

**TECHNISCHE UNIVERSITÄT DRESDEN**  
**Institut für Verfahrenstechnik & Umwelttechnik**  
**Professur Verfahrensautomatisierung**

# **SYSTEMVERFAHRENSTECHNIK**

Arbeitsblätter zur Vorlesung

Übungsaufgaben

## 1. Einführung

### 1.1. Inhalte der Systemverfahrenstechnik

Die verfahrenstechnischen Teildisziplinen (Mechanische, Thermische und Chemische Verfahrenstechnik) haben jeweils spezifische Prozesseinheiten mit definierten Eigenschaften zum Gegenstand. Die Systemverfahrenstechnik ist die Teildisziplin der Verfahrenstechnik, die sich mit der Analyse und der Synthese von Schaltungen unterschiedlicher Prozesseinheiten befasst. Die Zielstellung einer industriell durchzuführenden Stoffwandlung, aus bestimmten Ausgangsstoffen gewisse Produkte zu gewinnen, macht diese Verbindung funktionell unterschiedlicher Prozesseinheiten im allgemeinen erforderlich.

Im Folgenden stehen nicht die einzelnen Prozesseinheiten im Mittelpunkt der Betrachtungen, sondern die durch die Kopplungen dieser Prozesseinheiten sich ergebenden neuen Eigenschaften, also sogenannte „Systemeffekte“. Die Funktion einer Schaltung von Prozesseinheiten ist nur dann zu verstehen bzw. vorherzusagen, wenn man sowohl die Funktionen der einzelnen Elemente kennt als auch den Charakter der Kopplung (die Struktur) der Prozesseinheiten berücksichtigt.

Aufbauend auf den Theorien und Modellen für einzelne Prozesseinheiten werden in der Systemverfahrenstechnik Konstrukte von Prozesseinheiten untersucht; in diesem Zusammenhang ist es gerechtfertigt für diese Konstrukte den Begriff „verfahrenstechnisches System“ einzuführen (eine präzise Definition folgt im Abschnitt 1.2.). Die gegenüber den anderen verfahrenstechnischen Teildisziplinen in der Systemverfahrenstechnik neu zu berücksichtigende Kategorie ist die „Struktur“ des Systems der Prozesseinheiten, das eine qualitativ neue Gesamtfunktion realisiert.

Damit ergeben sich für die Systemverfahrenstechnik spezifische Inhalte bzw. Problemfelder, die wie folgt zusammenfassend dargestellt werden können:

- ❑ Analyse des statischen und des dynamischen Verhaltens verfahrenstechnischer Systeme. Grundlage dafür sind Methoden der Modellbildung und der Simulation.
- ❑ Bewertung unterschiedlicher Verhaltensweisen eines verfahrenstechnischen Systems durch geeignete Bewertungsfunktionen. Die zu bewertenden Verhaltensweisen stellen dabei unterschiedliche Formen der Stoff- und Energiewandlung dar.
- ❑ Modellierung und Bewertung des Ausfallverhaltens bzw. der Zuverlässigkeit verfahrenstechnischer Systeme.
- ❑ Optimierung verfahrenstechnischer Systeme; dieses Problem ist unter verschiedenen Zielstellungen zu betrachten:
  - Optimale Auslegung der Prozesseinheiten unter Berücksichtigung eines globalen Zielkriteriums (Problem der optimalen Auslegung).
  - Optimale Festlegung der Arbeitspunkte der Prozesseinheiten unter Berücksichtigung eines globalen Zielkriteriums (Problem der Arbeitspunkt-Optimierung).
  - Bestimmung der optimalen Steuerungen der Prozesseinheiten unter den Rahmenbedingungen der konkreten Kopplungen (Problem der optimalen Steuerung)
  - Bestimmung der optimalen Struktur des Systems (Struktursynthese-Problem).Diese Teilziele können auch kombiniert Berücksichtigung finden.

Das Methodenspektrum der Systemverfahrenstechnik orientiert sich an diesen Problemfeldern, wobei die einzelnen Problemfelder nach wie vor Gegenstände methodenorientierter Forschung

sind. Wenn ein Problem mit systemverfahrenstechnischen Methoden gelöst werden soll, ist darum so wie in allen anderen Ingenieurwissenschaften auch zunächst zu klären, ob es eine Lösungsmethode überhaupt gibt und, wenn das der Fall ist, ob die Voraussetzungen der Methode im konkreten Fall auch erfüllt sind.

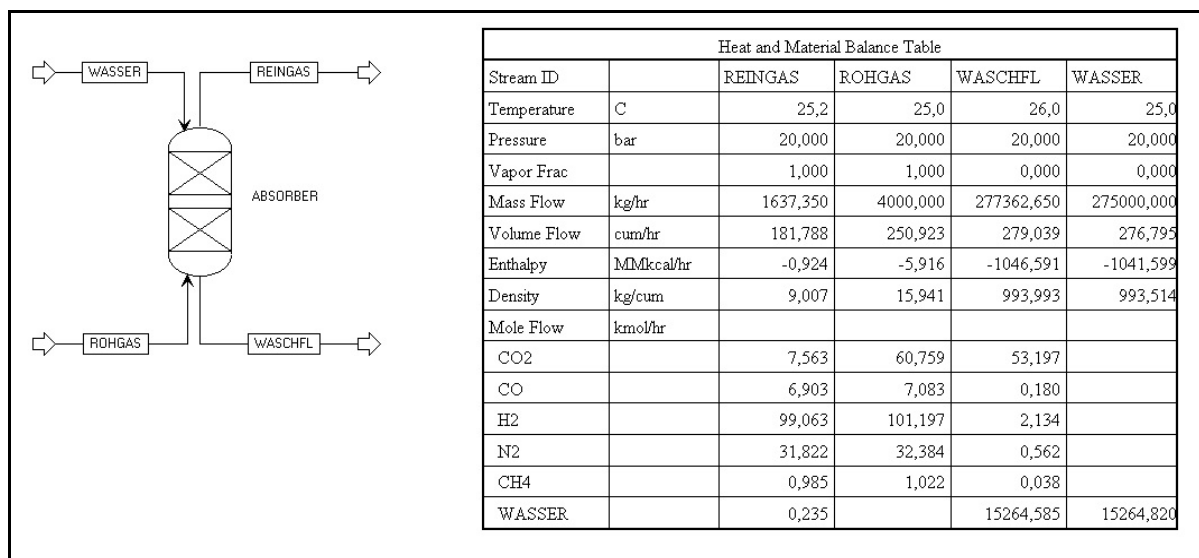
In der Lehrveranstaltung „Systemverfahrenstechnik“ werden die nachfolgend genannten Problemfelder behandelt:

- Simulation des statischen und des dynamischen Verhaltens verfahrenstechnischer Systeme;
- Bewertung verfahrenstechnischer Systeme durch Kostenmodelle;
- Optimale Bestimmung des stationären Arbeitspunktes eines verfahrenstechnischen Systems unter Berücksichtigung ausgewählter Grundschaltungen.

#### ◆ Beispiel

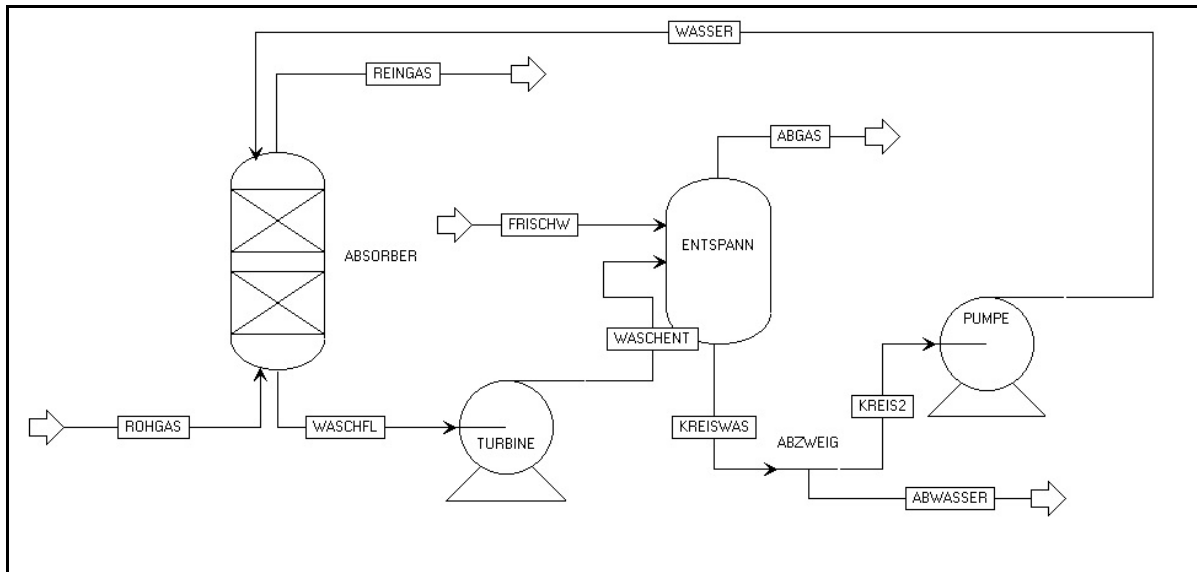
Im folgenden einführenden Beispiel sollen typische systemverfahrenstechnische Problemstellungen aufgezeigt werden (ohne hier bereits auf die Lösungswege näher einzugehen!).

Aus einem Synthesegas soll die Komponente  $\text{CO}_2$  ausgewaschen werden. Für die Realisierung des Absorptionsprozesses wird eine Füllkörperkolonne eingesetzt.



Die Kolonne wird beschrieben durch eine Reihe von Auslegungsdaten. Hierzu gehören Anzahl und Höhe der Übertragungseinheit, Art und Füllmenge der Füllkörper usw. Die Auslegung der Kolonne erfolgt mit den in der Thermischen Verfahrenstechnik entwickelten Methoden. Im Bild sind die mit einer definierten Kolonne sich ergebenden Ströme und Zusammensetzungen (Berechnet mit dem Programm ASPEN PLUS) angegeben.

Die Absorptionskolonne wird nun aber nicht isoliert betrieben, sondern ist Teil eines Verfahrens. Aus Gründen der Wirtschaftlichkeit wird man die Waschflüssigkeit im Kreislauf nutzen. Die Kolonne arbeitet unter erhöhtem Druck; in einem Entspannungsturm wird das  $\text{CO}_2$  von der Waschflüssigkeit getrennt, so dass die Waschflüssigkeit erneut genutzt werden kann.



Für die dargestellte Verfahrensstufe ergeben sich neue Problemstellungen, die über die mit der Auslegung der Prozesseinheiten verbundenen hinausgehen. Es seien in Auswahl folgende genannt:

- Welcher stationäre Arbeitspunkt stellt sich unter bestimmten äußeren Bedingungen ein; welche Werte nehmen die „Komponenten der Stromvektoren“ an?
- Welche Waschmittelmenge ist im Kreislauf einzusetzen, damit sich die gewünschte Reinheit des Gases einstellt?
- Welche Waschmittelmenge muss zugesetzt werden, damit die Verluste gedeckt werden?
- Welche Waschmittelmenge ist abzuziehen, um Anreicherungseffekte im Kreislauf zu vermeiden?

In der folgenden Tabelle sind die Ergebnisse zu finden (wiederum berechnet mit ASPEN PLUS), auf deren Grundlage diese Problemstellungen sich lösen lassen:

Heat and Material Balance Table											
Stream ID		ABGAS	ABWASSER	FRISCHW	KREIS2	KREISWAS	REINGAS	ROHGAS	WASCHENT	WASCHFL	WASSER
Temperature	C	25,0	25,0	15,0	25,0	25,0	25,5	25,0	24,9	24,2	25,5
Pressure	bar	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	20,000	20,000	1,000	20,000	20,000
Vapor Frac		1,000	0,000	0,000	0,000	0,000	1,000	1,000	0,003	0,000	0,000
Mass Flow	kg/hr	2424,538	1000,000	1033,779	403771,427	404771,427	1412,570	4000,000	404142,387	404142,387	403771,427
Volume Flow	cum/hr	1483,041	1,004	1,031	404,298	407,304	179,498	250,923	1888,998	408,811	404,494
Enthalpy	MMkcal/hr	-5,138	-3,784	-3,923	-1528,519	-1532,304	-0,898	-5,914	-1533,531	-1533,345	-1528,334
Density	kg/cum	1,635	993,781	1003,104	993,781	993,781	8,974	15,941	215,015	993,521	993,303
Mole Flow	kmol/hr										
CO2		33,409	0,030		12,040	12,090	7,320	40,739	43,499	43,499	12,040
CO		0,279	trace		0,002	0,002	4,804	7,083	0,281	0,281	0,002
H2		3,312	< 0,001		0,017	0,017	97,883	101,197	3,329	3,329	0,017
N2		0,872	trace		0,004	0,004	31,513	32,384	0,875	0,875	0,004
CH4		0,038	trace		0,001	0,001	0,944	1,022	0,039	0,039	0,001
WASSER		1,894	55,435	57,383	22383,259	22438,495	0,237		22383,207	22383,207	22383,255

- ◆ Zusammenfassend kann die folgende Definition gegeben werden:

SYSTEMVERFAHRENSTECHNIK...  
 ... ist die Teildisziplin der Verfahrenstechnik, die

- den Entwurf,
- den Betrieb,
- die Analyse des statischen und dynamischen Verhaltens,
- die wirtschaftliche Energieanwendung und den wirtschaftlichen Rohstoffeinsatz,
- die Automatisierung

der Verfahren der Stoffwandlung zum Inhalt hat. Ihr Gegenstand ist das verfahrenstechnische System auf allen Hierarchieebenen.

## 1.2. Das verfahrenstechnische System

### 1.2.1. Der kybernetische Systembegriff

Das *verfahrenstechnische System* ist der Gegenstand der Systemverfahrenstechnik. Ausgangspunkt für die Einführung dieses Begriffs ist der abstrakte Systembegriff der Kybernetik, der in einem zweiten Schritt für die Belange der Systeme der Stoffwandlung zu spezifizieren ist.

Ein System im kybernetischen Sinne ist als Menge definiert:

$$\mathbf{S} = ( \mathbf{E} , \mathbf{\Sigma} ) \quad (1.1)$$

Dabei bezeichnen:

$\mathbf{E}$  Menge der Elemente des Systems

$\mathbf{\Sigma}$  Menge der Relationen zwischen den Elementen - Struktur des Systems

Die Elemente des Systems sind in der Lage, auf gewisse Eingangsgrößen mit bestimmten Ausgangsgrößen zu reagieren; die Elemente besitzen also definierte *Funktionen*. Für das System kann der Funktionsbegriff übertragen werden: Das System reagiert auf die Systemeingangsgrößen mit bestimmten Systemausgangsgrößen; die konkrete Art der Reaktion wird durch die *Systemfunktion* bestimmt. Es ergibt sich aus der Beziehung (1.1), dass die Systemfunktion sowohl von den Funktionen der einzelnen Elemente als auch von der Struktur bestimmt wird.

Ein System ist stets von einer *Umgebung* abzugrenzen. Aus der Umgebung wirken die Systemeingangsgrößen auf das System ein, in die Umgebung wirken die Systemausgangsgrößen zurück.

Die Elemente eines Systems lassen sich i. a. je nach Betrachtungsebene zu Teilsystemen zusammenfassen oder als Teilsysteme interpretieren und entsprechend weiter zerlegen. Diese

*Aggregation* bzw. *Dekomposition* der Elemente kann man nutzen, um Systeme je nach Problemstellung angepasst zu strukturieren (s. Abschnitt 1.2.3.)

### 1.2.2. Spezifikation des Systembegriffs für Systeme der Stoffwandlung

Der allgemeine, kybernetische Systembegriff ist nun auf die Verfahren der Stoffwandlung anzuwenden. Es ergeben sich die in der folgenden Tabelle angegebenen Korrespondenzen:

Kybernetischer Systembegriff	Verfahrenstechnisches System
Elemente	Prozesse - der Stoff- und Energiewandlung - des Stoff- und Energietransportes - der Stoff- und Energiespeicherung
Struktur (Relationen zwischen den Elementen)	Stoff- und Energieströme zwischen den Elementen
Systemfunktion	Realisierung komplexer industrieller Stoff- und Energiewandlungsprozesse
Systemumgebung	Im <i>engeren</i> Sinne: - das Unternehmen Im <i>erweiterten</i> Sinne: - die Wirtschaft - die Umwelt

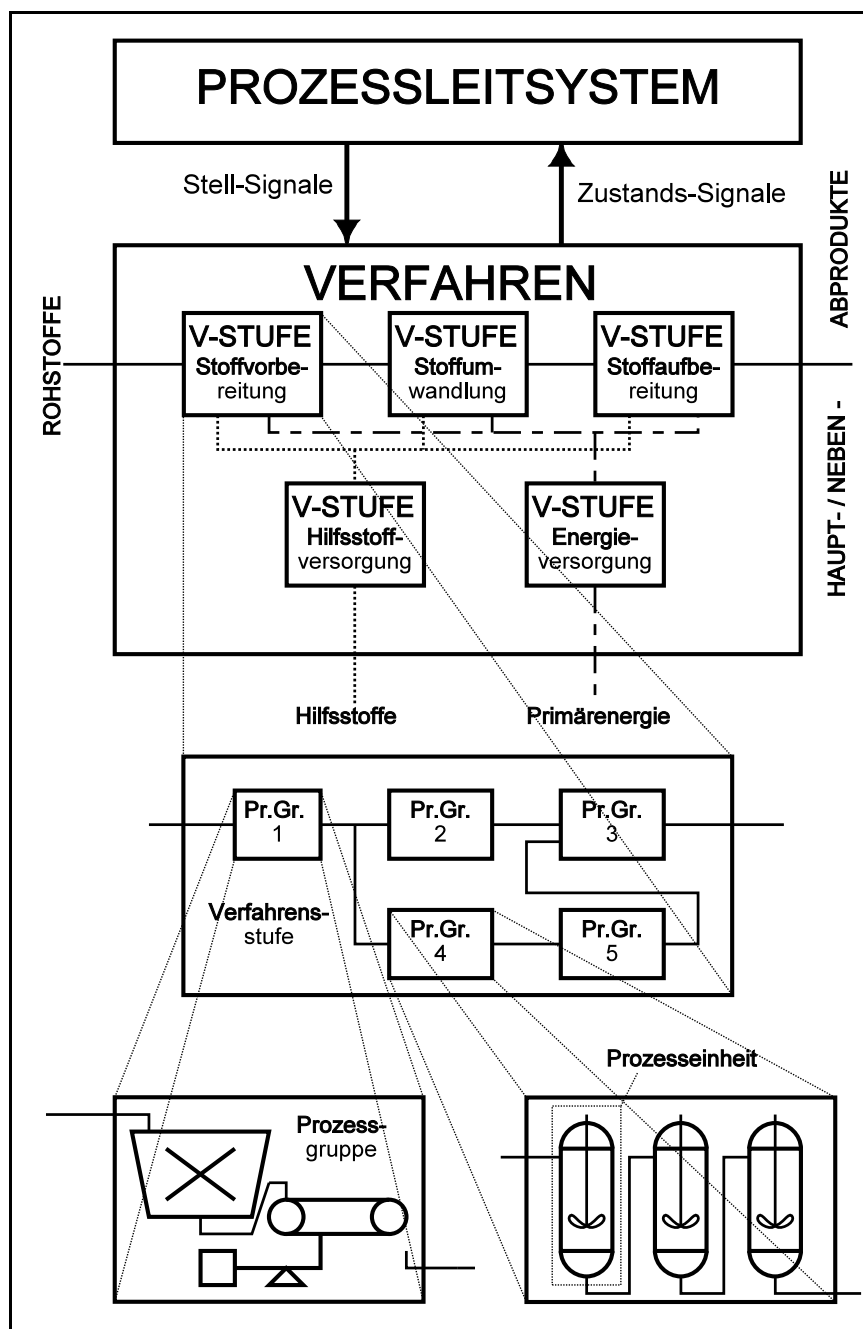
### 1.2.3. Hierarchieebenen verfahrenstechnischer Systeme

Für Analyse und Synthese verfahrenstechnischer Systeme sind unterschiedliche Betrachtungsebenen von Bedeutung, die sich durch Aggregation bzw. Dekomposition ergeben. Damit lassen sich die Betrachtungsebenen in eine hierarchische Ordnung bringen; die jeweils übergeordnete Ebene entsteht durch Aggregation von Elementen der aktuellen Ebene zu Teilsystemen, die jeweils untergeordnete entsteht durch Dekomposition der Elemente der aktuellen Ebene. Im abschließenden Bild sind die Beziehungen zwischen den Ebenen dargestellt.

Es haben sich die folgenden *Betrachtungsebenen* als nützlich erwiesen:

- Prozesseinheit** Realisiert einen Grundprozess. Aus der Sicht der Systemverfahrenstechnik ist die Prozesseinheit die kleinste Einheit eines verfahrenstechnischen Systems. Aus der Sicht der Prozessverfahrenstechnik lässt sich eine Prozesseinheit in Elementarprozesse weiter zerlegen.
  
- Prozessgruppe** Kopplung von Prozesseinheiten auf einem Niveau geringer Komplexität (etwa 5..10 Prozesseinheiten). Die Prozesseinheiten einer Prozessgruppe sind funktionell gleichartig oder erfüllen in ihrer Kopplung eine überschaubare, abgegrenzte Funktion.

- **Verfahrensstufe** Die Verfahrensstufe realisiert eine typische, komplexe Stoffumwandlung im Rahmen eines Verfahrens. Es werden folgende charakteristische Grundtypen unterschieden:
- Vorbereitung der Stoffumwandlung,
  - Stoffumwandlung,
  - Aufbereitung der Reaktionsprodukte,
  - Energieversorgung,
  - Hilfsstoffversorgung,
- **Verfahren** Umfaßt alle Verfahrensstufen für die Erzeugung einer Produktgruppe aus bestimmten Rohstoffen.



### 1.3. Eigenschaften der Elemente verfahrenstechnischer Systeme

Die im Folgenden diskutierten Eigenschaften der Systemelemente sind an den Belangen der systemverfahrenstechnischen Methoden orientiert; aus prozessverfahrenstechnischer Sicht würden sich andere charakteristische Eigenschaften als relevant erweisen.

