



SVT - Übung 5

Lösung - Optimierung eines Reaktorsystems

Theoretische Grundlagen

lagrangesche Multiplikatoren

Optimierungsprobleme mit Gleichungsbedingungen lassen sich mit Hilfe des sogenannten lagrangeschen Multiplikators in unbeschränkte Optimierungsprobleme umformen. Dazu werden die Zielfunktion Z und die Gleichungsbedingung g wie folgt zur LAGRANGE'schen Funktion verknüpft:

$$L(x, \lambda) = Z(x) + \lambda g(x) \quad (1)$$

Numerische Lösungsverfahren

Einsetzverfahren Die Iterationsvorschrift dient der Lösung von Gleichungen der Form

$$x = \varphi(x) \quad (2)$$

und lautet

$$x_{i+1} = \varphi(x_i) \quad (3)$$

newton-Verfahren Die Iterationsvorschrift dient der Lösung von Gleichungen der Form

$$\varphi(x) = 0 \quad (4)$$

und lautet:

$$x_{i+1} = x_i - \frac{\varphi(x_i)}{\varphi'(x_i)} \quad (5)$$

Aufgaben

Vorbereitung

Zunächst können folgende wichtige Kenndaten aus der Aufgabenstellung entnommen werden:

- Reaktion $E \longrightarrow Z$ ist erster Ordnung
- volumenbeständig
- isotherm
- Reaktionsgeschwindigkeitskonstante: $k = 0,5 \text{ h}^{-1}$
- Volumenstrom des Ausgangsstoffes: $\dot{V} = 4 \text{ m}^3 \text{ h}^{-1}$
- Reaktorvolumina: $V_{R,B} = 4 \text{ m}^3$, $V_{R,C} = 12 \text{ m}^3$

Modellgleichung des einfachen Rührkesselreaktors

Da die Prozessgruppe C besteht nur aus einem Reaktor, betrachten wir zunächst diese, um das Modell eines Einzelreaktors herzuleiten. Für die Stoffmengenbilanz für den Stoff E im stationären Zustand gilt:

$$\frac{dN_{E,C}}{dt} = 0 = \dot{N}_{E,5} - \dot{N}_{E,6} + R_E V_{R,C} \quad (6)$$

Hier $\dot{N}_{E,5}$ und $\dot{N}_{E,6}$ sind zufließende und abfließende Stoffströme, $R_E V_{R,C}$ bezeichnet Stoffmengenänderung infolge der chemischen Reaktion. Diese Gleichung lässt sich entsprechend umformen durch Einsetzen der Stoffmengenänderungsgeschwindigkeit R_E . Es gilt:

$$R_E = \nu_E r \quad (7)$$

mit dem Stöchiometrieoeffizienten des Eduktes ν_E , der im Fall der vorgegebenen Reaktion gleich -1 ist. Die Reaktionsrate r der Reaktion erster Ordnung ist:

$$r = k c_E \quad (8)$$

Da die Reaktoren isotherm betrieben werden, bleibt die Reaktionsgeschwindigkeit konstant. Aus der Annahme Volumenbeständigkeit folgt $\dot{V}_6 = \dot{V}_5$. Der austretende Strom besitzt die Eigenschaften des Reaktionsraum $c_{E,6} = c_{E,C}$. Damit gilt:

$$0 = c_{E,5} \dot{V}_5 - c_{E,6} \dot{V}_5 - k c_{E,6} V_{R,C} \quad (9)$$

Durch Umstellen ergibt sich:

$$c_{E,6} (\dot{V}_5 + k V_{R,C}) = c_{E,5} \dot{V}_5 \quad (10)$$

Daraus folgt wiederum:

$$\boxed{\frac{c_{E,6}}{c_{E,5}} = \frac{1}{1 + k \tau_C} \quad \text{mit} \quad \tau_C = \frac{V_{R,C}}{\dot{V}_5}} \quad (11)$$

Modellgleichungen der Rührkesselkaskade

Zunächst sind wiederum die Stoffbilanzen für den Ausgangsstoff E aufzustellen. Es gilt $V_{R,B} = V_{R,B1} = V_{R,B2} = V_{R,B3}$:

$$\frac{dN_{E,B1}}{dt} = 0 = \dot{N}_{E,1} - \dot{N}_{E,2} + R_{E,B1} V_{R,B} \quad (12)$$

$$\frac{dN_{E,B2}}{dt} = 0 = \dot{N}_{E,2} - \dot{N}_{E,3} + R_{E,B2} V_{R,B} \quad (13)$$

$$\frac{dN_{E,B3}}{dt} = 0 = \dot{N}_{E,3} - \dot{N}_{E,4} + R_{E,B3} V_{R,B} \quad (14)$$

