



SVT - ÜBUNG 6

LÖSUNG - DYNAMISCHE OPTIMIERUNG EINER REAKTORKASKADE

THEORETISCHE GRUNDLAGEN

BELLMAN'sches Optimalitätsprinzip ... besagt, dass ein Problem eine optimale Substruktur besitzt, wenn sich die Lösung aus den optimalen Lösungen der Subprobleme ermitteln lässt. Dies ist Grundbedingung für die sogenannte **Dynamische Optimierung** oder auch **Dynamische Programmierung**, die von Richard Bellman 1957 in seinem Buch *Dynamic programming* eingeführt wurde.

Alternative Definition: Die **Dynamische Optimierung** betrachtet dynamische Optimierungsprobleme, d.h. Probleme mit einem über mehrere Perioden oder Stufen ablaufenden Entscheidungsprozess. In jeder Periode können jeweils andere Ziele und Nebenbedingungen gelten.

AUFGABEN

MODELLGLEICHUNGEN

Aus der chemischen Reaktion erster Ordnung $A \longrightarrow B$ resultiert die Reaktionsrate

$$r_i = -k(T_R) c_{A,i} \quad (1)$$

Die Stoffmengenbilanz im i -ten Kaskadenelement gehorcht:

$$\frac{dc_{A,i}}{dt} = \frac{\dot{V}}{V_i} (c_{A,i-1} - c_{A,i}) - k c_{A,i} \quad (2)$$

Die stationäre Bilanz in Standardform lautet:

$$\boxed{\mathbf{x}_i = \mathbf{f}_i(\mathbf{x}_{i-1}, \mathbf{u}_i)} \quad (3)$$

Damit gilt im vorliegenden speziellen Fall:

$$\boxed{c_{A,i} = \frac{c_{A,i-1}}{1 + k \bar{t}} \quad \text{mit} \quad \bar{t} = \frac{V_i}{\dot{V}}} \quad (4)$$

ABLEITUNG DER ZIELFUNKTION

Laut Aufgabe soll die mittlere Gesamtverweilzeit minimiert werden, d.h. es muss gelten

$$Z^* = \bar{t} = \sum_{i=1}^n \bar{t}_i \rightarrow \min \quad (5)$$

Um die Schreibarbeit zu reduzieren wird eine transformierte Zielfunktion Z eingeführt

$$Z = k \bar{t} = \sum_{i=1}^n \tau_i \rightarrow \min \quad \text{mit} \quad \tau_i = k \bar{t}_i \quad (6)$$

Damit nehmen die Modellgleichungen die Form an:

$$c_{A,i} = \frac{c_{A,i-1}}{1 + \tau_i} \quad (7)$$

Für die Verweilzeiten in den einzelnen Reaktoren i gilt:

$$\tau_i = \frac{c_{A,i-1}}{c_{A,i}} - 1 \quad i \in [1, n] \quad (8)$$

LÖSUNG DES PROBLEMS MIT DYNAMISCHER OPTIMIERUNG (DYNAMISCHER PROGRAMMIERUNG)

RÜCKWÄRTSRECHNEN

- Das erste Teilproblem beinhaltet lediglich den letzten Reaktor mit dem Index n .

$$Z^1 = Z_n(x_{n-1}, u_n) = \tau_n \quad (9)$$

τ_n ist Steuergröße. In der n -ten Stufe ist mit bekannter Eingangsgröße $c_{A,n-1}$ die optimale Verweilzeit bekannt, da es eine eindeutige Beziehung zwischen τ_n und $c_{A,n-1}$ gibt. Die Modellgleichung dieser Stufe lautet:

$$c_{A,n} = \frac{c_{A,n-1}}{1 + \tau_n} \quad (10)$$

Damit gilt für die Verweilzeit:

$$\tau_n = \frac{c_{A,n-1}}{c_{A,n}} - 1 \quad (11)$$

Da die Eingangsgröße $c_{A,n-1}$ aus den vorhergehenden Stufen resultiert, ergibt sich eine eindeutige Berechnungsvorschrift für τ_n , d.h. es ist kein Optimierungsproblem zu lösen. Daher gilt:

$$Z_{opt}^1(c_{A,n-1}) = \tau_n = \frac{c_{A,n-1}}{c_{A,n}} - 1 \quad (12)$$

- Das zweite Teilproblem beinhaltet die letzten beiden Reaktoren mit den Indizes $n-1$ und n .

$$Z^2 = \tau_{n-1} + \tau_n \quad (13)$$

Für die Zielfunktion gilt:

$$Z^2(\tau_{n-1}, c_{A,n-2}) = \tau_{n-1} + \frac{c_{A,n-1}}{c_{A,n}} - 1 \rightarrow \min \quad (14)$$