#### □ *Anzahl der Eingangs- bzw. der Ausgangsströme*

Diese formale Eigenschaft ist vor allem aus der Sicht der Simulation des Systemverhaltens von Interesse. Die für systemverfahrenstechnische Simulationsuntersuchungen eingesetzten Werkzeuge stellen Modellbibliotheken bereit. Die einzelnen Modelle der Bibliothek müssen in ein Fließschema eingebunden werden. Jedes Modell besitzt eine charakteristische Anzahl an „Ports“, über die es mit anderen Elementen oder mit der Umgebung verbunden werden muss. Jedem Port ist ein Ein- bzw. Ausgangsstrom zugeordnet, so dass hier die Portanzahl mit der Summe der Ein- und Ausgangsströme zusammenfällt.

#### □ *Form des mathematischen Modells für den Zusammenhang zwischen Ein- und Ausgangsgrößen*

Da systemverfahrenstechnische Berechnungsmethoden stets den Einsatz mathematischer Modelle erforderlich machen, sind deren Formen von besonderem Interesse. In der folgenden Tabelle sind die Modellformen in Abhängigkeit von den Eigenschaften der Zustandsgrößen dargestellt:

	Ortsabhängigkeit der Zustandsgrößen	
Zeitabhängigkeit der Zustandsgrößen	Verteiltes Verhalten (Ortsabhängige Größen)	Konzentriertes Verhalten (Keine Ortsabhängigkeit)
Statisches Verhalten	Partielle Differentialgleichungen (Randwertprobleme)	Algebraische Gleichungen
Dynamisches Verhalten	Partielle Differentialgleichungen (Anfangs- und Randwertprobleme)	Gewöhnliche Differentialgleichungen (Anfangswertprobleme)

(Siehe hierzu auch die Unterlagen zum Fach *Prozessanalyse und Versuchsplanung*.)

#### □ *Zeitverhalten*

Es ist zunächst zwischen *stationärem* Verhalten und *instationärem* Verhalten zu unterscheiden. Systemverfahrenstechnische Untersuchungen für kontinuierlich produzierende Systeme gehen in der Regel vom stationären Verhalten aus. Werden aber die An- und Abfahrprozesse betrachtet oder werden Elemente diskontinuierlich betrieben, so ist das instationäre Verhalten von Interesse. Diese Eigenschaft steht in sehr engem Zusammenhang zur oben genannten Form des mathematischen Modells.

#### □ *Prozesstechnische Funktion*

Diese Eigenschaft ist für die Systematik von Modellbibliotheken in Simulationsprogrammen von Interesse. Dabei verwenden die Entwickler von Simulationswerkzeugen unterschiedliche Ansätze für die Klassifikation der Elemente nach ihrer prozesstechnischen Funktion.

## 1.4. Grundsaltungen in verfahrenstechnischen Systemen

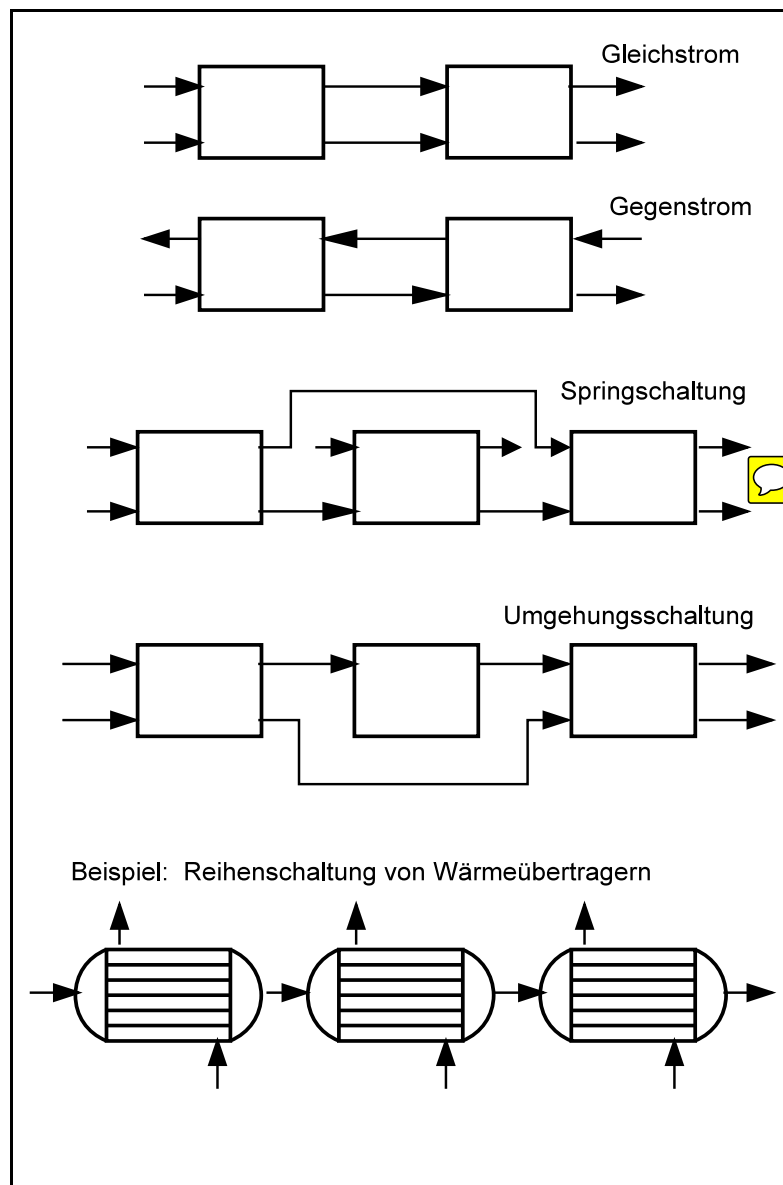
Trotz der erkennbaren strukturellen Vielfalt verfahrenstechnischer Systeme lassen sich gewisse Grundtypen von wiederkehrenden Kopplungstypen auffinden, die im Folgenden als Grundsaltungen bezeichnet werden. Die Grundsaltungen sind auf jeder Hierarchieebene zu finden.

### 1.4.1. Reihenschaltung

Dieser Grundsaltungstyp ist dann anzutreffen, wenn

- sich die Bedingungen für die Stoff- und Energiewandlungsprozesse mit dem Prozessfortschritt verändern müssen,
- das Prozessziel nicht in einer einzigen Stufe zu erreichen ist,
- die mehrstufige Prozessführung gegenüber der einstufigen wirtschaftlicher ist.

Es sind die folgenden *Formen von Reihenschaltungen* zu unterscheiden:



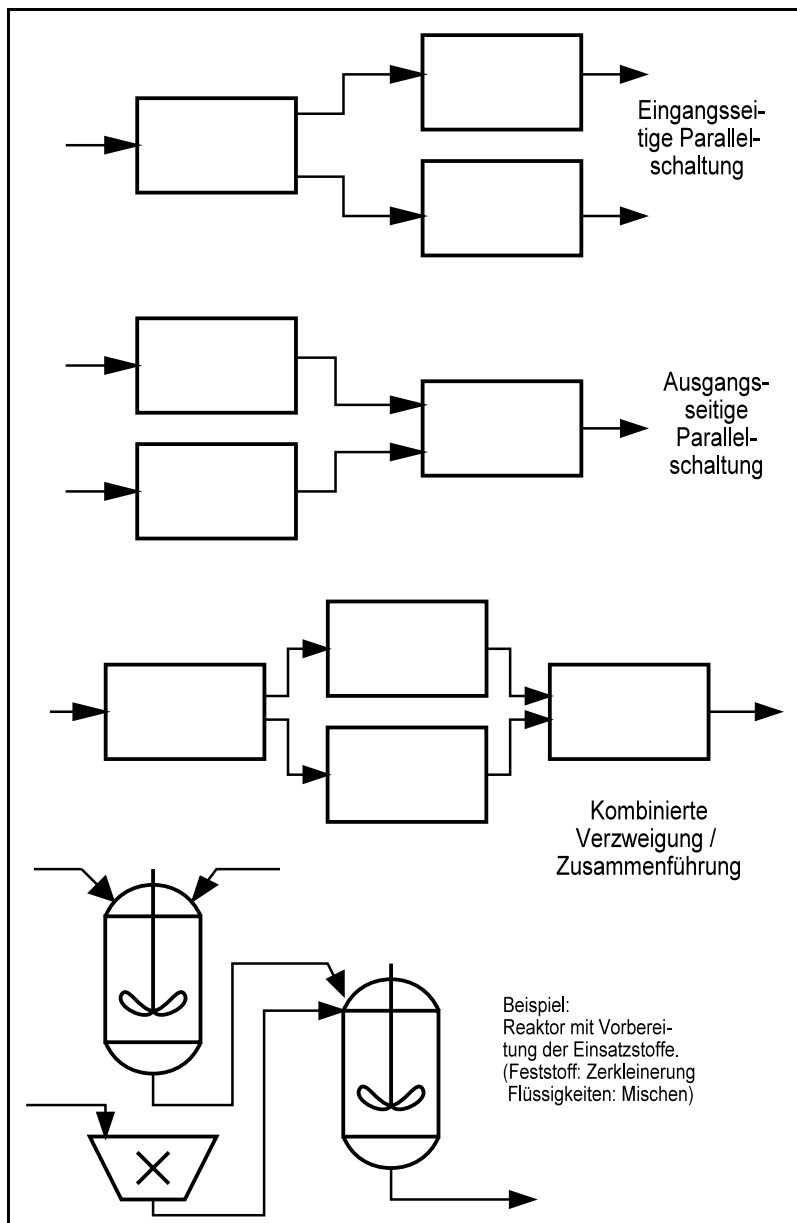
### 1.4.2. Parallelschaltung

Für diese Grundsaltung sind zunächst bezüglich der Ausführung zwei Fälle zu unterscheiden:

- Parallelschaltung funktionell gleichartiger Elemente (homogene Parallelschaltung),
- Parallelschaltung funktionell unterschiedlicher Elemente (heterogene Parallelschaltung).

Die *homogene Parallelschaltung* ist für die Hierarchieebenen Prozesseinheit und Prozessgruppe charakteristisch. Auf diesen Ebenen sind Parallelschaltungen für folgende Funktionen anzutreffen:

- Schaffung von Leistungsreserven in einem System; ein Strang kann die geforderte Leistung nicht erbringen.
- Einführung mehrerer paralleler Elemente oder Prozessgruppen, die bedarfsgerecht zu- bzw. abgeschaltet werden können (wahlweiser Teillast-/ Volllastbetrieb).
- Kontinuierliche Führung der Prozessgruppe bei diskontinuierlicher Führung der Prozesseinheiten.
- Erhöhung der Verfügbarkeit der Prozessgruppe durch redundante Elemente.



Die *heterogene Parallelschaltung* findet sich eher in den Hierarchieebenen Verfahrensstufe und Verfahren. Folgende Funktionen sind dafür charakteristisch:

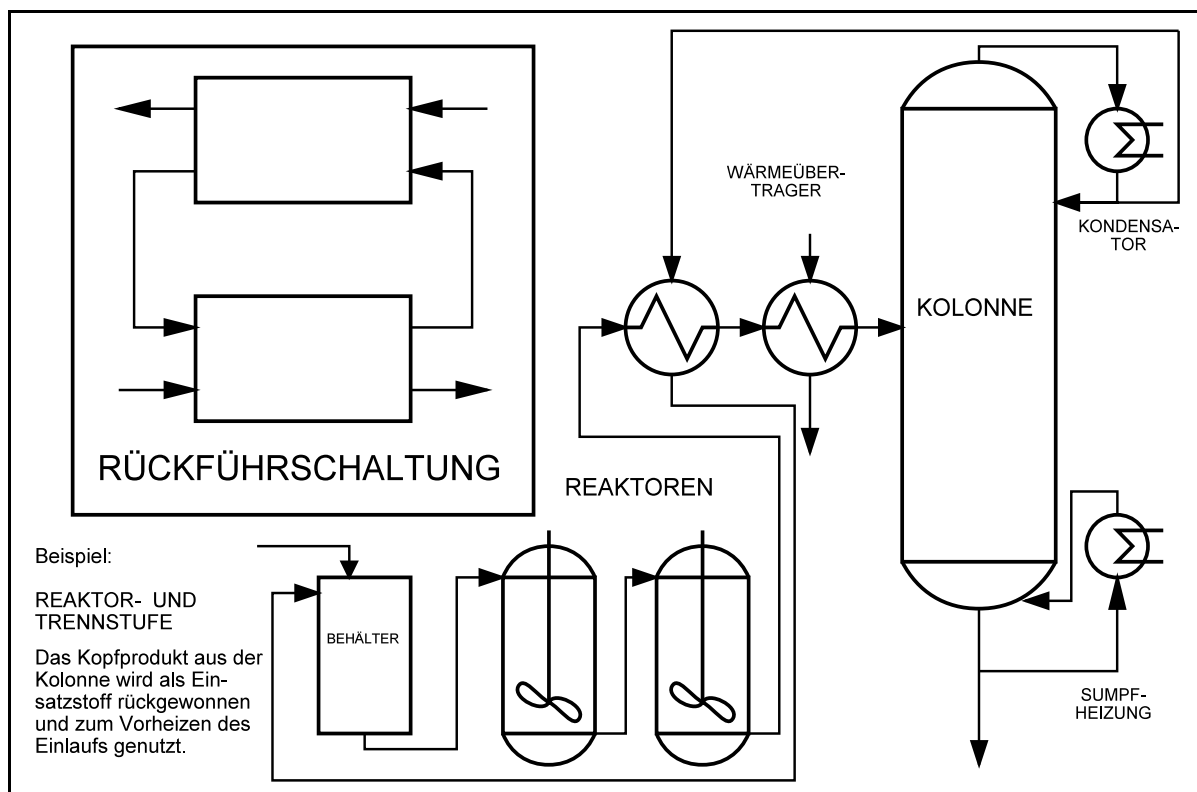
- Herstellung mehrerer Zwischen- oder Endprodukte aus einem gemeinsamen Rohstoff (Eingangsseitige Parallelschaltung).
- Getrennte Vorbereitung der Ausgangsstoffe für eine Stoffumwandlung (Ausgangsseitige Parallelschaltung).

Im nebenstehenden Bild sind die strukturellen Sonderfälle der Parallelschaltung dargestellt.

### 1.4.3. Rückführschaltung

Rückführschaltungen sind immer dann in verfahrenstechnischen Systemen anzutreffen, wenn stoffliche und/oder energetische Regeneration sich als wirtschaftlich effizient erweist. So werden i. a. die nicht umgesetzten Reaktionspartner nach der Trennung von den Reaktionsprodukten dem Reaktionsprozess wieder zugeführt; heiße Prozessströme werden zum Vorwärmen der kalten Ströme genutzt.

Im folgenden Bild ist neben der Prinzipstruktur einer Rückführschaltung auch ein Beispiel zu finden.



### 1.5. Klassifikation verfahrenstechnischer Systeme

Die im Abschnitt 1.4. beschriebenen Grundstrukturen kann man heranziehen, um verfahrenstechnische Systeme strukturell zu klassifizieren. Im Folgenden wird diese strukturelle Klassifikation von besonderem Interesse sein. Daneben sind noch weitere klassifikatorische Merkmale denkbar, die in anderen Zusammenhängen an Bedeutung gewinnen können. Die wichtigsten seien im Folgenden kurz dargestellt:

#### □ *Klassifikation nach der Funktion*

Unter funktionellem Aspekt lassen sich folgende Grundtypen verfahrenstechnischer Systeme unterscheiden:

- Systeme zur Stoffwandlung: Die Systemfunktion besteht überwiegend in der Veränderung der Eigenschaften eines Stoffsystems durch physikalische, chemische, biologische Operationen.

- Unterstützende Systeme: Die Systemfunktion besteht überwiegend in der Bereitstellung und Aufbereitung von Hilfsstoffen.
- Systeme der Energieversorgung: Die Systemfunktion besteht überwiegend in der Bereitstellung der notwendigen Energieströme.
- Informationssysteme: Die Systemfunktion besteht überwiegend in der Erfassung, Übertragung, Speicherung und Verarbeitung von Information. Diese Funktionen werden üblicherweise durch Prozessleitsysteme realisiert.

Die Systeme zur Stoffwandlung lassen sich noch weitergehend dadurch klassifizieren, dass man gewisse dominante Grundoperationen hervorhebt (in diesem Sinne lassen sich dann Systeme der Stofftrennung, Stoffvereinigung, Wärmeübertragung usw. einführen).

□ *Klassifikation nach dem zeitlichen Verhalten der Produktströme*

Bezüglich des zeitlichen Verhaltens der Produktströme lassen sich drei Systemklassen definieren:

- Kontinuierlich arbeitende Systeme,
- Diskontinuierlich arbeitende Systeme,
- Quasikontinuierlich arbeitende Systeme.

Im Falle des kontinuierlich arbeitenden Systems sind die die Produktströme kennzeichnenden Zustandsgrößen zeitlich konstant (abgesehen von den unvermeidlichen zufälligen Störungen). Im Falle des diskontinuierlich arbeitenden Systems durchlaufen dagegen die die Produktströme kennzeichnenden Zustandsgrößen Veränderungen in der Zeit (in der Regel existieren gewisse Produktionszyklen).

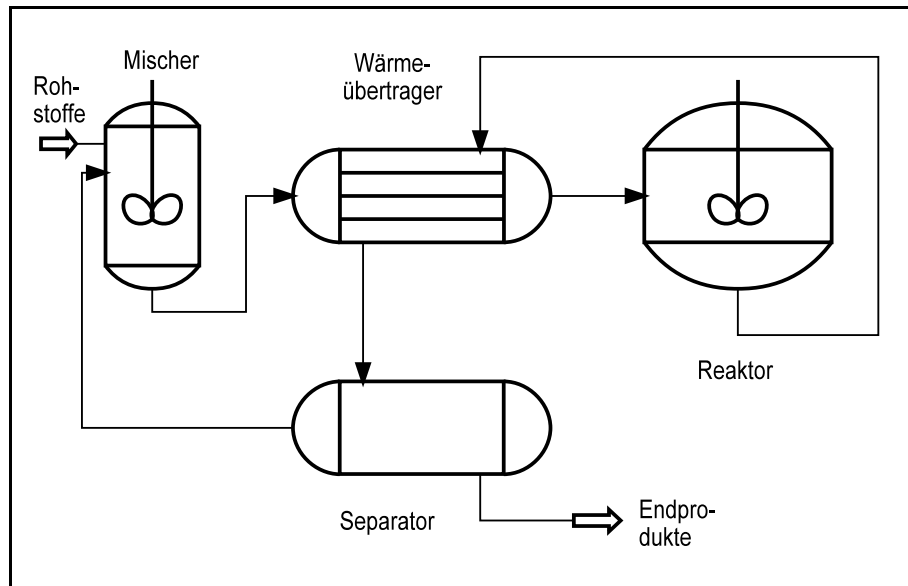
Wenn die zeitlichen Veränderungen der Ausgangsgrößen einen periodischen Verlauf zeigen, der durch zeitlich konstante Mittelwerte gekennzeichnet ist, nennt man das Systemverhalten quasikontinuierlich.

□ *Klassifikation nach den Betriebsbereichen für Druck und Temperatur*

Man kann als technisch interessante Klassifikationsmerkmale auch die dominanten Bereiche für Druck und Temperatur im System heranziehen. In diesem Sinne lassen sich dann vor allem Verfahren als Hochdruck-, Umgebungsdruck-, Vakuumverfahren und/oder als Hochtemperatur-, Umgebungstemperatur-, Tieftemperaturverfahren klassifizieren. Für die Klasseneinteilung werden dann signifikante Grenzwerte festgelegt.

## 1. Übung

Für die in der folgenden Abbildung dargestellte Prozessgruppe ist der stationäre Systemzustand zu bestimmen.



Die Prozesseinheiten sind durch folgende Angaben gekennzeichnet:

- Mischer:** Ideale Durchmischung kann vorausgesetzt werden.
- Wärmeübertrager:** Das den Wärmeübertrager kennzeichnende Produkt  $k \cdot A$  hat einen Wert von  $300 \text{ kJ/hK}$ . Die molare spezifische Wärme beträgt  $2 \text{ kJ/kmol K}$ .
- Reaktor:** Im ideal durchmischten Rührkesselreaktor läuft eine irreversible, volumenbeständige Reaktion 1. Ordnung ab:  

$$A \text{ ----> B}$$
Für die Reaktionsgeschwindigkeitskonstante gilt folgende Temperaturabhängigkeit:  

$$k(T) = 100 \exp(-1000/T)$$
 $k$  ergibt sich dabei in  $\text{h}^{-1}$ .  
Die mittlere Verweilzeit im Reaktor beträgt  $0.1 \text{ h}$ . Die Temperaturdifferenz zwischen Reaktoreingang und -ausgang wurde mit  $100 \text{ K}$  bestimmt.
- Separator:** Das Endprodukt ist noch mit  $10\%$  des Rohstoffes  $A$  belastet. Die Restmenge von  $A$  wird vollständig zurückgeführt. Die Menge des Endproduktes in der Rückführung kann vernachlässigt werden.
- Systemeingang:** Rohstoffstrom:  $100 \text{ kmol/h}$ ,  $T_0 : 300 \text{ K}$

**Es sind folgende Teilaufgaben zu lösen:**

- Die Teilmodelle für die Prozesseinheiten sind zu entwickeln.
- Der stationäre Zustand des Systems ist zu bestimmen.
- Es sind die Berechnungsreihenfolgen zu diskutieren.

## 2. Simulationsmethoden

### 2.1. Grundbegriffe

Simulationsmethoden sind aus der Sicht der Systemverfahrenstechnik Basismethoden; viele in ihren Zielen weiterführende Methoden (Auslegung, Optimierung, Struktursynthese) basieren auf den Simulationsmethoden. Simulationsuntersuchungen haben, allgemein gesehen, die Nachbildung des Verhaltens eines Systems unter vorgegebenen Umgebungsbedingungen zum Ziel. Die konkrete Aufgabenstellung spezifiziert die Zielstellung im Sinne der angestrebten Lösung. Im folgenden werden einige Grundbegriffe eingeführt und erläutert.