Diese lassen sich analog zum einfachen Rührkesselreaktor wie folgt umformen:

$$0 = c_{E,1} \dot{V}_1 - c_{E,2} \dot{V}_1 - k c_{E,2} V_{R,B} \quad (15)$$

$$0 = c_{E,2} \dot{V}_1 - c_{E,3} \dot{V}_1 - k c_{E,3} V_{R,B} \quad (16)$$

$$0 = c_{E,3} \dot{V}_1 - c_{E,4} \dot{V}_1 - k c_{E,4} V_{R,B} \quad (17)$$

Durch Umstellen und Einführung der Verweilzeit $\tau_B = \frac{V_{R,B}}{\dot{V}_1}$ folgt

$$\frac{c_{E,2}}{c_{E,1}} = \frac{1}{1 + k \tau_B} \quad (18)$$

$$\frac{c_{E,3}}{c_{E,2}} = \frac{1}{1 + k \tau_B} \quad (19)$$

$$\frac{c_{E,4}}{c_{E,3}} = \frac{1}{1 + k \tau_B} \quad (20)$$

Für die Gesamtübertragungsfunktion gilt:

$$\boxed{\frac{c_{E,4}}{c_{E,1}} = \frac{1}{(1 + k \tau_B)^3} \quad \text{mit} \quad \tau_B = \frac{V_{R,B}}{\dot{V}_1}} \quad (21)$$

Daraus lässt sich eine Berechnungsvorschrift für eine Rührkesselreaktorkaskade aus n Reaktoren mit gleichem Volumen V_R entsprechend den in der Aufgabenstellung gegebenen Vereinfachungen ableiten.

$$\frac{c_n}{c_0} = \frac{1}{\left(1 + k \frac{V_R}{\dot{V}}\right)^n} = \frac{1}{\left(1 + \frac{k}{n} \frac{V_{R,ges}}{\dot{V}}\right)^n} \quad \text{mit} \quad V_{R,ges} = n V_R \quad (22)$$

Formulierung des Optimierungsproblems

Es gilt die Komponentenbilanz:

$$0 = \dot{N}_{E,4} + \dot{N}_{E,6} - \dot{N}_{E,7} \quad (23)$$

Laut der Aufgabe soll der aus dem System strömende Stoffmengenstrom des Eduktes E minimiert werden. Daraus folgt:

$$\dot{N}_{E,7} = c_{E,4} \dot{V}_1 + c_{E,6} \dot{V}_5 \quad (24)$$

Mit $c_{E,0} = c_{E,1} = c_{E,5}$ resultiert die Zielfunktion:

$$Z^* = \frac{c_{E,0}}{(1 + k \tau_B)^3} \dot{V}_1 + \frac{c_{E,0}}{1 + k \tau_C} \dot{V}_5 \quad (25)$$

Die Konzentration im Eduktstrom $c_{E,0}$ lässt sich kürzen, da dieser Wert eine positive Konstante ist. Der Wert dieser Konstante hat also keinen Einfluss auf die Lösung des Problems, wobei eine optimale Stromaufteilung gesucht wird.

$$Z = \frac{1}{(1+k\tau_B)^3} \dot{V}_1 + \frac{1}{1+k\tau_C} \dot{V}_5 \quad (26)$$

oder nach Einsatz von beiden Verweilzeiten:

$$Z = \frac{\dot{V}_1}{\left(1+k\frac{V_{R,B}}{\dot{V}_1}\right)^3} + \frac{\dot{V}_5}{1+k\frac{V_{R,C}}{\dot{V}_5}} \quad (27)$$

Die Lösung muss die Gleichungsbedingung für die Volumenströme erfüllen:

$$0 = \dot{V}_0 - \dot{V}_1 - \dot{V}_5 \quad (28)$$

Zusätzlich gelten:

$$\dot{V}_1 \geq 0 \quad (29)$$

$$\dot{V}_5 \geq 0 \quad (30)$$

Also das Optimierungsproblem ist zweidimensional mit folgenden unabhängigen Variablen: \dot{V}_1 und \dot{V}_5 . Andere Variablen sind die vorgegebenen Konstanten.

