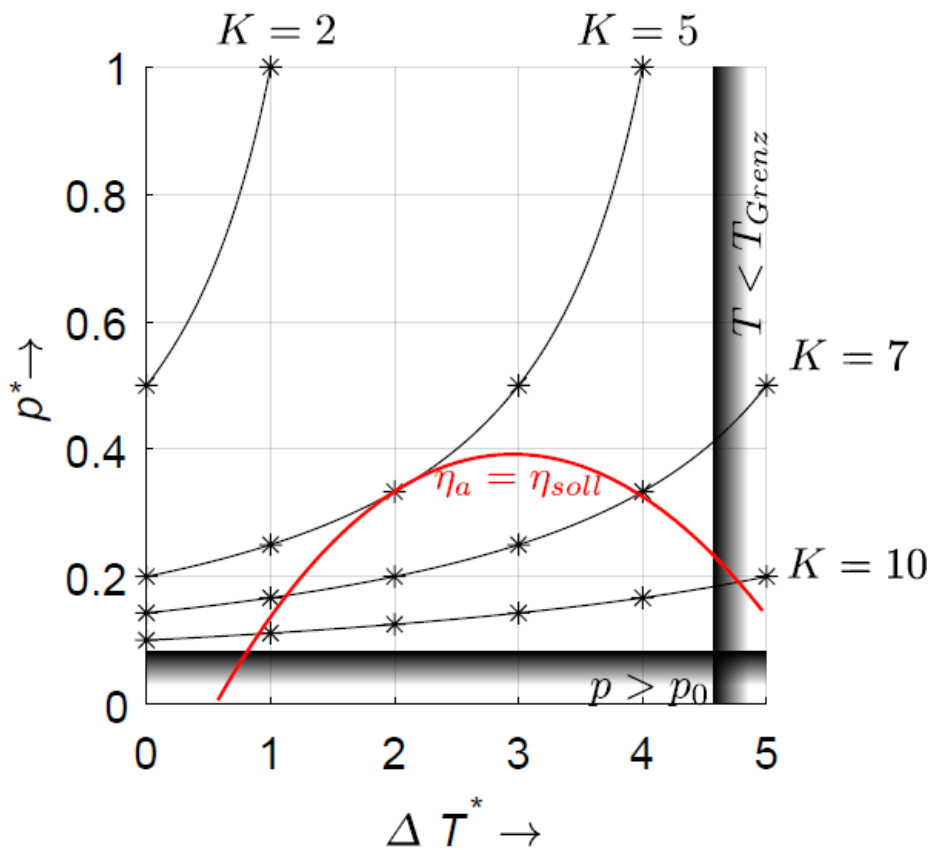


Abb. 1: Qualitative Darstellung des Lösungsgebiets

Aus den Darstellungen geht eindeutig hervor, dass es für das Optimierungsproblem unter den Nebenbedingungen ein Minimum geben muss.

2.2 ANALYTISCHE BEHANDLUNG DES OPTIMIERUNGSPROBLEMS

Die Menge der laut Modellgleichung zulässigen Zustände ist konvex, daher muss ein gefundenes lokales Minimum dem globalen Minimum entsprechen. Im Folgenden werden lediglich die notwendigen Bedingungen für Extrema betrachtet. Das Optimierungsproblem wird zunächst unter Vernachlässigung der Grenzen für Temperatur und Druck gelöst. Daher ist im Nachgang sicherzustellen, dass die ermittelte Lösung die Grenzen nicht verletzt werden. Eine Möglichkeit die Grenzen ebenfalls in die Zielfunktion einzuarbeiten wäre die Einführung sogenannter Straffunktionen.

Substitution durch die Nebenbedingung

Eine Entscheidungsvariable wird durch die Nebenbedingung substituiert.

$$K = k_1 (T - T_e) + \frac{k_2 p_0 a_3}{\eta_{\text{soll}} - a_0 - a_1 T - a_2 T^2} \quad (9)$$

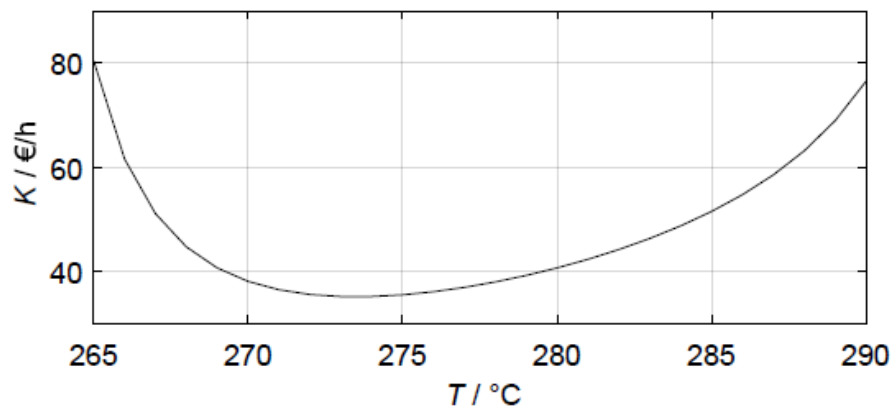


Abb. 2: Zielfunktion unter Berücksichtigung der Gleichungsbedingung

Notwendige Bedingung für ein Optimum (Quotientenregel: $f'(x) = \left(\frac{u(x)}{v(x)} \right)' = \frac{u'(x)v(x) - u(x)v'(x)}{(v(x))^2}$):

$$\frac{dK}{dT} = k_1 - \frac{k_2 p_0 a_3 (-a_1 - 2 a_2 T)}{(\eta_{\text{soll}} - a_0 - a_1 T - a_2 T^2)^2} = 0 \quad (10)$$