- **Simulation / Simulationsmethode / Simulationswerkzeug**

Unter *Simulation* versteht man die Untersuchung des Verhaltens eines realen Systems durch zielgerichtete Experimente am mathematischen Modell des Systems. Die Untersuchungen werden zu wesentlichen Teilen auf dem Computer<sup>1</sup> realisiert.

Unter einer *Simulationsmethode* ist das komplexe Lösungsverfahren für die Modellgleichungen zu verstehen.

Softwarepakete, die für die Realisierung der Untersuchungen genutzt werden können, werden als *Simulationswerkzeuge* bezeichnet.

- **Ziele von Simulationsuntersuchungen**

Simulationsuntersuchungen sind stets in gewisse Aufgabenstellungen „eingebettet“. Im Rahmen von systemverfahrenstechnischen Aufgabenstellungen werden Simulationsuntersuchungen i. a. folgende Zielstellungen verfolgen:

1. Vorhersage des Systemverhaltens unter vorgegebenen äußeren Bedingungen (Untersuchung der Funktionalität eines Systems).
2. Überprüfung, Bewertung, Vergleich und Optimierung von Entwürfen für das Verhalten eines Systems (als Freiheitsgrade dienen hierbei neben den Steuergrößen der Prozesseinheiten auch die Strukturparameter des Systems).
3. Einsatz des Systemmodells parallel zum Prozess (Prozessbegleitende Simulation für die Systemsteuerung bzw. für das modellgestützte Messen).
4. Untersuchung kritischer Zustände und sicherheitsrelevanter Szenarien.
5. Anwendung des Systemmodells für Training, Ausbildung und Überprüfung des Bedienpersonals einer Produktionsanlage.

- **Anforderungen / Rahmenbedingungen für Simulationsuntersuchungen**

Simulationsuntersuchungen sind an bestimmte Rahmenbedingungen gebunden; an die Ergebnisse werden andererseits gewisse Anforderungen gestellt:

- Das Systemmodell muss die wesentlichen Eigenschaften des Systemverhaltens abbilden. Das Untersuchungsziel bestimmt, welche Eigenschaften das sind. So wird man beim Vergleich von Entwürfen für den Dauerbetrieb eines kontinuierlichen Systems das

---

<sup>1</sup> Man spricht in diesem Zusammenhang auch von “Computersimulation”.

stationäre Systemmodell, für die Untersuchungen der An- und Abfahrprozesse dagegen das dynamische Systemmodell heranziehen.

- Die Genauigkeitsanforderungen sind in angemessener Übereinstimmung mit den Zielen zu formulieren.
- Die Gültigkeitsbereiche der Aussagen, die durch Simulationsuntersuchungen gewonnen werden, werden von den Gültigkeitsbereichen der Modelle bestimmt. Für die Verifikation der Simulationsergebnisse sind neben den Diskussionen dieser Bereiche experimentelle Ergebnisse zum Vergleich heranzuziehen.

### ● **Formen von Simulationsuntersuchungen**

- *Orientierende Untersuchungen* Die Haupteigenschaften eines Systems werden untersucht. Es wird mit groben Modellvorstellungen und überschlägigen Parameterwerten gerechnet. Das Systemverhalten wird "qualitativ" abgebildet.
- *Grobuntersuchungen* Modelle und Parameter sind so genau, dass das Systemverhalten in groben Zügen quantitativ abgebildet wird.
- *Feinuntersuchungen* Das Systemverhalten wird mit einer vorgegebenen (angemessen gewählten!) Genauigkeit bestimmt.

## 2.2. **Bearbeitungsschritte von Simulationsuntersuchungen**

Simulationsuntersuchungen lassen sich in die im Folgenden dargestellten Bearbeitungsschritte gliedern. Dabei können sich die Schwerpunkte je nach Aufgabenstellung unterschiedlich darstellen. Je nach dem Interpretationsergebnis muss die Bearbeitung evt. in bestimmten Schritten wieder aufgenommen werden, wobei dabei die notwendigen Korrekturen bei erneuter Bearbeitung vorzunehmen sind; der Bearbeitungsprozess hat i. a. einen „iterativen“ Charakter.

### □ **Problemanalyse (Präzisierung der Aufgabenstellung)**

In dieser Bearbeitungsphase sind folgende Voraussetzungen für die Simulationsuntersuchungen zu klären:

- Definition des Zieles / der Ziele der Untersuchungen (mögliche Zielstellungen s. o.).
- Abstecken der Anforderungen an das Ergebnis. Hierbei sind vor allem die Genauigkeitsanforderungen zu präzisieren.
- Aufstellung des Plans für die Simulationsexperimente. Hierbei sind neben den abgesteckten Zielen auch die Zeit- und Kostenfaktoren zu berücksichtigen!

### □ **Systemanalyse**

Diese Bearbeitungsphase umfasst die folgenden Einzelschritte:

- *Zerlegung des Systems in die zu modellierenden Elemente*  
In dieser Phase ist die für die zu lösende Aufgabe zweckmäßige Betrachtungsebene zu

wählen; entsprechend sind die Elemente zu wählen.

– *Modellbildung für die Elemente*

Die gewählte Betrachtungsebene macht spezifische Methoden der Modellbildung erforderlich. Für die Modellbildung auf der Ebene der Prozesseinheiten bzw. der Prozessgruppen werden die Methoden der Modellbildung durch theoretische und/oder experimentelle Prozessanalyse zum Einsatz kommen. Für Elemente höherer Aggregationsgrade werden einfache Eingangs-/Ausgangsbeschreibungen, wie sie in betriebswirtschaftlichen Bilanzen verwendet werden, herangezogen.

– *Beschreibung der Systemstruktur*

Für die Untersuchung des Systemverhaltens ist es notwendig, neben den Elementemodellen auch deren Kopplungen in einer geeigneten Form zu beschreiben. Die nachfolgend behandelten Formen der Strukturbeschreibung sind dabei von besonderer Bedeutung, da sie, wenn auch in unterschiedlicher Implementierung, von den verbreiteten Simulationswerkzeugen genutzt werden:

▶ **Koppelmatrix**

Es wird eine quadratische Matrix definiert, deren Elemente wie folgt belegt werden:

$$\underline{\mathbf{K}} \Rightarrow \mathbf{K}_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{Element } i \text{ ist gekoppelt mit Element } j \\ 0 & \text{Es besteht keine Kopplung} \end{cases}$$

Die Koppelmatrizen liefern sehr aufwendige Strukturbeschreibungen, da sie viel Speicherplatz benötigen und i. a. nur schwach besetzt sind. Außerdem beschreiben sie die Kopplungen zwischen den Elementen unabhängig von den Strömen.

▶ **Strommatrix**

Es wird eine Matrix (die i. a. nicht quadratisch ist!) wie folgt definiert:

$$\underline{\mathbf{S}} \Rightarrow \mathbf{S}_{ij} = \begin{cases} -1 & \text{Strom } j \text{ entspringt dem Element } i \\ 1 & \text{Strom } j \text{ mündet in das Element } i \\ 0 & \text{Es besteht keine Kopplung} \end{cases}$$

Die Strommatrizen berücksichtigen zwar die Ströme; sie sind damit für die Strukturbeschreibungen in Simulationswerkzeugen besser geeignet als die Koppelmatrizen. Sie weisen aber immer noch die Nachteile letzterer auf, nämlich viel Speicherplatz zu belegen und nur schwach besetzt zu sein.

▶ **Eingangsseitige Verknüpfungsliste (Koppelliste)**

Es wird eine Tabelle definiert, die zwei Spalten besitzt und die wie folgt belegt werden:

Elemente des Systems	ist eingangsseitig gekoppelt mit ....
In dieser Spalte werden die Systemelemente aufgeführt	In dieser Spalte werden die Elemente angegeben, die die Eingangsgrößen des Elements liefern.

Diese Darstellung der Systemstruktur ist sehr viel effizienter als die Matrizendarstellung, da sie nur die tatsächlich bestehenden Kopplungen berücksichtigt. Die Verknüpfungsliste kann leicht so modifiziert werden, dass auch die Stromindizes und die „Portindizes“ (jedes Element hat definierte Ports, an denen die Eingangsgrößen eintreten und die Ausgangsgrößen austreten - s. hierzu auch Abschnitt 1.3. ) in die Darstellung mit einbezogen werden. Die rechte Spalte ist dann wie folgt zu ergänzen:

Elemente des Systems	ist eingangsseitig gekoppelt mit ....
Element i	Das Element ist eingangsseitig gekoppelt mit dem Element j über den Strom k der am Port p eintritt.

Das Element i kann demnach, wenn es mehrere Eingangsports besitzt, mehrere Zeilen der Liste belegen.

► Ausgangsseitige Verknüpfungsliste (Koppelliste)

Diese Darstellung wird analog definiert, nur dass die ausgangsseitige Kopplung berücksichtigt wird. Wenn sowohl die eingangsseitige als auch die ausgangsseitige Liste für ein System notiert werden, müssen beide Darstellungen konsistent zueinander sein; diesen Umstand kann man für den Test auf Fehler in der Strukturbeschreibung nutzen.

□ **Analyse des Gleichungssystems**

Je nach Problemstellung ergeben sich unterschiedlich strukturierte Gleichungssysteme, die spezifische Lösungsmethoden notwendig machen. Die folgenden Teilaufgaben sind in diesem Zusammenhang von Interesse; wird für die Problemlösung ein Simulationswerkzeug herangezogen, werden durch das Werkzeug i. a. für diese Teilaufgaben Standardlösungen angeboten.

– *Analyse der Eigenschaften des Gleichungssystems*

Die einzelnen Elemente können durch Modellgleichungssysteme gleicher oder auch unterschiedlicher Form beschrieben werden. Im Falle unterschiedlicher Formen ist die Lösungsstrategie so zu entwickeln, dass es bei der numerischen Lösung nicht zu Fehlern in der Berechnung des Systemzustandes kommt. Wenn beispielsweise einige Systemelemente als instationär angenommen werden müssen und andere dagegen als stationär anzusetzen sind, muss ein gemischtes System von algebraischen Gleichungen und von Differentialgleichungen gelöst werden. Wenn die Differentialgleichungen mit einem Verfahren gelöst werden, das Zwischenschritte im Integrationsintervall einführt, müssen i. a. auch die algebraischen Gleichungen für diese Zwischenschritte gelöst werden.

– *Vereinfachung des Gleichungssystems*

Die Modellgleichungssysteme besitzen mitunter sehr hohe Dimension. Da es sich i. a. um nichtlineare Gleichungssysteme handelt, sind zwei Probleme von Bedeutung: die Sicherung der

Konvergenz des Lösungsverfahrens und die notwendige Rechenzeit; beide Probleme werden im erheblichen Maße von der Wahl der Anfangsschätzung für den Systemzustand beeinflusst.

Wenn es gelingt, einzelne Modellgleichungen oder das System als Ganzes zu vereinfachen, kann das von Vorteil sein. Mitunter müssen die Vereinfachungen nach der Ergebnisdiskussion wieder korrigiert werden.

Zwei Wege sind für die Vereinfachung von Interesse:

- ▶ Linearisierung der Modellgleichungen
- ▶ Reduktion der Dimension des Gleichungssystems durch Streichen von Zustandsgrößen, deren Einfluss damit vernachlässigt wird
- ▶ Vereinfachung der Struktur des verfahrenstechnischen Systems durch Streichen von Elementen bzw. von Strömen.

#### – *Diskussion von Lösungsverfahren*

Es sind zwei Grund-Strategien der Lösung eines Modellgleichungssystems zu unterscheiden:

- ▶ Blockorientierte Lösung

Die Teil-Gleichungssysteme der Elemente werden separat gelöst. Die Berechnungsreihenfolge ergibt sich im wesentlichen aus der Stromführung. Treten Rückführungen auf, müssen im Falle der Berechnung des stationären Systemzustandes Iterationsblöcke eingeführt werden. Die blockorientierte Lösung ist zwar einfacher in der Steuerung der Berechnungsreihenfolge, führt aber i. a. zu einem höheren numerischen Aufwand und damit zu höheren Rechenzeiten als die gleichungsorientierte Lösungsstrategie.

- ▶ Gleichungsorientierte Lösung

Die Teil-Gleichungssysteme der Elemente werden zu einem Gesamtsystem zusammengefasst. Innerhalb des Gesamtsystems werden nun solche Teilgleichungssysteme gebildet, die mit einem möglichst geringen Aufwand zu lösen sind. Die Berechnungsreihenfolge wird also bei dieser Strategie nach einem Effizienzkriterium für die Lösung festgelegt. Die gleichungsorientierte Lösung ist zwar bezüglich der Bestimmung der Berechnungsreihenfolge aufwendiger als die blockorientierte Lösung, sie liefert aber in der Regel das bessere Konvergenzverhalten.

Wenn für die Lösung des Problems ein Simulationswerkzeug eingesetzt wird, so ist die Lösungsstrategie durch das Werkzeug i. a. gesetzt.

#### □ *Interpretation der Ergebnisse*

Im Mittelpunkt der Interpretation der Ergebnisse steht die Beantwortung zweier Fragen:

- Sind die Ergebnisse plausibel und/oder stehen sie in Übereinstimmung mit verifizierenden Experimenten?

**Nein:** Modelle und Parameter sind zu überprüfen bzw. zu korrigieren. Die Bearbeitung ist in der Regel mit einer erneuten Systemanalyse fortzusetzen.

**Ja:** Beantwortung der nächsten Frage.

- Ist die primäre Aufgabenstellung als gelöst anzusehen?

**Nein:** Bevor eine erneute Systemanalyse durchgeführt wird, sollte die Problemstellung auf ihre Korrektheit hin untersucht werden.

**Ja:** Ende der Untersuchung.

### 2.3. Simulationswerkzeuge

Ein Simulationswerkzeug ist ein Programm bzw. ein Programmiersystem, das die für die Simulationsexperimente erforderlichen Bausteine in einer an den Bedürfnissen der potentiellen Nutzer orientierten Form bereitstellt.

Simulationswerkzeuge werden in der Regel für bestimmte Klassen des Systemverhaltens (z.B. statisch/dynamisch usw.) entwickelt. In ihrer Anwendungsbreite berücksichtigen sie im allgemeinen die Anforderungen einer bestimmten (hinreichend repräsentativen!) Nutzergruppe (so gibt es Werkzeuge für die Verfahrenstechnik, den Maschinenbau, die Verkehrstechnik usw. ).

#### □ Grundtypen von Simulationswerkzeugen

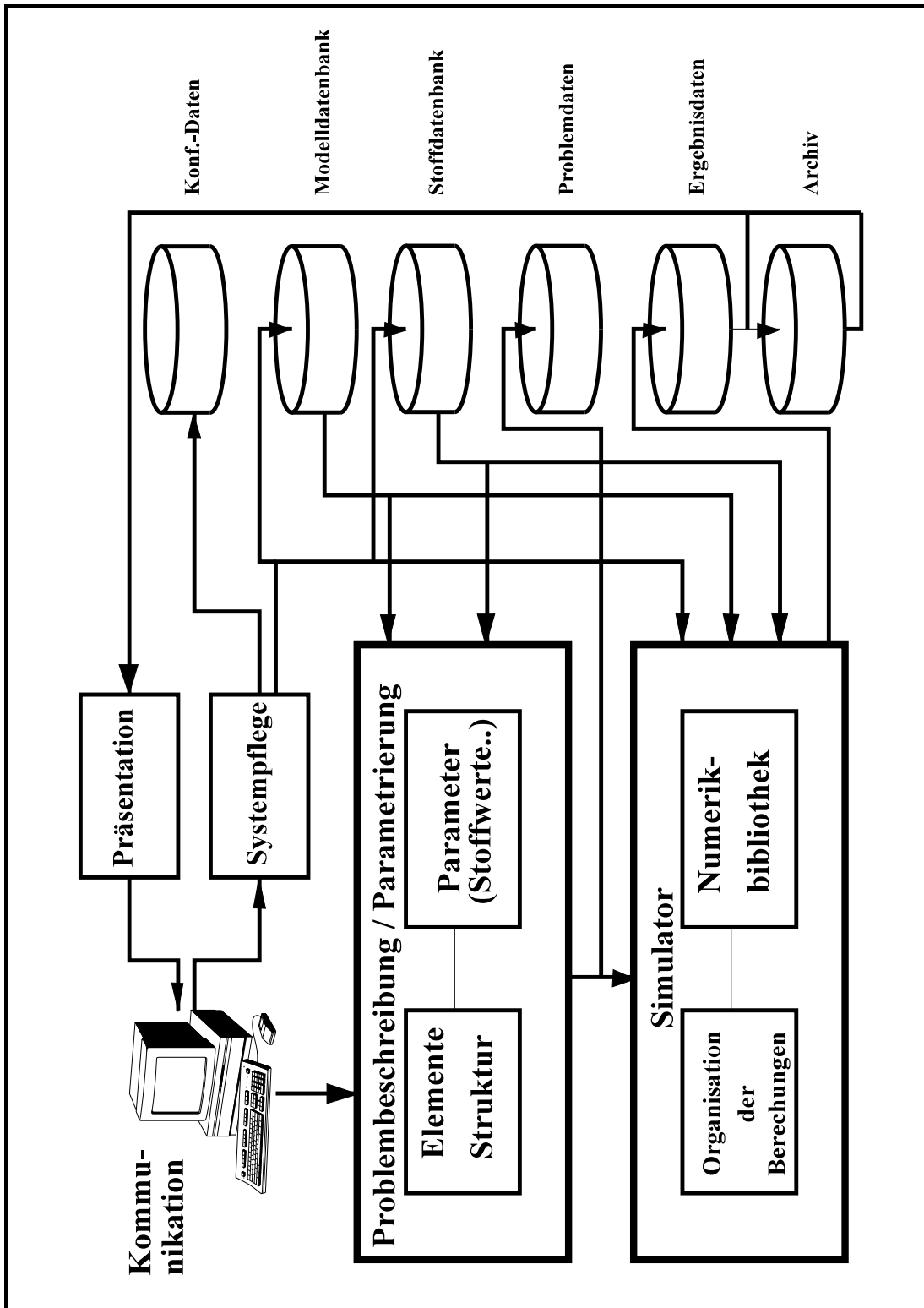
Aus der Sicht der Problembeschreibung durch das Simulationswerkzeug lassen sich die in der folgenden Tabelle zusammengestellten Grundtypen von Simulationswerkzeugen unterscheiden:

Grundtyp	Merkmale	Beispiel
Problemorientierte Programmiersprache	Die allgemeine Anwendbarkeit dieser Werkzeuge bietet Gewähr für die Lösung einer Simulationsaufgabe; allerdings mit einem sehr hohen Aufwand. Diese Werkzeuge bilden aber die Basis für die nachfolgend zu behandelnden Werkzeuge.	PASCAL , C++ , JAVA
Simulationssprache	Hierbei handelt es sich um problemorientierte Programmiersprachen, die spezifische Ausdrucksmittel für Simulationsprobleme aufweisen. Diese Werkzeuge sind den Hochsprachen sehr ähnlich.	SIMULA , ( ACM )
<b>Fachgebietsorientiertes Simulationssystem</b>	Es werden die für ein bestimmtes Fachgebiet typischen Modelle und Datenbanken bereitgestellt. Der Anwender beschreibt sein spezifisches Problem über eine interaktive, graphische Benutzeroberfläche oder durch eine Skript-Sprache. Durch das Werkzeug werden die typischen Problemstellungen des Fachgebietes unterstützt.	ASPEN PLUS, ASPEN DYNAMICS, ASPEN CUSTOM MODELER (ACM)
Parametrierbares Simulationssystem	Das Werkzeug ist nur für eine enge Klasse von Systemstrukturen (in der Regel nur eine Struktur) anwendbar. Es können lediglich gewisse Modellparameter (Stoffwerte usw.) verändert werden.	Alle mit einem Werkzeug gene- rierten Anwendun- gen.

Wenn man diese Werkzeuge aus der Sicht des Anwenders einer vergleichenden Wertung unterzieht, so ist festzustellen, dass die Gruppe der fachgebietsorientierten Simulationssysteme die größte Bedeutung besitzen wird. Darum werden diese im Folgenden ausschließlich betrachtet.

□ **Struktur eine fachgebietsorientierten Simulationssystems für die Systemverfahrenstechnik**

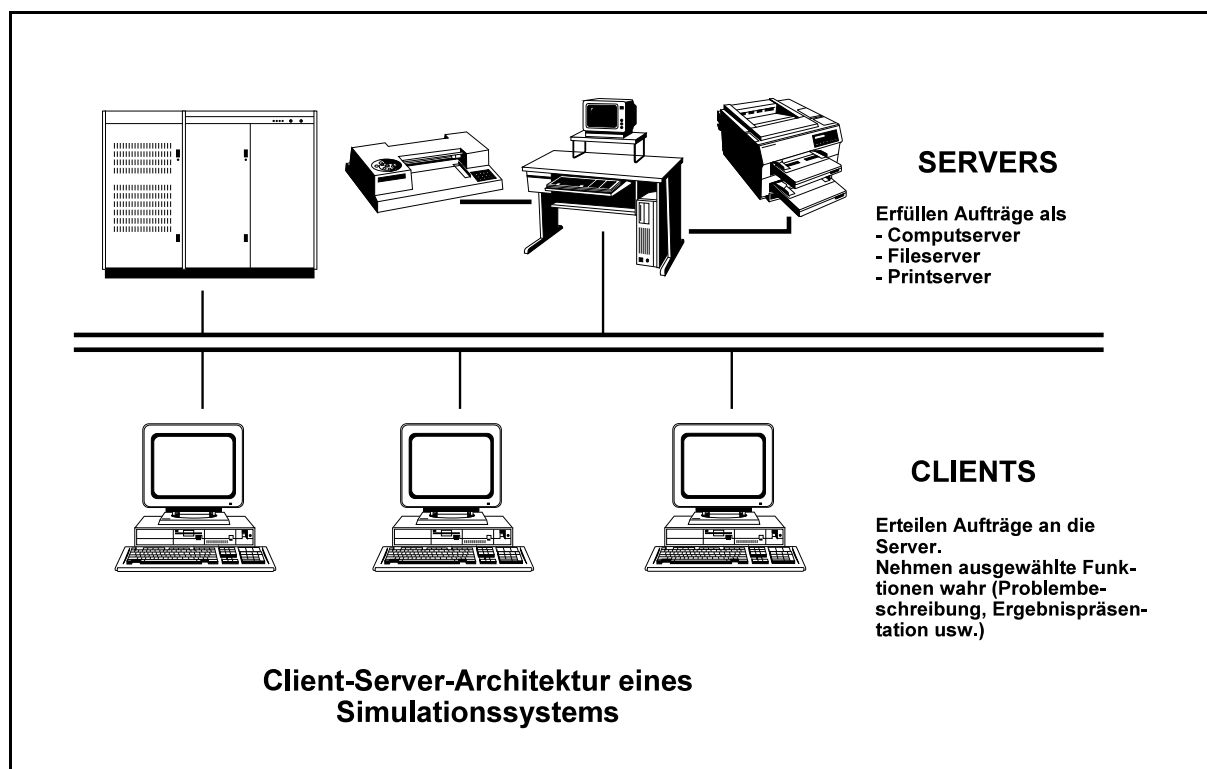
Im folgenden Bild ist die Struktur eines fachgebietsorientierten Simulationssystems dargestellt, das für Simulationsuntersuchungen an verfahrenstechnischen Systemen eingesetzt werden soll.