Lösung des Optimierungsproblems

Da es sich um ein Optimierungsproblem mit Nebenbedingungen in Gleichungsform handelt und beide unabhängigen Variablen größer oder gleich null sind, kann die Methode der Lagrangeschen Multiplikatoren angewandt werden, um eine unbeschränkte Problemformulierung zu gewinnen.

$$L = \frac{\dot{V}_1}{\left(1+k\frac{V_{R,B}}{\dot{V}_1}\right)^3} + \frac{\dot{V}_5}{1+k\frac{V_{R,C}}{\dot{V}_5}} + \lambda (\dot{V}_0 - \dot{V}_1 - \dot{V}_5) \quad (31)$$

Durch Anwendung der Quotientenregel $\left(\frac{u}{v}\right)' = \frac{u'v - uv'}{v^2}$ erhält man die notwendigen Bedingungen für ein Optimum. Dafür finden wir partielle Ableitungen der Lagrangeschen Funktion nach jeder unabhängigen Variable.

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{V}_1} = 0 = \frac{1}{\left(1+k\frac{V_{R,B}}{\dot{V}_1}\right)^3} + \frac{3k\frac{V_{R,B}}{\dot{V}_1}}{\left(1+k\frac{V_{R,B}}{\dot{V}_1}\right)^4} - \lambda \quad (32)$$

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{V}_5} = 0 = \frac{1}{1+k\frac{V_{R,C}}{\dot{V}_5}} + \frac{k\frac{V_{R,C}}{\dot{V}_5}}{\left(1+k\frac{V_{R,C}}{\dot{V}_5}\right)^2} - \lambda \quad (33)$$

$$\frac{\partial L}{\partial \lambda} = 0 = \dot{V}_0 - \dot{V}_1 - \dot{V}_5 \quad (34)$$

Durch Umstellen der Gleichungen 32 und 33 nach λ erhält man:

$$0 = \frac{1 + 4 k \frac{V_{R,B}}{\dot{V}_1}}{\left(1 + k \frac{V_{R,B}}{\dot{V}_1}\right)^4} - \frac{1 + 2 k \frac{V_{R,C}}{\dot{V}_5}}{\left(1 + k \frac{V_{R,C}}{\dot{V}_5}\right)^2} \quad (35)$$

Nun ist noch Gl. 34 nach \dot{V}_5 aufzulösen und einzusetzen:

$$0 = \frac{1 + 4 k \frac{V_{R,B}}{\dot{V}_1}}{\left(1 + k \frac{V_{R,B}}{\dot{V}_1}\right)^4} - \frac{1 + 2 k \frac{V_{R,C}}{\dot{V}_0 - \dot{V}_1}}{\left(1 + k \frac{V_{R,C}}{\dot{V}_0 - \dot{V}_1}\right)^2} \quad (36)$$

Jetzt beinhaltet die Gleichung nur eine Variable und die Lösung kann anhand eines numerischen oder analytischen Lösungsverfahrens problemlos gefunden werden. Sobald der optimale Wert für \dot{V}_1 gefunden ist, setzt man diesen in Gleichung 27 ein, um \dot{V}_5 zu finden.

Numerisches Lösen mit Hilfe des Einsetzverfahrens

Auflösen zur Lösung nach dem Einsetzverfahren

$$0 = \frac{\sqrt{1 + 4 k \frac{V_{R,B}}{\dot{V}_1}}}{\left(1 + k \frac{V_{R,B}}{\dot{V}_1}\right)^2} - \frac{\sqrt{1 + 2 k \frac{V_{R,C}}{\dot{V}_0 - \dot{V}_1}}}{1 + k \frac{V_{R,C}}{\dot{V}_0 - \dot{V}_1}} \quad (37)$$

Mit

$$K_1 = \frac{\sqrt{1 + 4 k \frac{V_{R,B}}{\dot{V}_1}}}{\left(1 + k \frac{V_{R,B}}{\dot{V}_1}\right)^2} \quad K_2 = \sqrt{1 + 2 k \frac{V_{R,C}}{\dot{V}_0 - \dot{V}_1}}$$

ergibt sich:

$$0 = K_1 - \frac{K_2}{1 + k \frac{V_{R,C}}{\dot{V}_0 - \dot{V}_1}} \quad (38)$$

$$0 = \frac{1}{K_1} - \frac{1 + k \frac{V_{R,C}}{\dot{V}_0 - \dot{V}_1}}{K_2} \quad (39)$$