Die Stoffmengenkonzentration $c_{A,n-1}$ ist ein innerer Zustand des Systems und kann durch die folgende Gleichung ersetzt werden:

$$c_{A,n-1} = \frac{c_{A,n-2}}{1 + \tau_{n-1}} \quad (15)$$

Es folgt die Zielfunktion auf Basis des Zustands am Eintritt $c_{A,n-2}$ und der Steuergröße τ_{n-1} .

$$\boxed{Z^2(\tau_{n-1}, c_{A,n-2}) = \tau_{n-1} + \frac{c_{A,n-2}}{c_{A,n}} \frac{1}{1 + \tau_{n-1}} - 1 \rightarrow \min} \quad (16)$$

Die notwendige Bedingung für ein Optimum lautet:

$$\frac{dZ^2}{d\tau_{n-1}} = 1 - \frac{c_{A,n-2}}{c_{A,n}} \frac{1}{(1 + \tau_{n-1,opt})^2} = 0 \quad (17)$$

Es ergibt sich die optimale Verweilzeit $\tau_{n-1,opt}$ im Reaktor $i = n - 1$:

$$\boxed{\tau_{n-1,opt} = \left(\frac{c_{A,n-2}}{c_{A,n}} \right)^{\frac{1}{2}} - 1} \quad (18)$$

Durch Einsetzen in die Ausgangsgleichung erhält man den optimalen Wert der Zielfunktion:

$$Z_{opt}^2 = \left(\frac{c_{A,n-2}}{c_{A,n}} \right)^{\frac{1}{2}} - 1 + \frac{c_{A,n-2}}{c_{A,n}} \frac{1}{1 + \left(\frac{c_{A,n-2}}{c_{A,n}} \right)^{\frac{1}{2}} - 1} - 1 \quad (19)$$

$$\boxed{Z_{opt}^2(c_{A,n-2}) = 2 \left[\left(\frac{c_{A,n-2}}{c_{A,n}} \right)^{\frac{1}{2}} - 1 \right]} \quad (20)$$

– Das dritte Teilproblem beinhaltet die letzten drei Reaktoren mit den Indizes $n - 2$, $n - 1$ und n .

$$Z^3 = \tau_{n-2} + \tau_{n-1} + \tau_n \quad (21)$$

Es gilt:

$$\boxed{Z^3(\tau_{n-2}, c_{A,n-3}) = \tau_{n-2} + 2 \left[\left(\frac{c_{A,n-2}}{c_{A,n}} \right)^{\frac{1}{2}} - 1 \right] \rightarrow \min} \quad (22)$$

mit

$$c_{A,n-2} = \frac{c_{A,n-3}}{1 + \tau_{n-2}} \quad (23)$$

Die weitere Vorgehensweise ist vollkommen analog zu Z_{opt}^2 .

$$\boxed{Z^3(\tau_{n-2}, c_{A,n-3}) = \tau_{n-2} + 2 \left[\left(\frac{c_{A,n-3}}{c_{A,n}} \frac{1}{1 + \tau_{n-2}} \right)^{\frac{1}{2}} - 1 \right] \rightarrow \min} \quad (24)$$

$$\frac{dZ^3}{d\tau_{n-2}} = 1 + 2 \left(\frac{c_{A,n-3}}{c_{A,n}} \right)^{\frac{1}{2}} \left(-\frac{1}{2} \right) (1 + \tau_{n-2,opt})^{-\frac{3}{2}} = 0 \quad (25)$$

$$\left(\frac{C_{A,n-3}}{C_{A,n}}\right)^{\frac{1}{2}} = (1 + \tau_{n-2,opt})^{\frac{3}{2}} \quad (26)$$

$$\tau_{n-2,opt} = \left(\frac{C_{A,n-3}}{C_{A,n}}\right)^{\frac{1}{3}} - 1 \quad (27)$$

$$Z_{opt}^3 = \left(\frac{C_{A,n-3}}{C_{A,n}}\right)^{\frac{1}{3}} - 1 + 2 \left[\left(\frac{C_{A,n-3}}{C_{A,n}} \frac{1}{\left(\frac{C_{A,n-3}}{C_{A,n}}\right)^{\frac{1}{3}}} \right)^{\frac{1}{2}} - 1 \right] \quad (28)$$

$$Z_{opt}^3 = \left(\frac{C_{A,n-3}}{C_{A,n}}\right)^{\frac{1}{3}} - 1 + 2 \left[\left(\left(\frac{C_{A,n-3}}{C_{A,n}}\right)^{\frac{2}{3}} \right)^{\frac{1}{2}} - 1 \right] \quad (29)$$

$$Z_{opt}^3 = 3 \left[\left(\frac{C_{A,n-3}}{C_{A,n}}\right)^{\frac{1}{3}} - 1 \right] \quad (30)$$