Die einzelnen Komponenten übernehmen folgende Funktionen:

- *Problembeschreibung / Parametrierung*  
Über diese Komponente beschreibt der Anwender seine Probleme. Dafür kann er je nach Werkzeug Programmeditoren und / oder grafische Werkzeuge nutzen. Für die Strukturbeschreibung stehen heute in der Regel grafische Editoren zur Verfügung. Die Parametrierung erfolgt in der Regel über ein System von Formularen.
- *Simulator*  
Diese Komponente führt die eigentlichen Simulationsrechnungen auf der Basis des mathematischen Systemmodells aus. Der Simulator besteht im wesentlichen aus einem Algorithmus für die Steuerung der Berechnungsreihenfolge und aus einer Numerikbibliothek für die Lösung der Gleichungssysteme. Umfang und Struktur dieser Bibliothek hängen vom Funktionsumfang des Simulationswerkzeugs ab.
- *Präsentation*  
Diese Komponente stellt Werkzeuge für die Darstellung der Ergebnisse bereit. Dabei sind wieder textorientierte (z.B. Report-Generatoren) und grafische Werkzeuge (z. B. Diagramm-Generatoren) zu unterscheiden.
- *Systempflege*  
Der Anwender kann das System im bestimmten Rahmen an seine Umgebung anpassen. Er kann also bestimmte Standardeinstellungen so wählen, dass sie bereits beim Start des Systems wirksam werden.
- *Dateien /Datenbestände*  
Die einzelnen Komponenten benötigen für ihre Arbeit spezifische Datenbanken und liefern ihre Resultate in spezifischen Dateien ab.

Für größere Systemlösungen kann ein Simulationswerkzeug in einer Client-Server-Umgebung betrieben werden. Das folgende Bild stellt diese Struktur dar:



### □ Beispiele für Simulationswerkzeuge

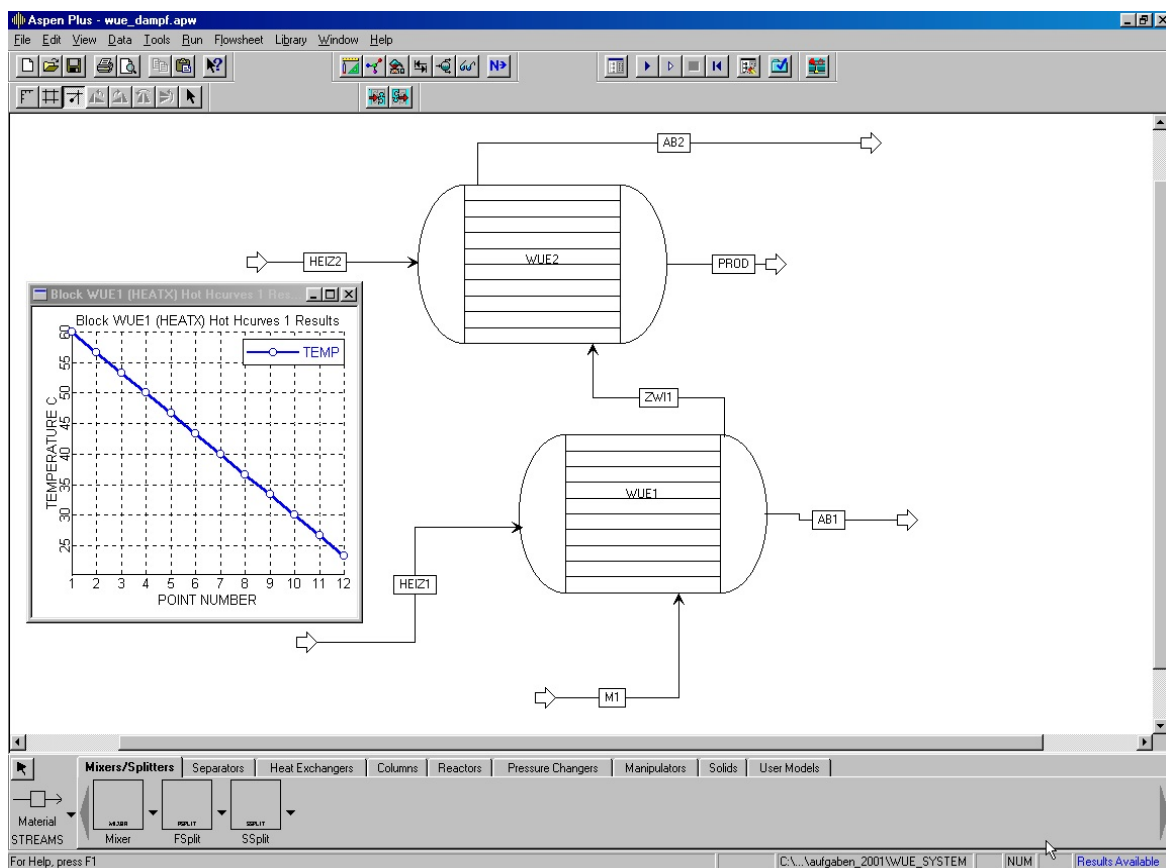
Im folgenden werden drei Simulationswerkzeuge der *Aspen Engineering Suite* (Aspen Technology, Inc. Cambridge, Massachusetts, USA) beispielhaft beschrieben.

#### ● *ASPEN PLUS - Simulation des stationären Verhaltens verfahrenstechnischer Systeme*

Dieses Werkzeug ist durch folgende Eigenschaften zu kennzeichnen:

- Fachgebietsorientiertes Simulationsprogramm für verfahrenstechnische Probleme.
- Simulation des statischen Verhaltens wird unterstützt.
- Es wird eine kombinierte blockorientierte Berechnungssteuerung realisiert.
- Das Programm hat zwei typische Komponenten:  
Der **ModelManager** realisiert die Kommunikation mit dem Nutzer in den Phasen der Parametrierung des Problems und der Präsentation der Simulationsergebnisse.  
Der **Simulator (SimulationEngine)** realisiert die Simulationsberechnungen.  
Beide Komponenten kommunizieren über definierte Schnittstellen (ASCII-Files).
- Es existiert eine umfangreiche **Modellbibliothek**; der Nutzer kann aber auch eigene Modelle (als FORTRAN - Unterprogramme) in das System importieren.
- Es werden **Standard-Datenbanken** für die Daten reiner Stoffe und für binäre Gleichgewichte bereitgestellt. Der Nutzer kann über eine offene Schnittstelle eigene Datenbanken oder die fremder Anbieter in das System integrieren.
- Eine umfangreiche Bibliothek von **Berechnungsverfahren für die Eigenschaften realer Stoffsysteme** wird bereitgestellt, die ebenfalls prinzipiell erweiterungsfähig ist.
- Für **Aufbereitung und Präsentation** der Ergebnisse gibt es mehrere Tools (Diagrammgenerator, Reportgenerator usw.).

Im folgenden Bild ist die Oberfläche (Work space) von ASPEN PLUS dargestellt:

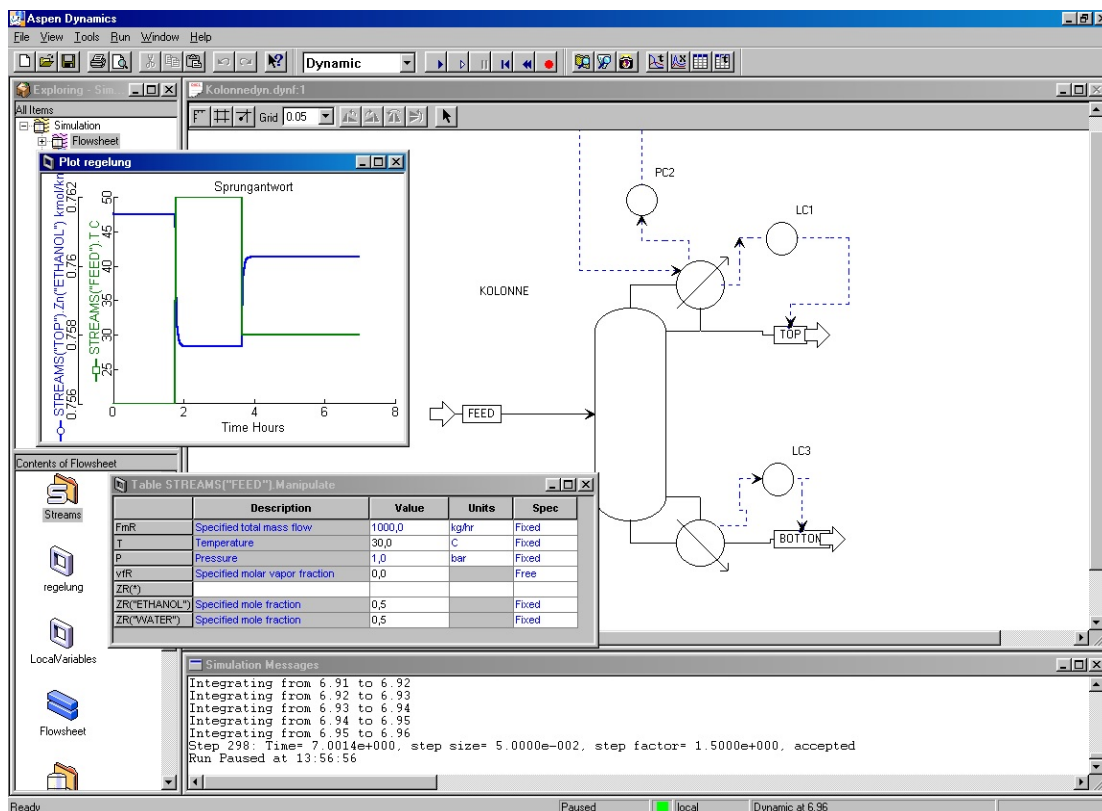


- *ASPEN DYNAMICS - Simulation des dynamischen Verhaltens verfahrenstechnischer Systeme*

Dieses Werkzeug ist durch folgende Eigenschaften zu kennzeichnen:

- ASPEN DYNAMICS ist ein ergänzendes Werkzeug zu ASPEN PLUS. Es ist für die dynamische Simulation einsetzbar.
- **Modellbibliothek und Stoffdatenbank** orientieren sich an den Anforderungen der Verfahrenstechnik. Damit ist ASPEN DYNAMICS im engeren Sinne ein fachgebietsorientiertes Simulationsprogramm für die Verfahrenstechnik.
- Es wird eine gleichungsorientierte Berechnungssteuerung realisiert.
- Das Programm hat mehrere **Komponenten**:
  - = Interaktive Ergänzung der Systemstruktur um spezielle dynamische Elemente
  - = Interaktive Steuerung des Simulationsablaufs
  - = Ergebnispräsentation nach Abschluss der Simulationsrechnung
- Die Problembeschreibung wird interaktiv erzeugt. Das Fließschema wird mit ASPEN PLUS generiert. Der erzeugte Zwischencode wird in ASPEN DYNAMICS importiert. Spezielle dynamische Elemente können noch nachträglich eingefügt werden.
- Es existiert eine **Modellbibliothek** für bestimmte Standardmodelle.
- Es kann auf die Daten reiner Stoffe und auf Berechnungsverfahren für binäre Gleichgewichte zugegriffen werden. Hierbei werden die Datenbanken und Stoffwertberechnungsverfahren von ASPEN PLUS genutzt.
- Für **Aufbereitung und Präsentation** der Ergebnisse gibt es mehrere Tools (Diagrammgenerator, Generierung von Tabellen). Diese können on-line während der Berechnung oder nach Abschluss der Simulation aktiviert werden.

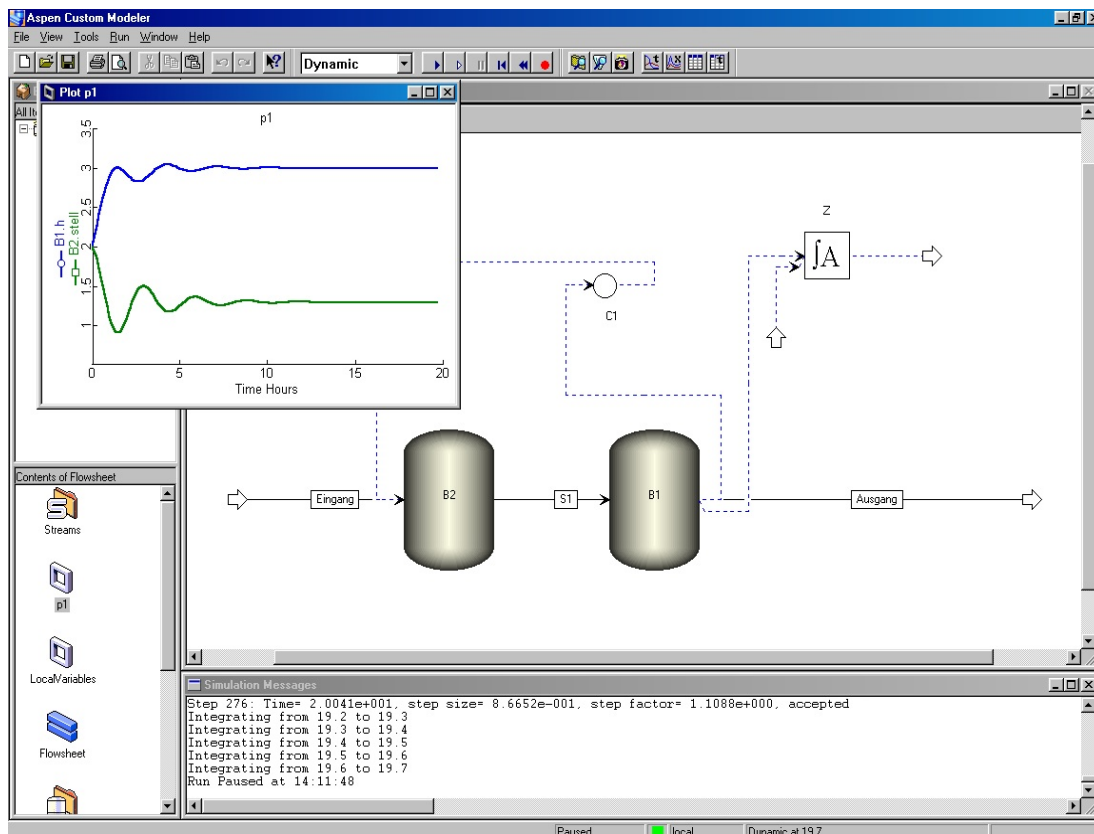
Im folgenden Bild ist die Oberfläche von ASPEN DYNAMICS dargestellt:



- *ASPEN CUSTOM MODELER (ACM) - das Modellierungswerkzeug für den Anwender*

Dieses Werkzeug ist durch folgende Eigenschaften zu kennzeichnen:

- Im Kern ist ACM eine **Simulationssprache**. Damit ist es für eine breite Klasse von Simulationsproblemen (statische, dynamische Simulation, Parameterschätzung, usw.) einsetzbar.
- **Modellbibliothek und Stoffdatenbank** orientieren sich an den Anforderungen der Verfahrenstechnik. Damit ist ACM im engeren Sinne ein fachgebietsorientiertes Simulationsprogramm für die Verfahrenstechnik.
- Es wird eine gleichungsorientierte Berechnungssteuerung realisiert.
- Das Programm hat mehrere **Komponenten**:
  - = Interaktive Erzeugung der Systemstruktur
  - = Programmeditor und Compiler
  - = Interaktive Steuerung des Simulationsablaufs
  - = Ergebnispräsentation nach Abschluss der Simulationsrechnung
- Die Problembeschreibung erfolgt sowohl interaktiv (Strukturbeschreibung) als auch in Form von **Programmtexten** (Elementmodelle).
- Es existiert eine **Modellbibliothek** für bestimmte Standardmodelle. Diese Modelle werden in der ACM-Simulationssprache bereitgestellt.
- Es kann auf die Daten reiner Stoffe und auf binäre Gleichgewichtsdaten zugegriffen werden. Hierbei werden die Datenbanken und Stoffwertberechnungsverfahren von ASPEN PLUS genutzt (über das PROPERTIES PLUS Interface).
- Für **Aufbereitung und Präsentation** der Ergebnisse gibt es mehrere Tools (Diagrammgenerator, Generierung von Tabellen). Diese können on-line während der Berechnung oder nach Abschluss der Simulation aktiviert werden.



## □ Kriterien für die Auswahl eines Simulationswerkzeuges

Vor der Entscheidung über die Anschaffung eines Simulationswerkzeuges sind folgende Daten zu erheben:

- Welches Problemspektrum ist (heute und morgen!) zu berücksichtigen?
- Wie hoch ist die voraussichtliche Auslastung?
- Wie viele Nutzer sind vorzusehen?

Für den Vergleich der Eignung unterschiedlicher Werkzeuge für das ermittelte Problemspektrum sollten folgende Merkmale beurteilt werden:

- Inwieweit ist die Modellbibliothek repräsentativ für die zu lösenden Probleme?
- Wie groß ist der Aufwand für die Einbindung anwenderspezifischer Modelle?
- Erfüllen die Stoffdatenbibliothek sowie die Bibliothek für die Eigenschaftsberechnung der Stoffsysteme die durch die Aufgaben bedingten Anforderungen? Lassen sich die Datenbanken ergänzen, bzw. können auch Datenbanken anderer Anbieter verwendet werden?
- Wie ist die Palette der angebotenen numerischen Verfahren zu beurteilen? Welche Möglichkeiten gibt es, die Verfahren zu steuern?
- Wie ist die Nutzeroberfläche zu beurteilen?
- Stellt das Werkzeug „gehobene Funktionen“ (Sensitivitätsanalyse, Entwurfsmodus, Optimierung, Parameterschätzung usw. ) als integrale Bestandteile des Systems bereit?

Für die Entscheidung über die Auswahl eines Werkzeuges sind i. a. die folgenden Kriterien heranzuziehen:

- In welchem Maße erfüllen die Werkzeuge die durch das Problemspektrum definierten Anforderungen?
- Preise der Werkzeuge mit vergleichbarer Eignung?
- Wie ist die „Stabilität“ des Systemanbieters zu beurteilen?
- Welchen Service (für die Fehlerbehebung, zur Nutzerschulung usw.) bietet der Entwickler?
- Wie ist die Qualität der Dokumentation zu beurteilen?

## 2. Übung

Es werden die oben beschriebenen Simulationswerkzeuge für ausgewählte Problemstellungen vorgestellt. Insbesondere werden folgende Aufgaben behandelt:

- Das Beispiel der Einführung (Absorption von  $\text{CO}_2$ ) wird behandelt.
- Die Aufgabe der 1. Übung wird mit ACM gelöst.

### 3. Optimierung verfahrenstechnischer Systeme

#### 3.1. Formulierung eines Optimierungsproblems

Ein Optimierungsproblem hat charakteristische Elemente, die in den nachfolgenden Punkten behandelt werden.

- **Optimierungskriterium / Zielkriterium in allgemeiner Form:**

Das Zielkriterium definiert, von welcher Art die Lösung sein soll. Es besteht aus der Zielfunktion, die ein Bewertungsmaß für das Systemverhalten darstellt und einer Extremalforderung an die Zielfunktion:

$Z(\underline{x}, \underline{u}, \underline{z}, \underline{a}, \underline{S}) \Rightarrow \text{Ext}$ <p> <math>\underline{x}</math> : Zustandsvektor  <math>\underline{u}</math> : Steuervektor  <math>\underline{z}</math> : Störgrößenvektor  <math>\underline{a}</math> : Entwurfgrößenvektor  <math>\underline{S}</math> : Koppelmatrix </p>
---

**Systemeigenschaften**, die als Zielfunktionen herangezogen werden können:

- Güte der Stoff- und Energieumwandlung
- Aufwand für die anlagentechnischen Ausrüstungen
- Aufwand für den Betrieb des Systems

Eine umfassende Bewertung des Systems erfordert in der Regel die Definition einer Kompromissfunktion, die sich als Kombination (z.B. als linearer gewichteter Kompromiss) dieser Teilziele ergibt.

**Beispiele** für Zielkriterien (aus verfahrenstechnischer Sicht)

- Gesamtkosten  $\Rightarrow$  Min.
- Betriebskosten  $\Rightarrow$  Min.
- Gewinn  $\Rightarrow$  Max.
- Verfügbarkeit  $\Rightarrow$  Max.

- **Nebenbedingungen**

Das Zielkriterium allein reicht nicht aus, um ein Optimierungsproblem zu lösen. Dafür gibt es zwei Gründe:

- Die Variablen, von dem das Zielkriterium abhängt, sind nicht unabhängig voneinander. So lassen sich die Zustandsgrößen als Funktionen der Steuer-, Stör- und Entwurfgrößen sowie der Kopplungsbedingungen darstellen (diese Zusammenhänge beschreibt das mathematische Systemmodell). Über die Störgrößen müssen sinnvolle Annahmen

getroffen werden. In der Regel wird man eine Optimierung für unterschiedliche “Störsituationen” (ungestörtes System ... stark gestörtes System) durchführen müssen.