$$1 + \frac{k V_{R,C}}{\dot{V}_0 - \dot{V}_1} = \frac{K_2}{K_1} \quad (40)$$

$$\frac{\dot{V}_0 - \dot{V}_1}{k V_{R,C}} = \frac{1}{\frac{K_2}{K_1} - 1} \quad (41)$$

$$\dot{V}_1 = \dot{V}_0 - \frac{k V_{R,C}}{\frac{K_2}{K_1} - 1} \quad (42)$$

Es folgt die Scheinauflösung:

$$\dot{V}_1 = \dot{V}_0 - \frac{k V_{R,C}}{\left(1 + k \frac{V_{R,B}}{\dot{V}_1}\right)^2 \sqrt{\frac{1 + 2 k \frac{V_{R,C}}{\dot{V}_0 - \dot{V}_1}}{1 + 4 k \frac{V_{R,B}}{\dot{V}_1}} - 1}} \quad (43)$$

Aus ihr lässt sich die Iterationsvorschrift für das Einsetzverfahren ermitteln:

$$\dot{V}_{1,i+1} = \dot{V}_0 - \frac{k V_{R,C}}{\left(1 + k \frac{V_{R,B}}{\dot{V}_{1,i}}\right)^2 \sqrt{\frac{1 + 2 k \frac{V_{R,C}}{\dot{V}_0 - \dot{V}_{1,i}}}{1 + 4 k \frac{V_{R,B}}{\dot{V}_{1,i}}} - 1}} \quad \text{bis } \varepsilon > \left| \dot{V}_{1,i+1} - \dot{V}_{1,i} \right| \quad (44)$$

Während der Iteration ist die Abbruchgenauigkeit ε zu berücksichtigen.

Tab. 1: Iterationsschritte bei Einsetzverfahren mit $V_{1,0} = 3,5$ und Abbruchschranke $\varepsilon = 0,0005$

i	1	2	3	4	5	6
$\dot{V}_{1,i}$	3,5	2,9676	2,5641	2,4106	2,3829	2,3797
$\dot{V}_{1,i+1}$	2,9676	2,5641	2,4106	2,3829	2,3797	2,3794

Numerisches Lösen mit Hilfe des newton-Verfahrens

Aus Gleichung 36 resultiert die Abweichung φ von der Lösung der Gleichung:

$$\varphi = \frac{1 + 4 k \frac{V_{R,B}}{\dot{V}_1}}{\left(1 + k \frac{V_{R,B}}{\dot{V}_1}\right)^4} - \frac{1 + 2 k \frac{V_{R,C}}{\dot{V}_0 - \dot{V}_1}}{\left(1 + k \frac{V_{R,C}}{\dot{V}_0 - \dot{V}_1}\right)^2} \quad (45)$$

Zur Lösung nach dem newton-Verfahren wird zusätzlich die Ableitung von φ benötigt:

$$\frac{d\varphi}{d\dot{V}_1} = \frac{12 \left(k \frac{V_{R,B}}{\dot{V}_1}\right)^2}{\dot{V}_1 \left(1 + k \frac{V_{R,B}}{\dot{V}_1}\right)^5} + \frac{2 \left(k \frac{V_{R,C}}{\dot{V}_0 - \dot{V}_1}\right)^2}{\left(\dot{V}_0 - \dot{V}_1\right) \left(1 + k \frac{V_{R,C}}{\dot{V}_0 - \dot{V}_1}\right)^3} \quad (46)$$

Es folgt die Iterationsvorschrift nach dem newton-Verfahren:

$$\dot{V}_{1,i+1} = \dot{V}_{1,i} - \frac{\varphi(\dot{V}_{1,i})}{\varphi'(\dot{V}_{1,i})} \quad \text{bis } \varepsilon > \left| \dot{V}_{1,i+1} - \dot{V}_{1,i} \right| \quad (47)$$

Tab. 2: Iterationsschritte bei newton-Verfahren mit $V_{1,0} = 3,5$ und Abbruchschranke $\varepsilon = 0,0005$

i	1	2	3
$\dot{V}_{1,i}$	3,5	2,4686	2,3795
$\dot{V}_{1,i+1}$	2,4686	2,3795	2,3793

Ergebnis der numerischen Berechnung mit ausreichender Genauigkeit

Das Ergebnis des Optimierungsproblems lautet:

$$\begin{aligned}\dot{V}_{1,\text{opt}} &= 2,3793 \text{ m}^3 \text{ h}^{-1} \\ \dot{V}_{5,\text{opt}} &= 1,6207 \text{ m}^3 \text{ h}^{-1} \\ Z &= 0,7263\end{aligned}$$