Die entstehende Gleichung lässt sich nicht nach T auflösen, daher ist ein numerisches Lösungsverfahren erforderlich. Das Einsetzverfahren bietet sich an. Die Scheinauflösung nach T ergibt die folgende Iterationsvorschrift:

$$T_{i+1} = \frac{1}{2 a_2} \left[-a_1 - \frac{k_1}{k_2 p_0 a_3} (\eta_{\text{soll}} - a_0 - a_1 T_i - a_2 T_i^2)^2 \right] \quad (11)$$

Anwendung des LAGRANGESchen Multiplikators

Einführung eines erweiterten Zielkriteriums, das die Nebenbedingung in Form der Gleichungsbedingung als Ergänzung erhält:

$$L = K + \lambda g(p, T) \quad (12)$$

L ist die LAGRANGE-Funktion des Systems und g die Gleichungsbedingung in der Form:

$$g(\rho, T) = 0 = \eta_{\text{soll}} - a_0 - a_1 T - a_2 T^2 - a_3 \rho \quad (13)$$

Es folgt:

$$L = k_1 (T - T_e) + k_2 \frac{\rho_0}{\rho} + \lambda (\eta_{\text{soll}} - a_0 - a_1 T - a_2 T^2 - a_3 \rho) \quad (14)$$

Notwendige Bedingung für die Lösung des Optimierungsproblems lautet:

$$\frac{\partial L}{\partial T} = 0; \quad \frac{\partial L}{\partial \rho} = 0; \quad \frac{\partial L}{\partial \lambda} = 0; \quad (15)$$

Es ergibt sich das Gleichungssystem:

$$\frac{\partial L}{\partial T} = k_1 + \lambda (-a_1 - 2 a_2 T) = 0 \quad (16)$$

$$\frac{\partial L}{\partial \rho} = -k_2 \frac{\rho_0}{\rho^2} - \lambda a_3 = 0 \quad (17)$$

$$\frac{\partial L}{\partial \lambda} = \eta_{\text{soll}} - a_0 - a_1 T - a_2 T^2 - a_3 \rho = 0 \quad (18)$$

Durch Einsetzen und Umstellen erhält man wiederum die Iterationsvorschrift für das Einsetzverfahren.

2.3 NUMERISCHE LÖSUNG MIT HILFE EINES SUCHSCHRITTVERFAHRENS

Zur Lösung des Optimierungsproblems kann die Achsenparallele Suche verwendet werden. Das Verfahren der Achsenparallelen Suche (Gauss-Seidel-Verfahren) wurde ursprünglich für lineare Gleichungssysteme entwickelt. Im Falle nicht-linearer Gleichungssysteme ist eine innere Iterationsschleife zur Lösung der jeweils entstehenden inneren nicht-linearen Gleichung nötig.

Durch Einsetzen der Nebenbedingung lässt sich das zweidimensionale Optimierungsproblem aus der Ausgangsgleichung für die Betriebskosten in ein eindimensionales Problem überführen:

$$K = k_1 (T - T_e) + \frac{k_2 \rho_0 a_3}{\eta_{\text{soll}} - a_0 - a_1 T - a_2 T^2} \quad (19)$$

Dieses Optimierungsproblem lässt sich mit Hilfe der Achsenparallelen Suche entlang der T-Achse lösen.

- a) Festlegung des Startpunktes T_0 , der Schrittweite α und des Abbruchkriteriums ε :

$$T_0 = T_e \quad \alpha = 1 \text{ K} \quad \varepsilon = 0,5 \text{ K}$$

- b) Ermitteln der Suchrichtung: **if** $K(T_0 + \alpha) > K(T_0)$ **then** $\alpha := -\alpha$
c) Suche mit konstanter Schrittweite $T_{i+1} := T_i + \alpha$ solange bis $K(T_{i+1}) > K(T_i)$
d) Umkehr der Suchrichtung und Halbierung der Schrittweite, wenn gilt $K(T_{i+1}) > K(T_i)$. Errechnen der neuen Schrittweite mit $\alpha := -\frac{\alpha}{2}$
e) *Abbruchtest*: Gilt $|\alpha| < \varepsilon$, so ist die Suche abzubrechen. Ist dies nicht der Fall wird mit dem 3. Schritt fortgefahren.

Tab. 2: Iterationsschritte nach mittels Achsenparalleler Suche des Solver für $T_0 = T_e$; $\alpha = 1 \text{ K}$; $\varepsilon = 0,5 \text{ K}$

i	T	$K(T)$	α
0	270	38,131	1
1	271	36,527	1
2	272	35,617	1
3	273	35,222	1
4	274	35,227	-0,5
5	273,5	35,180	-0,5
6	273	35,222	0,25