- Die Variablen, von denen das Zielkriterium abhängt, unterliegen bestimmten, physikalisch und/oder technisch begründbaren Grenzbedingungen.

Es gibt zwei Klassen von *Nebenbedingungen (Restriktionen)*, denen die Lösung des Problems genügen muss und die den oben diskutierten Bedingungen entsprechen:

- ***Nebenbedingungen in Gleichungsform:***

$$G_i(\underline{x}, \underline{u}, \underline{z}, \underline{a}, \underline{S}) = 0 \quad i = 1, \dots, n_G$$

Diese Nebenbedingungen folgen in der Regel aus den Modellgleichungen.

- ***Nebenbedingungen in Ungleichungsform:***

$$U_j(\underline{x}, \underline{u}, \underline{z}, \underline{a}, \underline{S}) \begin{matrix} > \\ \geq \\ \leq \\ < \end{matrix} 0 \quad j = 1, \dots, n_U$$

Diese Nebenbedingungen folgen aus physikalischen und technischen (auch sicherheitstechnischen) Grenzen.

- **Schwierigkeiten**, die bei der Optimierung verfahrenstechnischer Systeme auftreten können:

Die Optimierung eines Systems von Prozesseinheiten ist mit einer Reihe von Schwierigkeiten verbunden, die für die Auswahl bzw. die Weiterentwicklung der anzuwendenden Lösungsmethoden (s. Abschnitt 3.3.) von Bedeutung sind. Im Folgenden seien die wichtigsten aufgeführt:

- *Große Anzahl von Systemelementen; Vielfalt der Prozesseinheiten*  
⇒ Große Anzahl von Modellgleichungen ⇒ große Anzahl von zu berücksichtigenden Nebenbedingungen.
- *Nichtlinearitäten der Prozessmodelle*  
⇒ Kompliziertheit der Modellgleichungen ⇒ Schwierige Einbeziehung der Restriktionen.
- *Vielfalt der Steuerungen / der Entwurfsgrößen / Komplexität der Kopplungsbeziehungen*  
⇒ Hohe Dimension des Entscheidungsproblems ⇒ hoher Aufwand bei der Lösung des Optimierungsproblems.

### 3.2. Kostenmodelle als Zielfunktionen

Für die Bewertung verfahrenstechnischer Systeme haben sich folgende Typen von Zielfunktionen als praktikabel für die Bewertung des Systemverhaltens erwiesen:

- thermodynamische Zielfunktionen ( exergetische Bewertung des verfahrenstechnischen Systems ),
- Kostenmodelle, die betriebswirtschaftliche Bewertungsansätze mit technischen Entscheidungsvariablen (Steuergrößen) verbinden.

Im Folgenden werden nur die Kostenmodelle betrachtet.

- **Gesamtkosten für das verfahrenstechnische System**

Die jährlichen Gesamtkosten für das verfahrenstechnische System setzen sich additiv aus den festen Kosten und den Betriebskosten zusammen:

$$K_{\text{Gesamt}} = K_{\text{Fest}} + K_{\text{Betrieb}}$$

$K_{\text{Fest}}$  : jährliche feste Kosten  
 $K_{\text{Betrieb}}$  : jährliche Betriebskosten

- **Allgemeiner Ansatz für die festen Kosten**

Die jährlichen festen Kosten ergeben sich aus den auf den Zeitraum eines Jahres umzulegenden Investitionskosten:

$$K_{\text{Fest}} = \sum_{i=1}^{n_{\text{Elem}}} f_{K_i} I_i$$

$f_K$  : jährliche Kapitaldeckungsrate  
 $I$  : Investitionskosten

Die Investitionskosten setzen sich aus den Apparatkosten und den Zusatzkosten für Rohrleitungsverbindungen, Baumaßnahmen, elektrotechnische Ausrüstungen usw. zusammen. Es folgt dann:

$$I_i = \left[ I_{\text{Apparat}} + I_{\text{Rohrleitung}} + I_{\text{Elektro}} + I_{\text{Automatisierung}} + I_{\text{Bau}} + I_{\text{Inbetriebnahme}} + \dots \right]_i$$

Wenn man die einzelnen Kostenanteile auf die Apparatkosten bezieht, so folgt:

$$\Psi_{\text{Rohrleitung}} = \Psi_1 = \frac{I_{\text{Rohrleitung}}}{I_{\text{Apparat}}} \dots$$

Damit ergibt sich für die Investitionskosten:

$$I_i = I_{\text{Apparat}_i} \left( 1 + \sum_{j=1}^{n_{\text{Anteile}}} \Psi_{ij} \right) = I_{\text{Apparat}_i} (3 \dots 5)$$

Für die Apparatkosten kann man allgemein ansetzen:

$$I_{\text{Apparat}} = C_I \dot{m}_H (a_H)$$

$C_I$  : spezifische Apparatkosten  
 $\dot{m}_H$  : Hauptproduktstrom  
 $a_H$  : Hauptabmessung des Apparates

### ● Betriebskosten

Unter Betriebskosten werden alle Kostenanteile summiert, die mit dem laufenden Betrieb des Systems verbunden sind. Im Unterschied zu den festen Kosten fallen diese Kosten nur an, wenn sich das System auch tatsächlich in Betrieb befindet. Die jährlichen Betriebskosten ergeben sich demnach aus den Gesamt-Betriebskosten multipliziert mit der jährlichen Betriebsdauer:

$$K_{\text{Betrieb}} = \sum_{j=1}^{n_{\text{Ströme}}} c_{\text{Sp}_j} \dot{S}_j d$$

$c_{\text{Sp}}$  : Spezifische Kosten der Ströme  
 $\dot{S}$  : Mengen- und Energieströme  
 $d$  : jährliche Betriebsdauer

### ● Weitere Kostenbestandteile

Das Kostenmodell lässt sich noch um weitere Bestandteile erweitern, von denen die folgenden genannt seien:

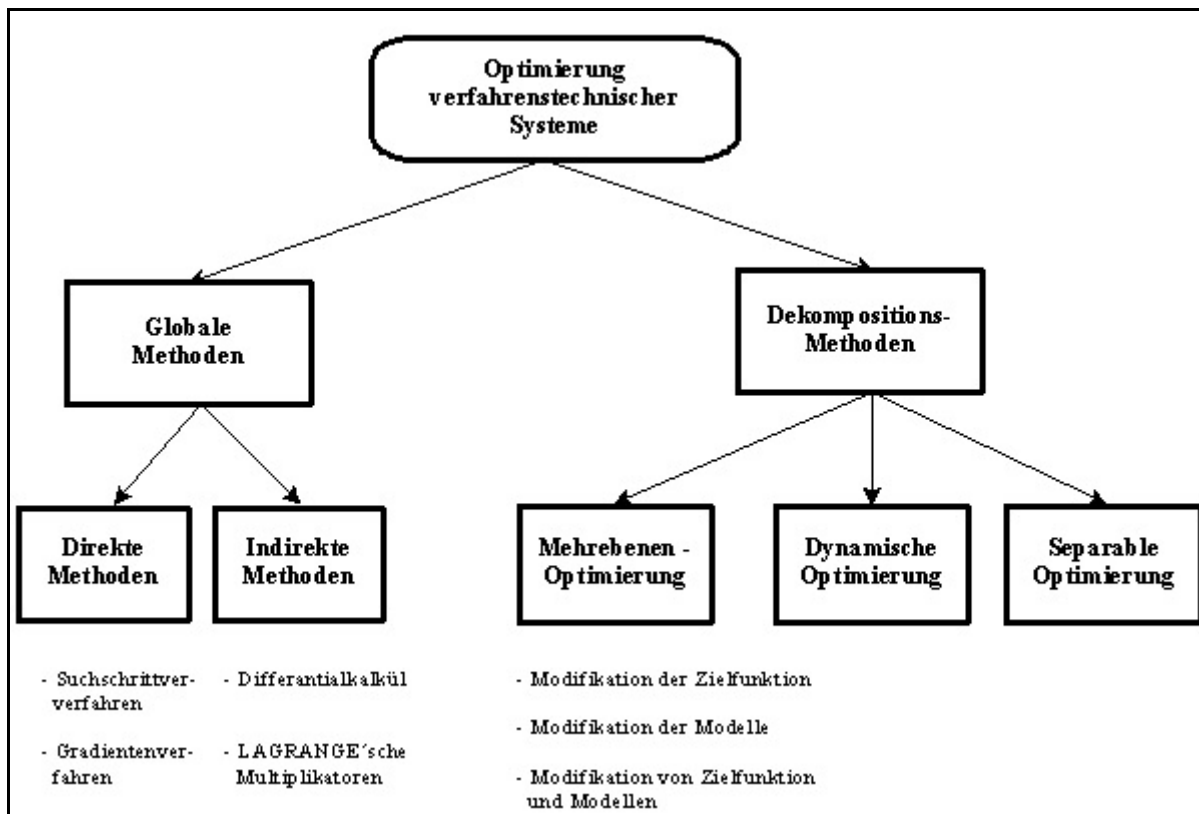
- Lohnkosten,
- Reparatur- und Instandhaltungskosten,
- Kosten für Ausfall- und Stillstandszeiten.

Die zuletzt aufgeführten Kostenbestandteile sind dann von Bedeutung, wenn auch das Ausfall- bzw. das Verfügbarkeitsverhalten eines Systems mit in die Bewertung einbezogen werden muss. Auch diese Kostenbestandteile sind mit technischen Entscheidungsvariablen verbunden.

### 3.3. Optimierungsmethoden

#### 3.3.1. Eine Übersicht

Im folgenden Bild ist eine Übersicht zu den Optimierungsmethoden für verfahrenstechnische Systeme gegeben; die dargestellten Boxen stehen jeweils für eine größere Gruppe von konkreten Methoden:



#### □ *Charakterisierung der Lösungsmethoden nach der Lösungsstrategie*

Die Lösungsverfahren lassen sich unter dem Aspekt der Lösungsstrategie in zwei Gruppen einteilen:

- *Globale Methoden*  
Die Lösung des Problems erfolgt ohne Berücksichtigung der Problemstruktur (Lösung "im ganzen"). Der Aufwand wächst (in der Regel) exponentiell mit der Dimension des Problems. In diese Gruppe gehören die klassischen Methoden der Differentialrechnung (Extremwertaufgaben) und der daraus abgeleiteten Methoden. Diese Methoden werden im Folgenden als bekannt vorausgesetzt. Behandelt werden dagegen die direkten Methoden.
- *Dekompositionsmethoden*  
Das komplexe Optimierungsproblem wird in leichter zu lösende Teilprobleme zerlegt. Der Aufwand wächst bei Dekompositionsmethoden in der Regel linear mit der Dimension des Problems. Die Teilprobleme werden mit globalen Methoden gelöst. Die Dekomposition in Teilprobleme erfordert neben den Lösungsverfahren für die Teilprobleme noch ein Koordinationsverfahren, das den globalen Lösungsprozess steuert.

### □ **Charakterisierung der Lösungsmethoden nach der Berücksichtigung der Nebenbedingungen**

Die Lösungsverfahren lassen sich auch unter dem Aspekt der Berücksichtigung der Nebenbedingungen klassifizieren; es sind drei Gruppen zu berücksichtigen:

- *Methoden für die Lösung unbeschränkter Probleme*  
Die Anwendbarkeit dieser Methoden setzt voraus, dass das zu lösende Problem so modifiziert wurde, dass Nebenbedingungen nicht mehr explizit zu berücksichtigen sind. Das ist immer dann gegeben, wenn nur Nebenbedingungen in Gleichungsform berücksichtigt werden müssen und diese durch Substitution in die Zielfunktion eingesetzt werden können. Im Folgenden werden ausgewählte Methoden für unbeschränkte Probleme behandelt.
- *Transformationsmethoden zur Überführung beschränkter Probleme in unbeschränkte*  
Diese Methoden führen ein Problem mit Nebenbedingungen auf ein unbeschränktes Problem zurück, indem sie eine neue Zielfunktion konstruieren. Als besonders wichtig sind folgende Methoden hervorzuheben:
  - Methode der LAGRANGESchen Multiplikatoren  
Diese Methode ist dann heranzuziehen, wenn Nebenbedingungen in Gleichungsform zu berücksichtigen sind (s. Mathematik-Unterlagen des Grundstudiums). Diese Methode wird im Folgenden Anwendung finden.
  - Methoden der Straffunktionen  
Diese Methoden, die die Nebenbedingungen durch geeignet konstruierte Strafterme in die Zielfunktion aufnehmen, sind sowohl für die Berücksichtigung von Nebenbedingungen in Gleichungsform als auch in Ungleichungsform geeignet. Allerdings sind diese Methoden in der Regel mit erheblichen numerischen Schwierigkeiten verbunden.
- *Methoden für die Lösung beschränkter Probleme*  
Diese Methoden sind dann heranzuziehen, wenn die Nebenbedingungen in Gleichungs- oder Ungleichungsform explizit zu berücksichtigen sind. Diese Methoden sind in der nachfolgend angegebenen Literatur zu finden; sie werden im Folgenden nicht behandelt (s. hierzu Lehrveranstaltung „Simulation & Optimierung“ im Vertiefungsblock *Verfahrensautomatisierung*).

### □ **Spezielle Literatur**

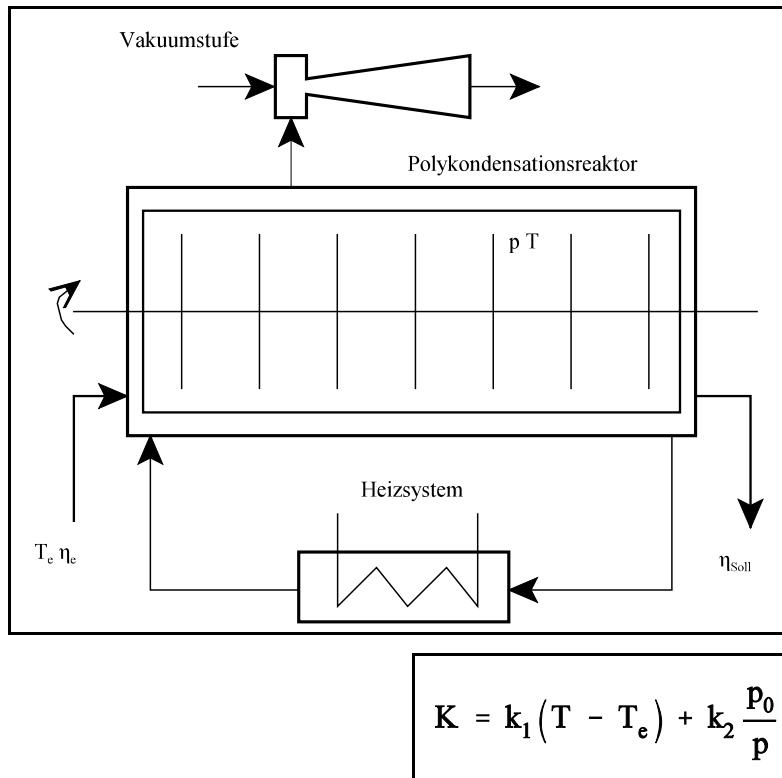
Richter, C.  
“Optimierungsverfahren und BASIC-Programme”  
Akademie-Verlag, Berlin 1988.

Papageorgiou, M  
“Optimierung“  
R. Oldenbourg Verlag, München, 1991.

Spellucci, P  
„Numerische Verfahren der nichtlinearen Optimierung“  
Birkhäuser-Verlag, Basel, 1993

## 3. Übung

Für die im folgenden Bild dargestellte Verfahrensstufe (Polykondensationsstufe in einem Verfahren zur Herstellung von Polyesterseide) ist der Arbeitspunkt so zu bestimmen, dass die



spezifischen Betriebskosten minimiert werden.

Im Folgenden wird davon ausgegangen, dass die Verfahrensstufe mit konstantem Durchsatz betrieben wird. Die Eingangsviskosität und die Drehzahl des Rührwerks sind ebenfalls konstant.

Aus wirtschaftlicher Sicht wurde das durch die folgende Funktion zu beschreibende Modell für die (auf die Zeit bezogenen) Betriebskosten ermittelt:

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

- $T_e$  Eintrittstemperatur der Schmelze in die Polykondensationsstufe
- $T$  Temperatur im Reaktor
- $p$  Druck im Reaktor
- $p_0$  Unterer Grenzwert für den Druck im Reaktor
- $k_1, k_2$  Spezifische Betriebskosten für das Heizsystem und die Vakuurstufe

Durch experimentelle Prozessanalyse wurde ein empirisch-statistisches Prozessmodell (s. 6./7. Übung im Fach Prozessanalyse und Versuchsplanung) ermittelt, das unter den beschriebenen Prozessbedingungen die folgende Form annimmt:

$$\eta_a = a_0 + a_1 T + a_2 T^2 + a_3 p$$

Das Optimierungsproblem ist unter Berücksichtigung der folgenden Nebenbedingungen zu lösen:

$$\begin{aligned} \eta_a &= \eta_{\text{Soll}} \\ p &> p_0 \\ T &< T_{\text{Grenz}} \end{aligned}$$

**Es sind folgende Teilaufgaben zu lösen:**

2. Die Linien konstanter Zielfunktion (Höhenlinien) in der p-T-Ebene sind zu skizzieren. Wie kann der optimale Betriebspunkt in dieser Darstellung gefunden werden? Wie lassen sich die Nebenbedingungen, denen die Lösung genügen muss, in dieser Darstellung berücksichtigen?
3. Das Optimierungsproblem ist als ein Problem mit Nebenbedingungen in Gleichungsform zu behandeln.
4. Das Problem ist numerisch durch ein Suchschrittverfahren zu lösen. Dafür ist eine Strategie zur Schrittweitensteuerung zu entwickeln.

Die Problemparameter sind der folgenden Tabelle zu entnehmen:

Parameter	Wert	Maßeinheit
$k_1$	1.3	€ / h K
$k_2$	52	€ / h
$p_0$	150	Pa
$T_{\text{Grenz}}$	290	°C
$a_0$	-55.286	
$a_1$	0.4026	1 / °C
$a_2$	$-7.221 \cdot 10^{-4}$	°C <sup>-2</sup>
$a_3$	$-7.084 \cdot 10^{-4}$	1 / Pa
$T_e$	270	°C
$\eta_{\text{Soll}}$	0.63	

### 3.3.2. Suchschrittverfahren

#### □ *Allgemeine Eigenschaften der Suchschrittverfahren*

Die Suchschrittverfahren gehören zur Gruppe der globalen, direkten Optimierungsmethoden. Für die Bestimmung des Optimums ziehen diese Verfahren nur die Berechnung der Zielfunktion heran. Auf der Basis der berechneten Zielfunktionswerte variieren die Verfahren die Entscheidungsvariablen nach unterschiedlichen Strategien. Gemeinsam ist allen Suchschrittverfahren, dass folgende Parameter als Startinformationen festgelegt werden müssen:

- Es ist eine Anfangsnäherung für den Vektor der Entscheidungsvariablen festzulegen.
- Es ist weiterhin eine Anfangsnäherung für den Schrittweiten-Vektor festzulegen. Die Suchschrittverfahren unterscheiden sich auch bezüglich der Behandlung des Schrittweiten-Vektors im Verlauf der Suche.
- Es ist eine Abbruchbedingung für den Suchprozess festzulegen. Hierfür gibt es folgende Möglichkeiten:
  - ◆ Wenn zwei aufeinander folgende Suchschritte sich bezüglich der Zielfunktionswerte weniger als eine vorgegebene Schranke  $\varepsilon$  unterscheiden, wenn also gilt:

$$|Z(\underline{x}_{i+1}) - Z(\underline{x}_i)| < \varepsilon$$

so wird die Suche abgebrochen.

- ◆ Wenn der Abstand zwischen zwei aufeinander folgenden Suchschritten im Raum der Entscheidungsvariablen kleiner als eine vorgegebene Schranke  $\varepsilon$  wird, wenn also gilt:

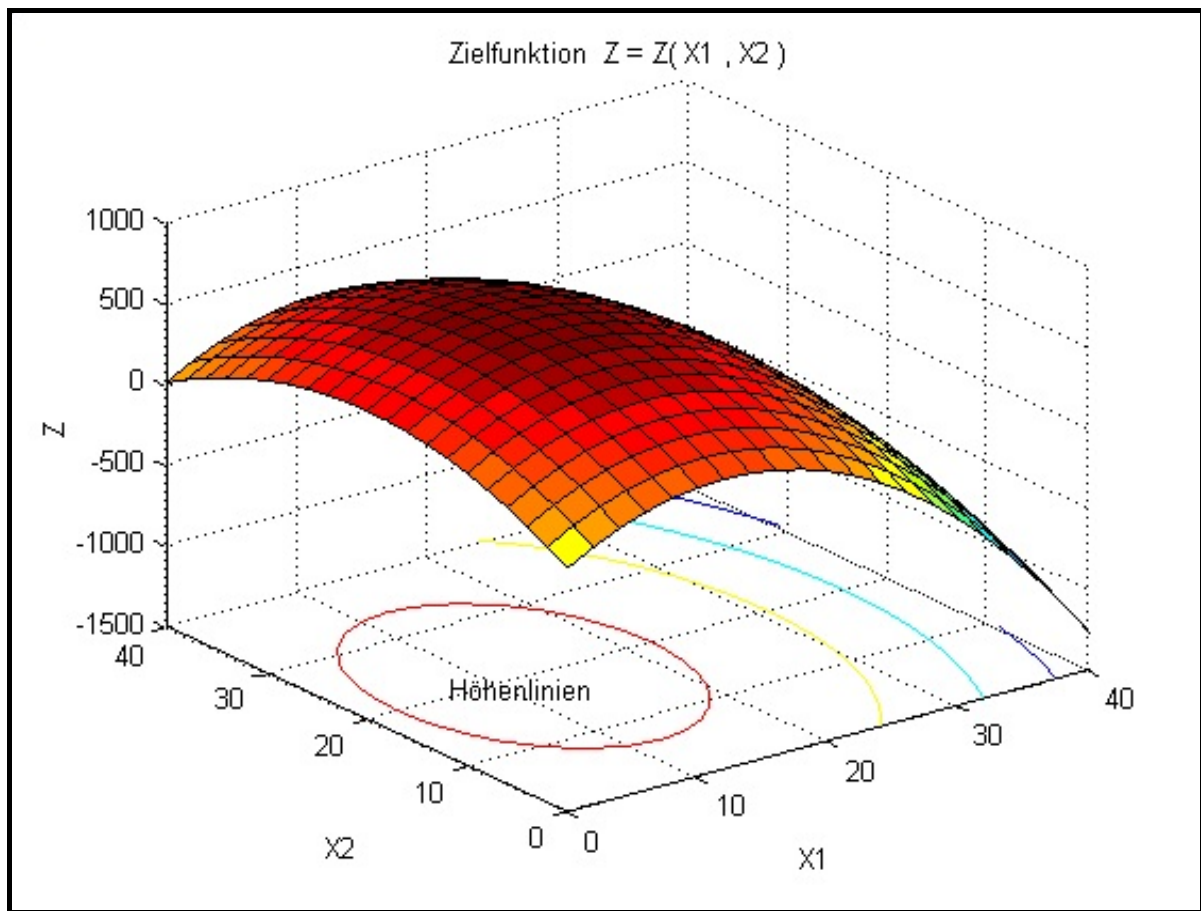
$$\|\underline{x}_{i+1} - \underline{x}_i\| < \varepsilon$$

so wird die Suche abgebrochen.