– Ableitung allgemeiner Berechnungsvorschriften für die Verweilzeit und das Optimum der Zielfunktion:

$$\tau_{i,opt} = \left(\frac{C_{A,i-1}}{C_{A,n}}\right)^{\frac{1}{n-i+1}} - 1 \quad (31)$$

$$Z_{opt}^{n-i+1} = (n-i+1) \left[\left(\frac{C_{A,i-1}}{C_{A,n}}\right)^{\frac{1}{n-i+1}} - 1 \right] \quad (32)$$

VORWÄRTSRECHNEN

– Für $i = 1$ ergibt sich $\tau_{1,opt}$ aus $C_{A,0}$ entsprechend der oben ermittelten Berechnungsvorschrift.

$$\tau_{1,opt} = \left(\frac{C_{A,0}}{C_{A,n}}\right)^{\frac{1}{n}} - 1 \quad (33)$$

$$C_{A,1,opt} = \frac{C_{A,0}}{1 + \tau_{1,opt}} = C_{A,0} \left(\frac{C_{A,n}}{C_{A,0}}\right)^{\frac{1}{n}} = C_{A,0}^{\frac{n-1}{n}} C_{A,n}^{\frac{1}{n}} \quad (34)$$

– Für $i = 2$ ergibt sich die optimale Fortsetzung aus $\tau_{2,opt}$, wenn $C_{A,1}$ bekannt ist.

$$\tau_{2,opt} = \left(\frac{C_{A,1}}{C_{A,n}}\right)^{\frac{1}{n-1}} - 1 \quad (35)$$

Durch Ersetzen von $C_{A,1}$ mit der eintretenden Stoffmengenkonzentration $C_{A,1,opt}$ ergibt sich:

$$\tau_{2,opt} = \left[\frac{C_{A,0}^{\frac{n-1}{n}} C_{A,n}^{\frac{1}{n}}}{C_{A,n}} \right]^{\frac{1}{n-1}} - 1 \quad (36)$$

$$\tau_{2,opt} = \left[\left(\frac{C_{A,0}}{C_{A,n}}\right)^{\frac{n-1}{n}} \right]^{\frac{1}{n-1}} - 1 \quad (37)$$

$$(38)$$

$$\tau_{2,opt} = \left(\frac{C_{A,0}}{C_{A,n}} \right)^{\frac{1}{n}} - 1 \quad (39)$$

– Alle Kaskadenelemente sind offenbar gleich groß. Die Verweilzeit ergibt sich aus folgender Berechnungsvorschrift:

$$\tau_{i,opt} = \left(\frac{C_{A,0}}{C_{A,n}} \right)^{\frac{1}{n}} - 1 \quad \forall i \in [1, n] \quad (40)$$

Die Definitionsgleichung von τ lautet:

$$\tau_{i,opt} = \frac{k V_{i,opt}}{\dot{V}} \quad (41)$$

Daraus ergibt sich das Volumen der einzelnen Reaktoren

$$V_{i,opt} = \frac{\dot{V}}{k} \left[\left(\frac{C_{A,0}}{C_{A,n}} \right)^{\frac{1}{n}} - 1 \right] \quad (42)$$

und das Gesamtvolumen aller Reaktoren

$$V_{opt} = \frac{n \dot{V}}{k} \left[\left(\frac{C_{A,0}}{C_{A,n}} \right)^{\frac{1}{n}} - 1 \right] \quad (43)$$

KONZENTRATIONSPROFIL

$$\frac{C_{A,i}}{C_{A,i-1}} = \frac{1}{1 + \tau_{opt}} \quad \text{mit} \quad \tau_{opt} = \tau_{1,opt} = \tau_{2,opt} = \dots = \tau_{n-1,opt} = \tau_{n,opt} \quad (44)$$

Damit erhält man durch Multiplikation sofort:

$$\frac{C_{A,i}}{C_{A,0}} = \frac{1}{(1 + \tau_{opt})^i} \quad (45)$$

Mit der Beziehung

$$\tau_{opt} = \left(\frac{C_{A,0}}{C_{A,n}} \right)^{\frac{1}{n}} - 1 \quad (46)$$

folgt die allgemeine Berechnungsvorschrift für die Stoffmengenkonzentrationen:

$$\frac{C_{A,i}}{C_{A,0}} = \left(\frac{C_{A,n}}{C_{A,0}} \right)^{\frac{i}{n}} \quad (47)$$

$$C_{A,i} = C_{A,0} \left(\frac{C_{A,n}}{C_{A,0}} \right)^{\frac{i}{n}} \quad (48)$$