- ◆ Jede Bedingung für sich führt bei bestimmten Verläufen der Zielfunktionen zu Fehlentscheidungen bezüglich des Abbruchs der Suche, d. h., die Suche wird abgebrochen, obwohl das Optimum noch gar nicht erreicht wurde. Die konjunktive Verknüpfung beider Bedingungen liefert eine Abbruchbedingung, die die Schwierigkeiten der Teilbedingungen vermeidet.

Im folgenden werden die Suchschrittverfahren für eine Zielfunktion beschrieben, die von zwei Entscheidungsvariablen  $x_1$  und  $x_2$  abhängen soll. Außerdem wird angenommen, dass das Minimum der Zielfunktion gesucht wird.

Die grafische Darstellung der Suchschrittverfahren müsste in einer 3D-Darstellung erfolgen. Da das sehr aufwendig ist, wird von der Darstellung der Zielfunktion durch ihre *Höhenlinien* in der  $x_1, x_2$  - Ebene Gebrauch gemacht. Die Höhenlinien sind Projektionen der Linien für ausgewählte Zielfunktionswerte in die Ebene der Entscheidungsvariablen. Diese Darstellung stellt die Grundlage für die Beschreibung der Suchschrittverfahren dar. In der folgenden Abbildung ist der Zusammenhang zwischen der Zielfunktion in 3D-Darstellung und den Höhenlinien zu sehen.



### □ *Rastersuchverfahren*

Das Rastersuchverfahren läuft in folgenden Schritten ab:

1. Wähle Rasterbereiche  $h_i$  und Rasterschrittweiten  $\Delta x_i$  für alle  $x_i$  ( $i=1..m$ ). Die Anzahl der Rasterpunkte ergibt sich dann aus

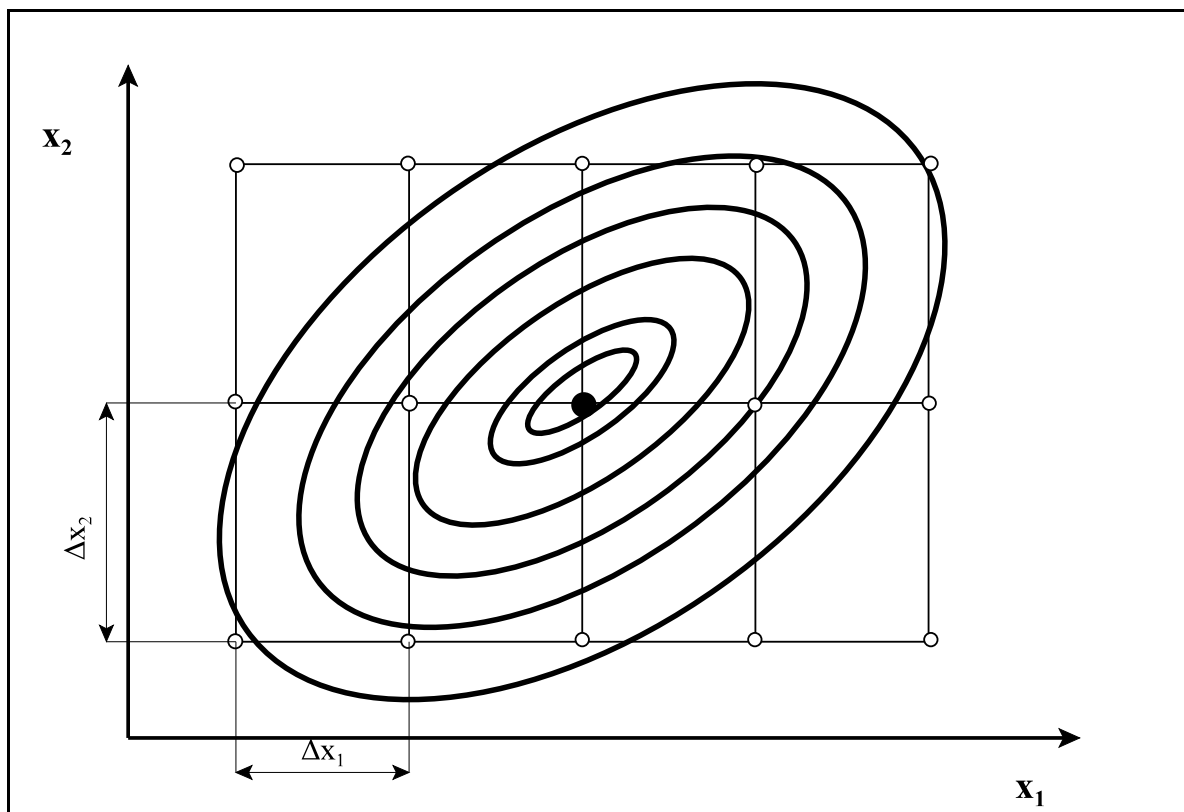
$$n_{\text{RASTER}} = \prod_{i=1}^m \left( 1 + \frac{h_i}{\Delta x_i} \right) \quad h_i \text{ sei ganzzahliges Vielfaches von } \Delta x_i$$

2. Berechne die Zielfunktionswerte für alle Rasterpunkte.
3. Die optimale Lösung wird aus der Bedingung

$$f(\underline{x}_{\text{opt}}) = \min_{j=1}^{n_{\text{RASTER}}} f(\underline{x}_j) \quad \text{bzw.} \quad \underline{x}_{\text{opt}} = \arg \left( \min_{j=1}^{n_{\text{RASTER}}} f(\underline{x}_j) \right)$$

bestimmt.

Das folgende Bild veranschaulicht das Verfahren für zwei Entscheidungsvariable:



Vorteil des Verfahrens: Einfache Realisierung (Implementierung).  
 Nachteil des Verfahrens: Hoher Aufwand an Zielfunktionsberechnungen.

#### □ *Achsenparallele Suche ( GAUSS-SEIDEL-Verfahren)*

Bei diesem Suchschrittverfahren wird das Extremum durch zyklisch umlaufende eindimensionale Suche in jeweils einer Entscheidungsvariablen-Richtung gesucht.

Das Verfahren läuft in folgenden Schritten ab:

1. Wähle Startpunkt  $\underline{x}_0$ . Lege eine Genauigkeitsschranke  $\varepsilon$  fest.
2.  $k:=1$  (Start eines Suchzyklus)
3. Bestimme das Minimum der Zielfunktion in  $x_k$ . Die  $x_j$  ( $j = 1, \dots, k-1, k+1, \dots, m$ ) bleiben unverändert. Diese Aufgabe ist mit einem geeigneten Verfahren der eindimensionalen (achsenparallelen) Suche zu lösen.
4. Ist  $k=m$  ?  
Nein:  $k:=k+1$ ; fortsetzen mit 3.  
Ja: Fortsetzen mit 5.

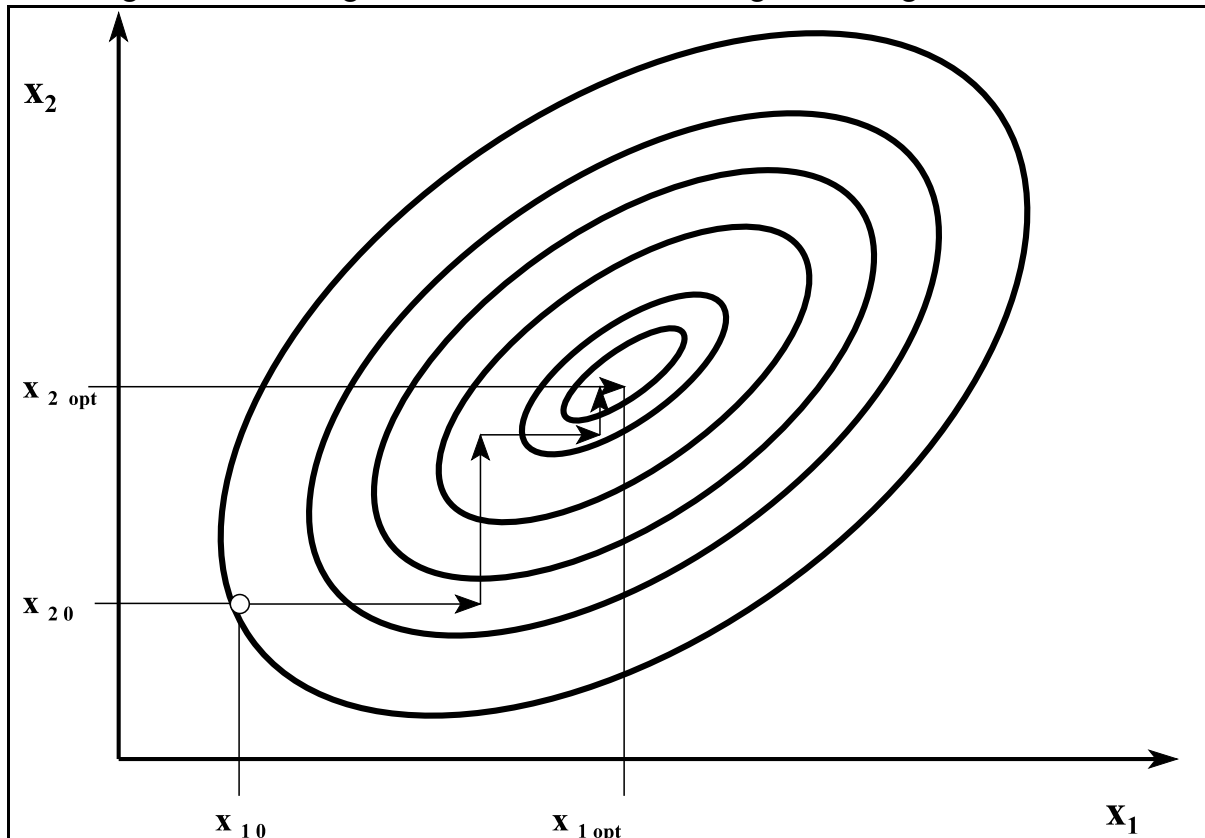
5. Gilt für die Veränderung der Zielfunktion zwischen Beginn und Ende eines Suchzyklus

$$| Z_{\text{ende}} - Z_{\text{anfang}} | < \varepsilon ?$$

Nein: Starte neuen Suchzyklus; fortsetzen mit 2.

Ja: **ABBRUCH**

In der folgenden Abbildung ist der Ablauf des Verfahrens grafisch dargestellt:



#### ■ *Eindimensionale Suchverfahren mit Schrittweithalbierung*

Für die Suche parallel zu den Koordinatenachsen benötigt man ein Verfahren der eindimensionalen Suche. Es stehen hierfür mehrere Verfahren zur Auswahl. Im Folgenden wird das eindimensionale Suchverfahren mit Schrittweithalbierung beschrieben.

Das Verfahren läuft in folgenden Schritten ab:

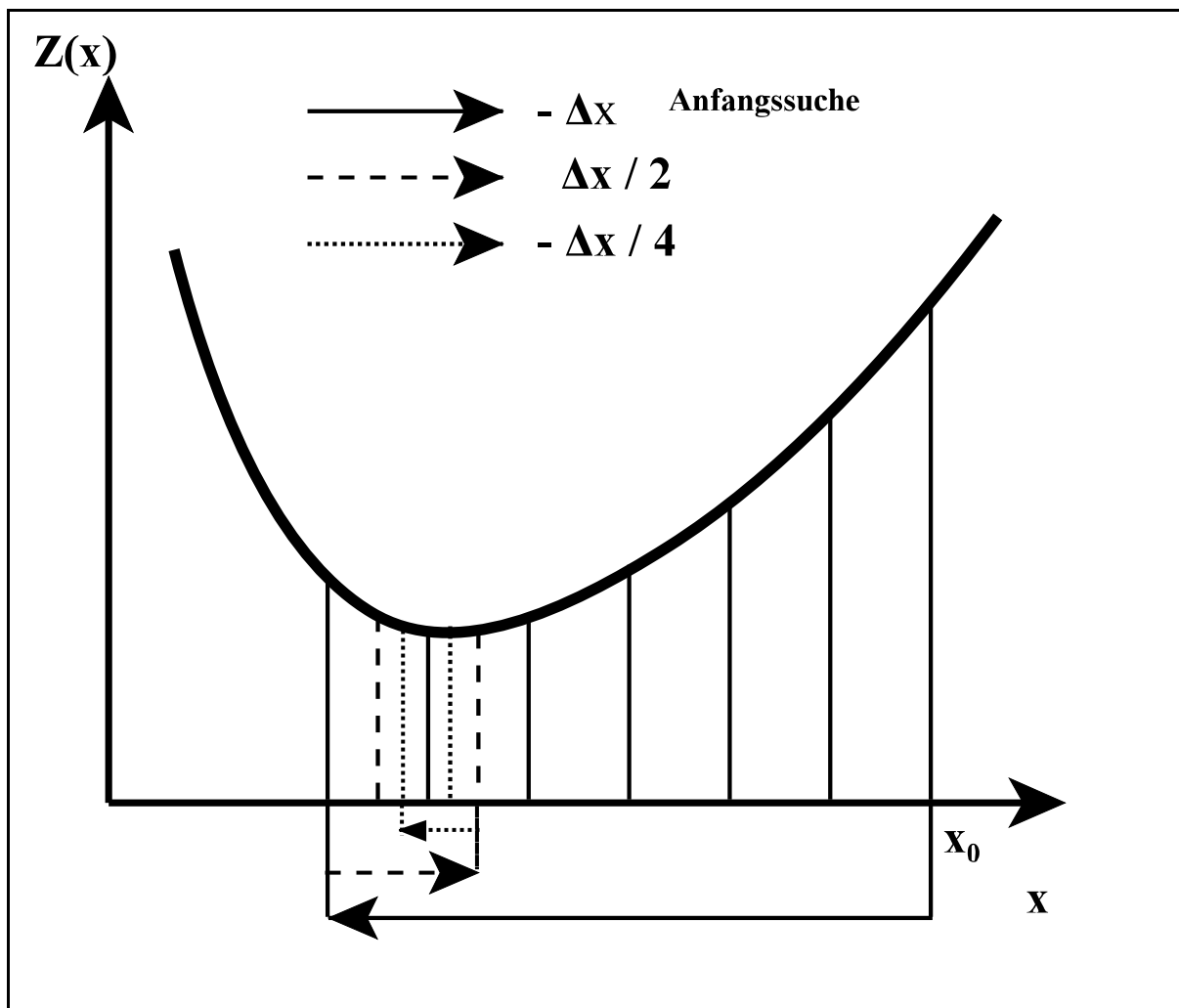
1. Festlegung des Startpunktes und der Schrittweite.
2. Entscheidung über die Suchrichtung.
3. Suche mit konstanter Schrittweite, solange  $Z(x_{i+1}) < Z(x_i)$ .

4. Umkehr der Suchrichtung und Halbierung der Schrittweite, wenn gilt  $Z(x_{i+1}) > Z(x_i)$ . Für die Schrittweite gilt dann

$$\Delta x := - \frac{\Delta x}{2}$$

5. *Abbruchtest*: Gilt  $|\Delta Z(x)| < \epsilon_z$  **und/oder**  $|\Delta x| < \epsilon_x$ , so ist die Suche abzurechnen.  
Ist das nicht der Fall, so ist mit 3. fortzusetzen.

Im folgenden Bild ist der Ablauf des Verfahrens graphisch dargestellt:



## □ Simplex-Verfahren

### ► Definitionen

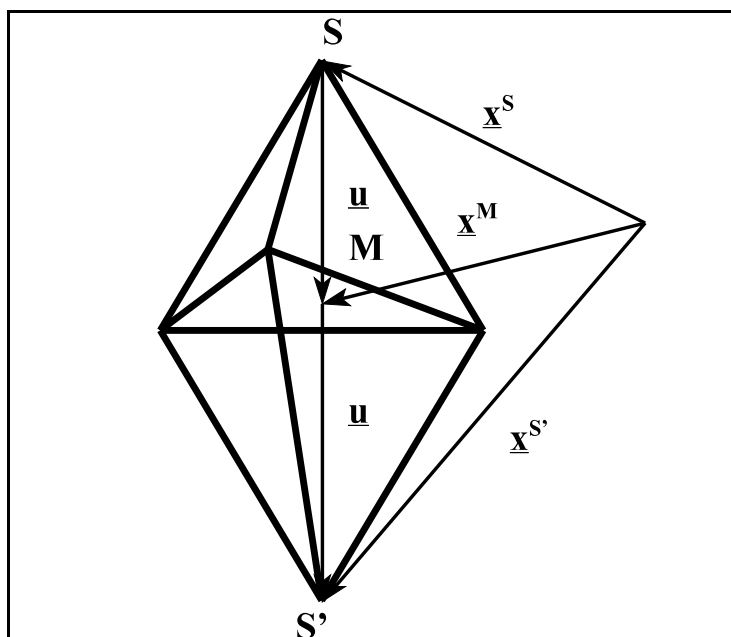
**Simplex:** Konvexes Vieleck im m-dimensionalen Raum (m-Anzahl der Entscheidungsvariablen), das (m+1) Eckpunkte hat. Jeder Eckpunkt ergibt sich als Schnittpunkt von m Hyperebenen.

**Regulärer Simplex:** Ein Simplex, bei dem die Abstände zwischen den (m+1) Punkten alle gleich lang sind.

Beispiele: Ebene            Gleichseitiges Dreieck  
3D-Raum            Regulärer Tetraeder

### ► Spiegelung eines Simplex-Punktes an der "gegenüberliegenden Fläche"

Im dreidimensionalen Raum lässt sich die Spiegelungsoperation wie folgt darstellen:



Für die Vektoren gilt:

$$\underline{x}^M = \underline{x}^S + \underline{u}$$

$$\underline{u} = \underline{x}^M - \underline{x}^S$$

$$\underline{x}^{S'} = \underline{x}^M + \underline{u}$$

Damit folgt

$$\underline{x}^{S'} = 2 \underline{x}^M - \underline{x}^S \quad (1)$$

Diese Beziehungen lassen sich für m Dimensionen verallgemeinern.

Im folgenden wird der m-dimensionale Fall betrachtet. Es werde der Punkt mit dem Index j gespiegelt. Für die Koordinaten der Projektion M dieses Punktes auf die gegenüberliegende Simplexfläche gilt:

$$\underline{x}^M = \frac{1}{m} \sum_{i=1, i \neq j}^{m+1} \underline{x}_i = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m+1} \underline{x}_i - \frac{1}{m} \underline{x}_j \quad (2)$$

Wenn man (2) in (1) einsetzt und beachtet, dass der Punkt j und der Punkt S jeweils den zu spiegelnden Punkt kennzeichnen, so folgt für die Koordinaten des gespiegelten Punktes  $\underline{x}'_j$ :

$$\mathbf{x}'_j = \frac{2}{m} \sum_{i=1}^{m+1} \mathbf{x}_i - \left( 1 + \frac{2}{m} \right) \mathbf{x}_j$$

► *Ablauf:*

1. Festlegung des Startsimplex. Der Startsimplex ist durch Position und Kantenlänge gekennzeichnet. Für die Anwendung eines regulären Simplex müssen die Variablen geeignet normiert werden.
2. Bestimmung der Zielgrößenwerte für die  $(m+1)$  Punkte des Startsimplex.
3. Spiegelung des "schlechtesten" Punktes (Punkt mit dem größten oder kleinsten Ziel-funktionswert im Simplex). Ist der durch Spiegelung konstruierte Punkt der schlechteste im neuen Simplex, so ist die Spiegelung mit dem "zweitschlechtesten" zu wiederholen.
4. Ist ein Punkt über eine bestimmte Anzahl von Spiegelungszyklen nicht gespiegelt worden?

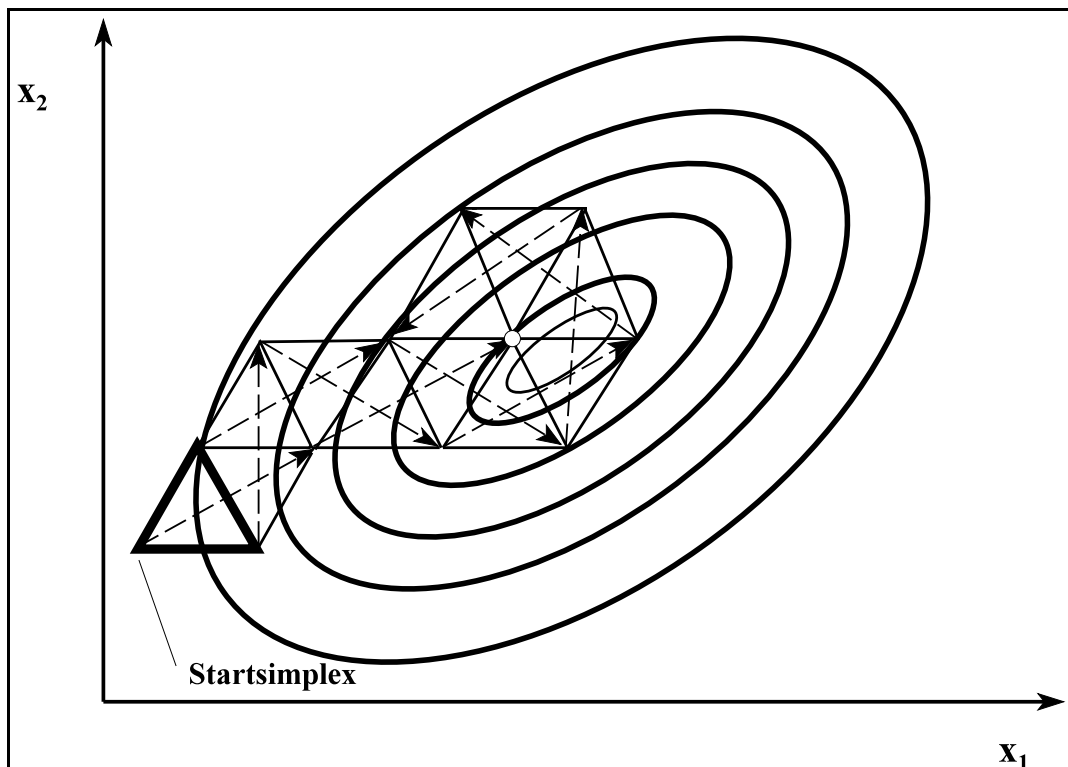
Nein: Fortsetzen mit 3.

Ja: **ABBRUCH**

*Erläuterung:* Wenn ein Punkt über eine (von der Dimension  $m$  des Problems abhängige) Anzahl von Spiegelungszyklen nicht gespiegelt wird, so "rotiert" der Simplex um diesen Punkt. Das ist ein Zeichen dafür, dass mit dem gewählten Simplex keine weitere Verbesserung der Suche nach dem Optimum erreicht werden kann. Für diese kritische Zyklenanzahl gilt folgende empirisch gefundene Beziehung:

$$N_{\text{krit}} > 1.65 m + 0.05 m^2$$

► *Grafische Darstellung*



### 3.3.3. Gradientenverfahren

#### □ Vorbemerkungen

Im Gegensatz zu den bisher behandelten Suchschrittverfahren wird bei den im folgenden zu behandelnden globalen Suchverfahren die Suchrichtung so gewählt, dass sie näherungsweise der Richtung des steilsten Abstiegs (das ist die negative Gradienten-Richtung) folgt. Es ist somit erforderlich, diese Richtung zu bestimmen.

Der Gradient der Zielfunktion ist wie folgt definiert:

$$\nabla Z = \mathbf{grad} Z = \frac{\partial Z}{\partial x_1} \mathbf{e}_{x_1} + \frac{\partial Z}{\partial x_2} \mathbf{e}_{x_2} + \dots + \frac{\partial Z}{\partial x_m} \mathbf{e}_{x_m} = \sum_{i=1}^m \frac{\partial Z}{\partial x_i} \mathbf{e}_{x_i} =$$

$$= \begin{bmatrix} \frac{\partial Z}{\partial x_1} \\ \frac{\partial Z}{\partial x_2} \\ \dots \\ \frac{\partial Z}{\partial x_m} \end{bmatrix}$$

Die  $\mathbf{e}_{x_i}$  ( $i = 1..m$ ) bezeichnen die Einheitsvektoren in den Richtungen der  $x_i$ .

Für die Berechnung der Komponenten des Gradienten-Vektors gibt es drei Möglichkeiten:

- Die partiellen Ableitungen werden analytisch bestimmt.
- Die partiellen Ableitungen werden durch Differenzenquotienten angenähert. Der „vorde-  
re Differenzenquotient“ ist wie folgt definiert:

$$\frac{\partial Z}{\partial x_k} \approx \frac{Z(x_1, x_2, \dots, x_k + \Delta x_k, \dots, x_m) - Z(x_1, x_2, \dots, x_k, \dots, x_m)}{\Delta x_k} \quad k = 1 \dots m$$

- Die Zielfunktion wird durch eine Funktion, deren Ableitungen analytisch berechnet werden können, lokal approximiert (s. BOX-WILSON-Verfahren)

Es ist eine zusätzliche Abbruchbedingung zu berücksichtigen. Da im Extremum  $\nabla Z = \mathbf{0}$  gelten muss, kann man fordern, dass gilt

$$||\nabla Z|| = \sqrt{\sum_{i=1}^m \left( \frac{\partial Z}{\partial x_i} \right)^2} < \text{eps}$$

□ *Verfahren des steilsten Abstiegs*

► *Ablauf:*

1. Wahl eines Startpunktes  $\underline{x}_0$ , Vorgabe der Abbruchgenauigkeit  $\varepsilon$ .  $i:=1$ .
2. Bestimme das Minimum der Zielfunktion in negativer Gradientenrichtung. Der Schrittweitenparameter  $\alpha_{\min}$  wird nach folgender Bedingung ermittelt:

$$\alpha_{\min} = \arg [\min_{\alpha} Z(\underline{x}_i - \alpha \nabla Z(\underline{x}_i))] ]$$

Für die Lösung dieser Aufgabe wird ein Verfahren der *eindimensionalen Suche* angewandt.

3. Ist die Abbruchbedingung

$$\|\nabla Z(\underline{x}_i)\| < \varepsilon$$

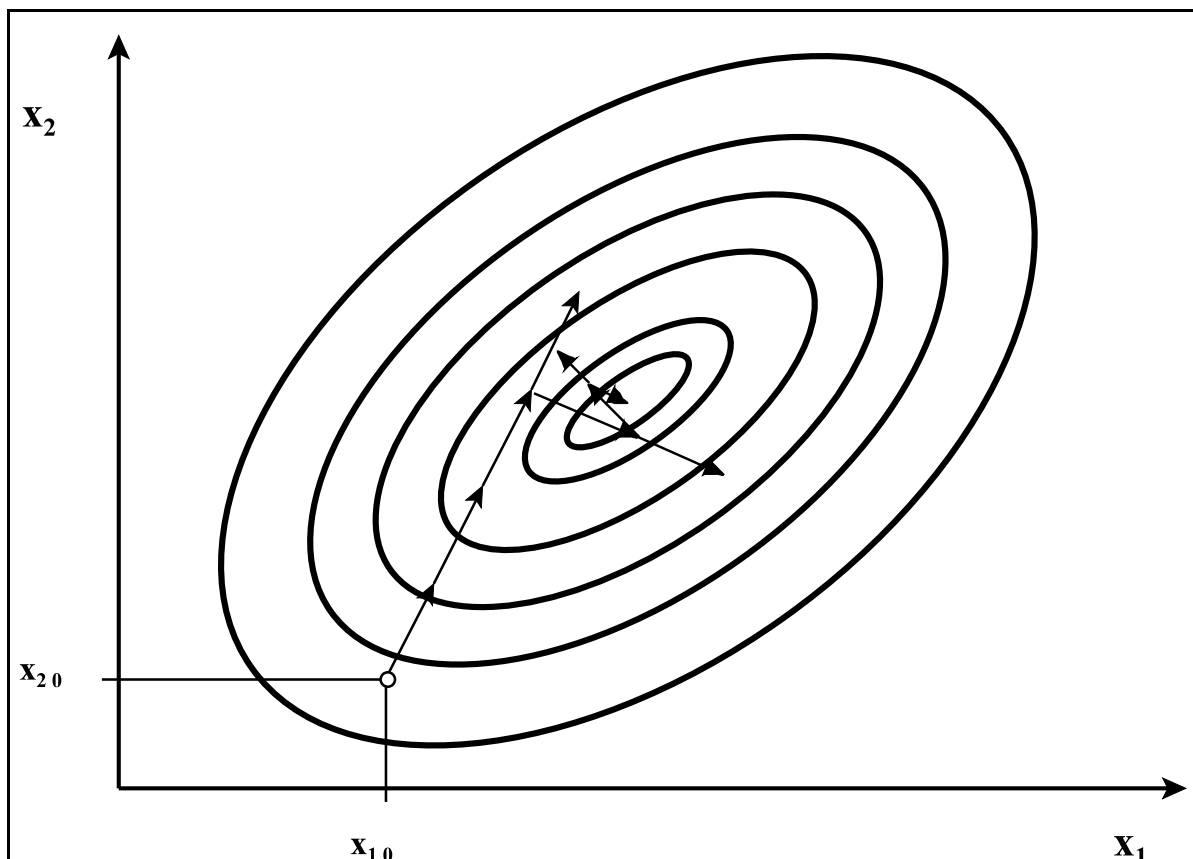
erfüllt?

Ja: ABBRUCH

Nein: Fortsetzung mit 4.

4. Bestimme Ausgangspunkt des nächsten Suchzyklus:  $\underline{x}_{i+1} = \underline{x}_i - \alpha_{\min} \nabla Z(\underline{x}_i)$   
 $i:=i+1$ ; setze mit 2. fort.

► *Grafische Darstellung:*



### □ BOX-WILSON-Verfahren

#### ► Vorbemerkungen:

Für den Fall, dass der Gradient der Funktion  $Z(\underline{x})$  nicht explizit gegeben ist ( das ist beispielsweise der Fall, wenn die Funktion nur durch Experimente für ausgewählte Punkte bestimmt werden kann), müssen Näherungsbeziehungen herangezogen werden.(s. o.). Bei dem im Folgenden beschriebenen BOX-WILSON-Verfahren geht man den folgenden Weg:

Es wird für die Zielfunktion  $Z(\underline{x})$  eine einfache, lokale Näherung ermittelt, für die die analytische Bestimmung der Komponenten des Gradienten-Vektors möglich ist. Die lokale Näherung ergibt sich durch TAYLOR-Entwicklung der Zielfunktion um eine Entwicklungsstelle  $\underline{x}^0$ . Diese lokale Näherung ist damit hinreichend genau nur in der Nähe der Entwicklungsstelle zur "Navigation" in Gradientenrichtung anwendbar. Nach Ausführung eines Schrittes in Gradientenrichtung wird der sich so ergebende neue Punkt zur neuen Entwicklungsstelle. Durch wiederholte Bestimmung lokaler Näherungen und der darauf basierenden Ermittlung von Gradientenrichtungen kann man die Suche in Richtung des steilsten Abstieges annähern.

Diese Strategie muss noch durch die Ordnung des lokalen Modells spezifiziert werden. Im Falle des BOX-WILSON-Verfahrens arbeitet man mit dem *linearen Modell ohne Wechselwirkungen* (s. Lehrveranstaltung *Prozessanalyse und Versuchsplanung*).

#### ► Ablauf:

1. Wahl eines Startpunktes  $\underline{x}^0$ .  $i:=1$ .
2. Um den Zentrumspunkt  $\underline{x}_i^0$  wird ein vollständiger oder reduzierter Faktorenplan auf zwei Niveaus konstruiert und realisiert. Die Koeffizienten des linearen Modells

$$Z = \mathbf{b}_0 + \mathbf{b}_1 x_1 + \mathbf{b}_2 x_2 + \dots + \mathbf{b}_m x_m$$

werden bestimmt. Folgende Beziehung ist dafür anzuwenden:

$$\mathbf{b} = \left[ \mathbf{X}^T \mathbf{X} \right]^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y}$$

Für normierte Einflussgrößen ( in der Planmatrix  $\mathbf{X}$  stehen nur Kombinationen der Werte +1 und -1 ) vereinfacht sich diese Beziehung zu

$$\mathbf{b} = \frac{1}{n} \mathbf{X}^T \mathbf{y}$$

3. Bestimmung der Komponenten für die lokale Näherung des Gradienten. Diese ergeben sich für das oben eingeführte lokale Modell in einfacher Weise nach folgenden Beziehungen:

$$\mathbf{grad} Z = \nabla Z = \begin{bmatrix} \frac{\partial Z}{\partial x_1} \\ \cdot \\ \cdot \\ \frac{\partial Z}{\partial x_m} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{b}_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \mathbf{b}_m \end{bmatrix}$$

4. Haben sich die Vorzeichen aller Koeffizienten im Vergleich zum Schritt i-1 ( $i > 1$ ) genau umgekehrt?

Ja: **ABBRUCH**                      Nein: Fortsetzung mit 5.

5. Ausführung eines Schrittes in die näherungsweise bestimmte Richtung des steilsten Abstieges:

$$\mathbf{x}_{i+1}^0 = \mathbf{x}_i^0 - \alpha \nabla Z(\mathbf{x}_i^0) = \mathbf{x}_i^0 - \alpha \mathbf{b}_i$$

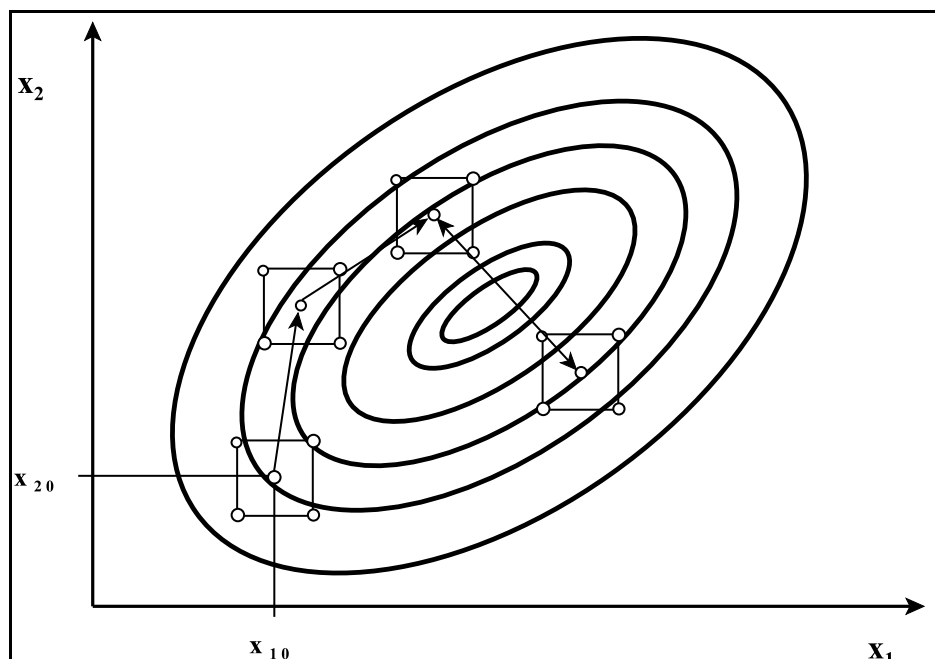
Für die praktische Ausführung dieser Neubestimmung des Zentrums des neuen Planes gibt es zwei Möglichkeiten:

- Es wird  $\alpha$  vorgegeben; die angegebene Beziehung kommt zur Anwendung.
- Es wird für eine beliebige Einflussgröße  $x_k$  der Zuwachs  $\Delta x_k = \alpha b_k$  vorgegeben. Die anderen  $\Delta x_j$  bestimmen sich dann nach

$$\Delta x_j = \Delta x_k \frac{b_j}{b_k} \Rightarrow \mathbf{x}_{i+1}^0 = \mathbf{x}_i^0 - \frac{\Delta x_k}{b_k} \mathbf{b}_i$$

$i := i+1$ ; mit 2. fortsetzen.

► *Grafische Darstellung*



### 3.3.4. Mutations-Selektions-Algorithmus

#### □ Vorbemerkungen

Die im Folgenden behandelten Algorithmen sind ihrem Wesen nach als Suchschrittverfahren einzuordnen, da sie das Optimum ausschließlich auf der Grundlage von Berechnungen der Zielfunktion bestimmen. Dass sie hier gesondert behandelt werden, ist der Tatsache zuzuschreiben, dass diese Algorithmen einen im Kern zufälligen Suchprozess verfolgen und dass aus der Sicht der systemverfahrenstechnischen Optimierung ihr Anwendungsumfang eingeschränkt zu sehen ist.

Durch die Adaption der biologischen Prozesse von Mutation und Selektion lassen sich robuste Suchverfahren konstruieren, die sich sehr einfach realisieren lassen und die für ein breites Spektrum von Optimierungsproblemen, vor allem aus den Bereichen Planung und Organisation, anwendbar sind. Da diese Algorithmen aber eine relativ große Anzahl von Zielfunktionsberechnungen erfordern, sind sie vor allem dann anwendbar, wenn die Zielfunktionsberechnung mit geringem numerischen Aufwand verbunden ist.

#### □ Mutations-Selektions-Algorithmus ohne Berücksichtigung von Nebenbedingungen:

1. Wähle eine Anfangsnäherung  $\underline{x}_0$ .
2. Verändere die aktuelle Näherung durch Mutation. Dabei wird in der Regel nach folgender Vorschrift verfahren:
 
$$\underline{x}_{\text{neu}} = \underline{x}_{\text{alt}} + \underline{\delta} d$$

$\underline{\delta}$  Vektor von Zufallszahlen  
 $d$  Schrittweitenfaktor
3. Falls  $Z(\underline{x}_{\text{neu}})$  **besser als**  $Z(\underline{x}_{\text{alt}})$  gilt, wird  $\underline{x}_{\text{neu}}$  gewählt, sonst wird  $\underline{x}_{\text{alt}}$  beibehalten.
4. Es ist mit 2. fortzufahren, falls das Abbruchkriterium noch nicht erfüllt ist.

#### □ Mutations-Selektions-Algorithmus mit Berücksichtigung von Nebenbedingungen:

1. Wähle eine Anfangsnäherung  $\underline{x}_0$ .
2. Verändere die aktuelle Näherung durch Mutation (s.o.).
3. Erfüllt die neue Mutation alle Nebenbedingungen? Wenn nicht, fahre mit 2. fort.
4. Ist die neue Mutation besser als die alte, so wähle diese.
5. Ist das Abbruchkriterium noch nicht erfüllt, fahre mit 2. fort.

Das Grundschema des Mutations-Selektions-Algorithmus lässt sich durch Erweiterungen so modifizieren, dass das "Festfahren" an lokalen Extrema vermieden werden kann (Sintflutalgorithmus, Simulated Annealing, usw.).

### □ Genetische Algorithmen

Genetische Algorithmen antizipieren den biologischen Prozess des „Survival of the fittest“ noch detaillierter als die bisher behandelten Mutations-Selektions-Algorithmen. Ein Genetischer Algorithmus besteht i. a. aus folgenden Schritten:

1. Es wird eine Anfangspopulation erzeugt.
2. Es werden weitere Individuen durch „genetische Operationen“ erzeugt:  
*Rekombination*  
Die Werte der Entscheidungsvariablen des neuen Individuums werden durch „Kreuzung“ von Individuen der Population bestimmt. Dafür werden als „Eltern“ solche Individuen gewählt, die einen besonders hohen Grad an Fitness (gemessen durch die konkrete Zielfunktion) besitzen.  
*Mutation*  
Die Werte der Entscheidungsvariablen werden durch eine zufällige Veränderung weiter modifiziert.
  - Das neue Individuum wird der Population hinzugefügt.
  - Wird das Abbruchkriterium erfüllt, wird das Individuum der Population mit dem höchsten Zielfunktionswert als Lösung ausgewählt.

### □ Ergänzende Literatur

Kinnebrock, W.

„Optimierung mit genetischen und selektiven Algorithmen“,  
R. Oldenbourg Verlag, München, 1994

Pohlheim, H.

„Evolutionäre Algorithmen“,  
Springer-Verlag, Heidelberg, 2000.

## 4. Übung

In dieser Übung werden die globalen Verfahren mit Hilfe eines Simulationsprogramms praktiziert. Dabei muss die Strategie für eine unbekannte Zielfunktion richtig ausgeführt werden. Das Programm kontrolliert die Handlungen des Bedieners und fordert im Falle von Fehlschritten zur Korrektur auf. Konkret werden folgende Verfahren zur Anwendung gebracht:

- Achsenparallele Suche,
- Simplexverfahren,
- BOX-WILSON-Verfahren.

In zusammenfassenden Ergebnisdarstellungen kann die verfolgte Strategie für die konkrete (zunächst unbekannte) Zielfunktion nachvollzogen werden.

### 3.4. Optimierung von Prozessgruppen in Grundschaltungen

Im Folgenden werden Optimierungsprobleme behandelt, die sich auf Prozessgruppen beziehen, die in Parallel- bzw. Reihenschaltung strukturiert sind.

#### 3.4.1. Prozessgruppe in Parallelschaltung

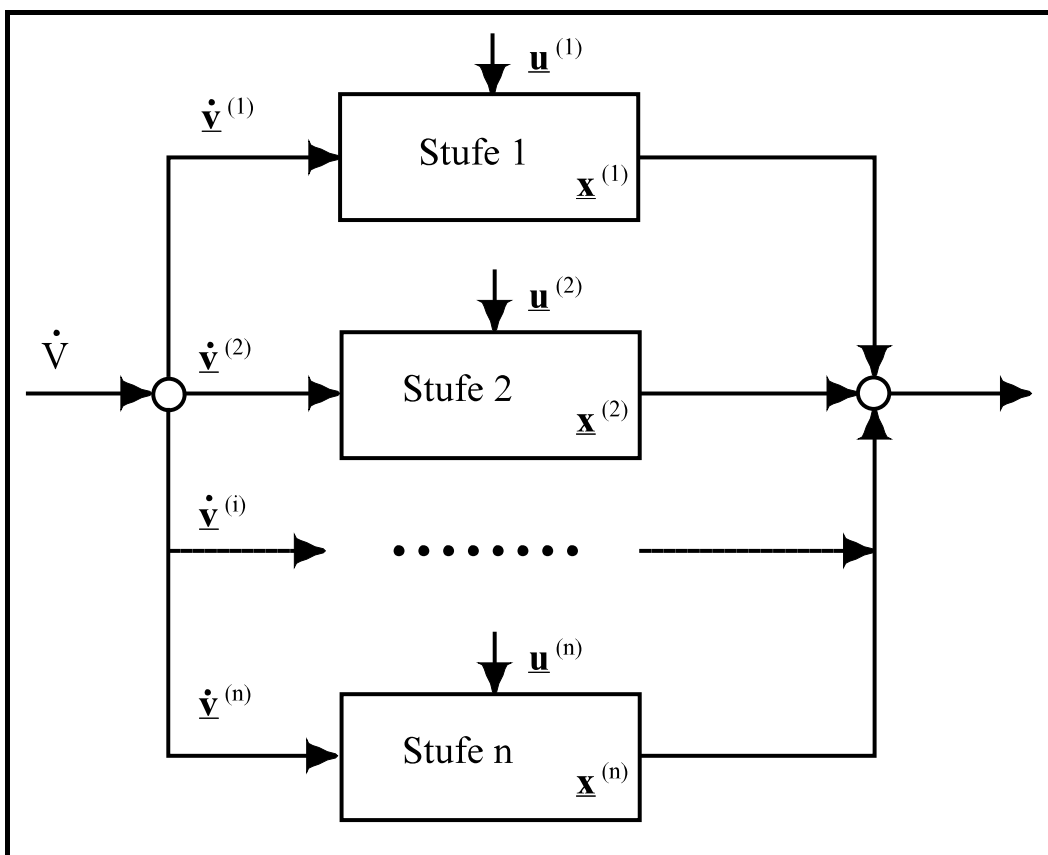
□ **Optimierungsziel:**

Ziel der Optimierung ist die optimale Verteilung eines Stromes auf parallele Teilsysteme, die entweder

- unterschiedliche Elemente enthalten (heterogene Parallelschaltung)
- oder gleichartige Elemente enthalten (homogene Parallelschaltung), die sich aber in verschiedenen Arbeitspunkten befinden.

□ **Vereinbarungen**

Die für die nachfolgenden Untersuchungen vorausgesetzte Systemstruktur ist im folgenden Bild dargestellt:



Es gelten die folgenden Bezeichnungen:

- $n$  Anzahl der parallelen Zweige
- $m$  Anzahl der stofflichen Komponenten
- $\dot{V}$  Zulaufstrom vor Verzweigung
- $\dot{V}_k$  Strom der Komponente  $k$  im Zulauf vor Verzweigung
- $\dot{v}_k^{(i)}$  Strom der Komponente  $k$  zum Zweig  $i$
- $\dot{\mathbf{v}}^{(i)}$  Stromvektor zum Zweig  $i$
- $\mathbf{x}^{(i)}$  Zustandsvektor des Zweiges  $i$
- $\mathbf{u}^{(i)}$  Steuervektor des Zweiges  $i$

Damit gelten folgende Beziehungen:

$$\dot{V} = \sum_{j=1}^m \dot{V}_j$$

$$\dot{V}_k = \sum_{i=1}^n \dot{v}_k^{(i)} \quad k=1,\dots,m$$

$$\mathbf{x}^{(i)} = \mathbf{T}^{(i)}(\dot{\mathbf{v}}^{(i)}, \mathbf{u}^{(i)}) \quad i = 1,\dots,n$$

Die letzte Beziehung beschreibt das Modellgleichungssystem. Dabei wird (vereinfachend!) angenommen, dass der Zustandsvektor explizit durch die Eingangsgrößen und die Steuergrößen dargestellt werden kann.

#### □ Formulierung der Zielfunktion

Es kann angenommen werden, dass sich die Gesamtzielfunktion (z.B. die Gesamtkosten) aus den Kosten für die Zweige (Teilkosten für die Elemente in den Zweigen) additiv überlagert, so dass gilt:

$$Z = \sum_{i=1}^n Z_i = \sum_{i=1}^n Z_i(\mathbf{x}^{(i)}, \mathbf{u}^{(i)})$$

Wenn man die Zustandsgrößen durch die Modellgleichungen ersetzt, folgt

$$Z^* = \sum_{i=1}^n Z_i^* = \sum_{i=1}^n Z_i^*(\dot{\mathbf{v}}^{(i)}, \mathbf{u}^{(i)})$$

Wenn man davon ausgeht, dass die Steuervektoren der Zweige festgelegt sind, so ergibt sich die Zielfunktion des reinen Verteilungsproblems wie folgt:

$$Z = \sum_{i=1}^n Z_i(\dot{\mathbf{y}}^{(i)}) \xRightarrow{\dot{\mathbf{y}}^{(0)}} \text{Opt.}$$

Die Komponenten der Eingangsstromvektoren sind damit die Entscheidungsvariablen des Optimierungsproblems. Da es darum geht, die Komponentenströme optimal auf die Zweige zu verteilen, nennt man dieses Optimierungsproblem auch das *Verteilungsproblem*.

### □ Lösung des Verteilungsproblems

Da es sich um ein Optimierungsproblem mit Nebenbedingungen in Gleichungsform handelt, kann die Methode der LAGRANGESchen Multiplikatoren angewandt werden, um eine unbeschränkte Problemformulierung zu gewinnen. Die LAGRANGE-Funktion wird dann zur neuen Zielfunktion.

#### ► Bildung der LAGRANGE-Funktion

Das Optimierungsproblem ist unter Einhaltung der folgenden Nebenbedingungen (Komponentenbilanzen) zu lösen:

$$\dot{V}_k - \sum_{i=1}^n \dot{v}_k^{(i)} = 0 \quad k = 1, \dots, m$$

Die Zielfunktion des Verteilungsproblems lässt sich damit zur LAGRANGE-Funktion ergänzen:

$$L = \sum_{i=1}^n Z_i(\dot{\mathbf{y}}^{(i)}) + \sum_{k=1}^m \lambda_k \left( \dot{V}_k - \sum_{i=1}^n \dot{v}_k^{(i)} \right)$$

Nach Umsortieren der Summenterme erhält man:

$$L = \sum_{k=1}^m \lambda_k \dot{V}_k + \sum_{i=1}^n \left( Z_i(\dot{\mathbf{y}}^{(i)}) - \sum_{k=1}^m \lambda_k \dot{v}_k^{(i)} \right)$$

Die Summenterme in (...) hängen jeweils nur von den Komponenten des Stromvektors für den Zweig i ab.

Diese Form der LAGRANGE-Funktion ist für die Lösung des Optimierungsproblems über die ersten Ableitungen besonders günstig.

#### ► Lösung des Problems

Die LAGRANGE-Funktion wird zunächst nach den  $\dot{v}_k^{(i)}$  differenziert; da die ersten Ableitungen

verschwinden müssen, ergeben sich damit die folgenden Gleichungen:

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{v}_k^{(i)}} = \frac{\partial Z_i(\dot{\mathbf{v}}^{(i)})}{\partial \dot{v}_k^{(i)}} - \lambda_k = 0 \Rightarrow \frac{\partial Z_i(\dot{\mathbf{v}}^{(i)})}{\partial \dot{v}_k^{(i)}} = \lambda_k \quad k=1,\dots,m ; i=1,\dots,n$$

Damit folgt

$$\frac{\partial Z_1(\dot{\mathbf{v}}^{(1)})}{\partial \dot{v}_k^{(1)}} = \frac{\partial Z_2(\dot{\mathbf{v}}^{(2)})}{\partial \dot{v}_k^{(2)}} = \dots = \frac{\partial Z_n(\dot{\mathbf{v}}^{(n)})}{\partial \dot{v}_k^{(n)}} \quad k = 1,\dots,m$$

Damit ergeben sich  $m \cdot (n - 1)$  Gleichungen. Da aber  $n \cdot m$  Unbekannte existieren, ist das Problem damit noch nicht gelöst.

Die Differentiation der LAGRANGE-Funktion nach den  $\lambda_k$  liefert die folgenden Gleichungen, die den ursprünglichen Nebenbedingungen entsprechen:

$$\dot{V}_k - \sum_{i=1}^n \dot{v}_k^{(i)} = 0 \quad k = 1,\dots,m$$

Damit ergeben sich  $m$  weitere Gleichungen, so dass jetzt in der Summe auch  $n \cdot m$  Gleichungen für die äquivalente Anzahl der Unbekannten existieren.

Das sich ergebende (i. a. nichtlineare) Gleichungssystem ist nun mit einem geeigneten Verfahren zu lösen.

*Hinweis:* Sehr häufig sind nicht die Komponentenströme die Entscheidungsvariablen, sondern lediglich die Summenströme, die den Zweigen zugeordnet werden. Dieser Fall wird in der 5. Übung behandelt.

## 5. Übung

In einer Verfahrensstufe **A** wird ein Ausgangsstoff **P** produziert. Dieser kann in den Prozessgruppen **B** und **C** zu einem Zwischenprodukt **H** umgesetzt werden, das in der Verfahrensstufe **D** weiterverarbeitet wird.

Die Prozessgruppe **B** besteht aus einer Kaskade von drei Rührkesselreaktoren mit je  $4 \text{ m}^3$  Reaktionsvolumen; die Prozessgruppe **C** besteht aus einem Rührkesselreaktor mit einem Reaktionsvolumen von  $12 \text{ m}^3$ .

Die Umsetzung  $\mathbf{P} \rightarrow \mathbf{H}$  erfolgt nach einer volumenbeständigen Reaktion erster Ordnung. Die Reaktionsgeschwindigkeitskonstante  $k$  hat einen Wert von  $0.5 \text{ h}^{-1}$ ; es kann eine isotherme Reaktionsführung angenommen werden.

Der Volumenstrom des Ausgangsstoffes **P** beträgt  $4 \text{ m}^3/\text{h}$ .

Wie ist die Produktion des Zwischenproduktes **H** auf die Prozessgruppen **B** und **C** aufzuteilen, damit der Strom des nicht umgesetzten Zwischenproduktes beim Eintritt in die Stufe **D** möglichst gering ist?

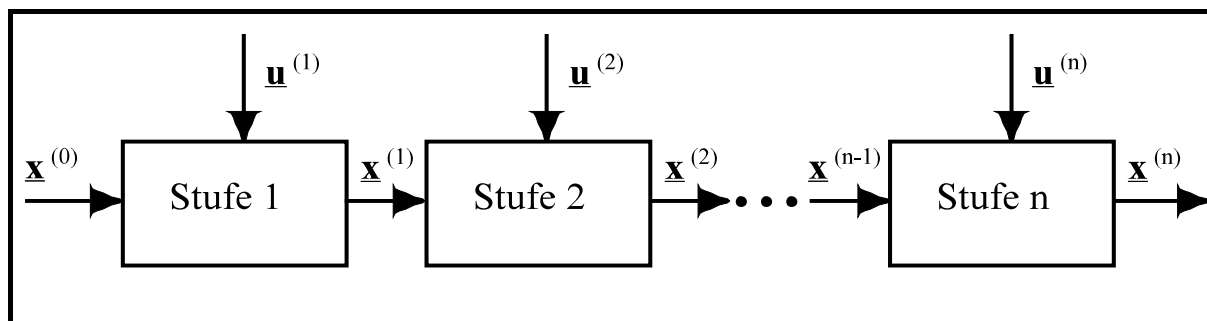
### 3.4.2. Prozessgruppe in Reihenschaltung

#### □ *Optimierungsziel*

Die optimalen „Steuerungen“ der in Reihe geschalteten Prozesseinheiten sind so zu bestimmen, dass das Ziel der Gruppe optimal erreicht wird. Damit ergibt sich ein zu lösendes Optimierungsproblem, dessen Dimension sich aus der Summe über die Anzahlen der Komponenten aller Steuervektoren der Stufen ergibt. Dieses i. a. hochdimensionale Problem soll durch Dekomposition in eine Reihe von Teilproblemen zerlegt werden, die jeweils eine geringere Dimension besitzen.

#### □ *Vereinbarungen*

Die für die nachfolgenden Untersuchungen vorausgesetzte Systemstruktur ist im folgenden Bild dargestellt:



Die Modellgleichungen für die Prozesseinheiten seien in folgender Form gegeben:

$$\underline{x}^{(i)} = \underline{f}^{(i)}(\underline{x}^{(i-1)}, \underline{u}^{(i)}) \quad \text{mit } i=1, \dots, n$$

$\underline{x}^0$  ist dabei der Eingangszustand der ersten Stufe

Dabei bezeichnen:

$\underline{x}^{(i)}$  Zustandsvektor der Stufe i.

$\underline{u}^{(i)}$  Steuervektor der Stufe i.

Die Zustandsgrößen ergeben sich wieder explizit aus den Eingangs- und den Steuergrößen.

#### □ *Formulierung der Zielfunktion*

Die Zielfunktion der Schaltung ergibt sich als Summe der Zielfunktionen für die Elemente:

$$Z = \sum_{i=1}^n Z_i(\underline{x}^{(i-1)}, \underline{u}^{(i)})$$

Für die nachfolgenden Betrachtungen ist es nützlich, folgende “reverse” Teilsummen einzuführen:

$$Z^{(n-j+1)} = \sum_{i=j}^n Z_i(\underline{x}^{(i-1)}, \underline{u}^{(i)})$$

So gilt für die ersten Teilsummen

$$Z^1 = Z_n(\underline{x}^{(n-1)}, \underline{u}^{(n)}) \quad Z^2 = Z_{n-1}(\underline{x}^{(n-2)}, \underline{u}^{(n-1)}) + Z_n(\underline{x}^{(n-1)}, \underline{u}^{(n)})$$

### □ *Systematische Substitution der Modellgleichungen*

Wenn man die Modellgleichungen systematisch ineinander einsetzt, so erhält man:

$$\underline{x}^{(n)} = \underline{f}^{(n)}(\underline{x}^{(n-1)}, \underline{u}^{(n)})$$

Wenn man in diese Beziehung

$$\underline{x}^{(n-1)} = \underline{f}^{(n-1)}(\underline{x}^{(n-2)}, \underline{u}^{(n-1)})$$

einsetzt, so erhält man

$$\underline{x}^{(n)} = \underline{f}^{(n)}(\underline{f}^{(n-1)}(\underline{x}^{(n-2)}, \underline{u}^{(n-1)}), \underline{u}^{(n)})$$

Wenn man diesen Prozess fortsetzt so folgt

$$\underline{x}^{(n)} = \underline{f}^{(n)}(\underline{f}^{(n-1)}(\dots \underline{f}^{(2)}(\underline{f}^{(1)}(\underline{x}^{(0)}, \underline{u}^{(1)}), \underline{u}^{(2)})..), \underline{u}^{(n)})$$

$\underline{x}^{(n)}$  ist also nur vom Eingangszustand und von den Steuerungen der Stufen abhängig:

$$\underline{x}^{(n)} = \underline{f}^*(\underline{x}^{(0)}, \underline{u}^{(1)}, \underline{u}^{(2)}, \dots, \underline{u}^{(n)})$$

Wenn man die optimalen Steuerungen gefunden hat, so folgt für den optimalen Zustand:

$$\underline{x}_{\text{opt}}^{(n)} = \underline{f}_{\text{opt}}^*(\underline{x}^{(0)})$$

Dieser Sachverhalt ist für die Lösung des Problems durch Dekomposition von wesentlicher Bedeutung.

### □ *Herleitung der BELLMANSchen Rekursionsformel*

Die für die Dekomposition des Problems heranzuziehende Methode wird als Dynamische Optimierung bezeichnet. Folgende Überlegungen liegen der Methode zu Grunde:

– Es gilt zunächst

$$Z_{\text{opt}}^{(n-1)} = Z_{\text{opt}}^{(n-1)}(\underline{x}^{(1)}) \quad \text{mit} \quad \underline{u}_{\text{opt}} = \left[ \underline{u}_{\text{opt}}^{(2)}, \dots, \underline{u}_{\text{opt}}^{(n)} \right]^T$$

Wenn die optimalen Steuerungen für die Stufen 2 , 3 , ... , n bekannt sind, so gilt offenbar:

$$Z_{\text{opt}}^{(n-1)} = \max_{\substack{\mathbf{u}^{(i)} \\ i=2,\dots,n}} Z^{(n-1)}(\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{u}^{(2)}, \dots, \mathbf{u}^{(n)})$$

- Die Reihenschaltung wird nun um das erste Element ergänzt. Zur bereits optimierten Teilschaltung ist der Zielfunktionsterm für das erste Element hinzuzufügen. Es folgt dann:

$$Z_{\text{opt}}^{(n)} = Z_{\text{opt}} = \max_{\mathbf{u}^{(1)}} \left[ Z_1(\mathbf{x}^{(0)}, \mathbf{u}^{(1)}) + Z_{\text{opt}}^{(n-1)}(\mathbf{x}^{(1)}) \right]$$

- In dieser Beziehung kann die Modellgleichung für die erste Stufe eingesetzt werden. Es folgt dann:

$$Z_{\text{opt}}^{(n)} = Z_{\text{opt}} = \max_{\mathbf{u}^{(1)}} \left[ Z_1(\mathbf{x}^{(0)}, \mathbf{u}^{(1)}) + Z_{\text{opt}}^{(n-1)}(\mathbf{f}^{(1)}(\mathbf{x}^{(0)}, \mathbf{u}^{(1)})) \right]$$

Das ist die BELLMANSche-Rekursionsformel der Dynamischen Optimierung (Programmierung). Das zu lösende Problem ist bei bekanntem Eingangszustand nur noch von den Steuergrößen der ersten Stufe abhängig.

#### □ **Schlussfolgerungen:**

- Die rekursive Anwendung der Rekursionsformel führt dazu, dass in jedem Schritt, beginnend mit der Stufe n und endend mit der Stufe 1, Optimierungsprobleme zu lösen sind, die jeweils nur die Steuergrößen der Stufe i als Entscheidungsvariable besitzen. Das Problem wird damit in n Teilprobleme zerlegt, die von geringerer Dimension sind als das vollständige Problem. Die Zielstellung zur Dekomposition des Problems wird damit erreicht.
- Die praktische Realisierung des Berechnungsverfahrens läuft in folgenden Schritten ab:
  - = *Rückwärtsrechnung:*  
Es werden die Teilprobleme, beginnend mit der n-ten Stufe, gelöst. Dabei erhält man die optimalen Steuerungen der Stufen als Funktionen der Eintrittszustände in die Stufen.
  - = *Vorwärtsrechnung:*  
Beginnend mit der ersten Stufe werden die Zustände in den Stufen berechnet, indem die optimalen Steuerungen und die Ausgangszustände der vorgelagerten Stufen in die Modellgleichungen eingesetzt werden.

## 6. Übung

In einer Kaskade idealer Rührkessel läuft eine volumenbeständige Reaktion erster Ordnung nach dem Reaktionsmechanismus  $A \rightarrow B$  ab. Es sollen folgende Annahmen erfüllt sein:

- Die Kaskade besteht aus  $n$  Reaktoren.
- Es kann isotherme Reaktionsführung angenommen werden. In allen Reaktoren kann somit die gleiche Temperatur  $T_R$  und demzufolge auch die gleiche Reaktionsgeschwindigkeitskonstante  $k$  angenommen werden.
- Die Austrittskonzentration  $c_{A_n}$  sei vorgegeben.
- Die Eintrittskonzentration in die Kaskade  $c_{A_0}$  ist ebenfalls vorgegeben.

Wie ist die mittlere Verweilzeit der Reaktanden auf die Kaskadenelemente aufzuteilen, damit die mittlere Gesamtverweilzeit in der Kaskade minimal wird.

Das Konzentrationsprofil für die optimale Verteilung ist zu bestimmen.



## 4. Verfahrensentwurf und Struktursynthese

### 4.1. Die Problemstellung

Der Entwurf eines stoffwandelnden Verfahrens ist ein komplexer Bearbeitungsprozess, der das Ziel verfolgt, ein verfahrenstechnisches System zu entwerfen, das aus definierten Rohstoffen die gewünschten Endprodukte in vorgegebener Spezifikation produziert und das diese Funktion im Sinne eines oder mehrerer Zielkriterien optimal erfüllt.

Es gibt unterschiedliche Ansätze zur Strukturierung des Verfahrensentwurfs als Folge von Bearbeitungsschritten<sup>1, 2</sup>. Gemeinsam ist aber allen Ansätzen, dass die Struktursynthese am Anfang des Entwurfsprozesses steht. Die Struktursynthese umfasst dabei sowohl die Festlegung der Kopplungen als auch die Auswahl der Prozesseinheiten. Die Auslegung der Apparate und die Optimierung der Prozessbedingungen schließen sich der Struktursynthese an. Allerdings kann die Bewertung des Gesamtsystems erst am Ende dieses Prozesses erfolgen, so dass die beschriebenen Schritte i. a. mehrfach zu durchlaufen sind, wobei in jedem Schritt die Struktur verändert wird.

Zusammenfassend kann man davon ausgehen, dass der Verfahrensentwurf in folgenden Schritten abläuft:

1. Die Systemfunktion ist zu definieren ( Rohstoffe, angestrebte Kapazitäten, Forderungen aus der Sicht des Umweltschutzes usw.)
2. Die Struktursynthese ist auszuführen.
3. Die Hauptabmessungen der Prozesseinheiten sind festzulegen. Dafür sind geeignete Simulationswerkzeuge zu nutzen.
4. Die Betriebsbedingungen sind zu optimieren. Dafür sind ebenfalls geeignete Simulationswerkzeuge einzusetzen. Die Rückkopplungen zum Schritt 3. sind zu beachten!
5. Wenn die optimale Funktion für das System in der festgelegten Struktur gefunden wurde, ist die Struktur zu verändern; es ist also mit Schritt 2. fortzusetzen. Dabei ist zunächst zu fragen, ob die Verbesserungen im Vergleich zur vorangegangenen Struktur signifikant ausfallen. Ist das nicht der Fall, so ist der Verfahrensentwurf zu beenden.

Für die Struktursynthese sind erst in jüngster Zeit systematische Methoden entwickelt worden; aber auch heute sind durchaus mehr oder weniger „intuitive“ Methoden im Einsatz, die auf der Basis von „Erfahrung“ und von Analogien zu plausiblen Strukturentwürfen führen. Im Sinne einer systematischen Struktursynthese können diese Ansätze als „Anfangsnäherungen“ betrachtet werden. Die Ursachen dafür, dass die systematischen Methoden der Struktursynthese noch

---

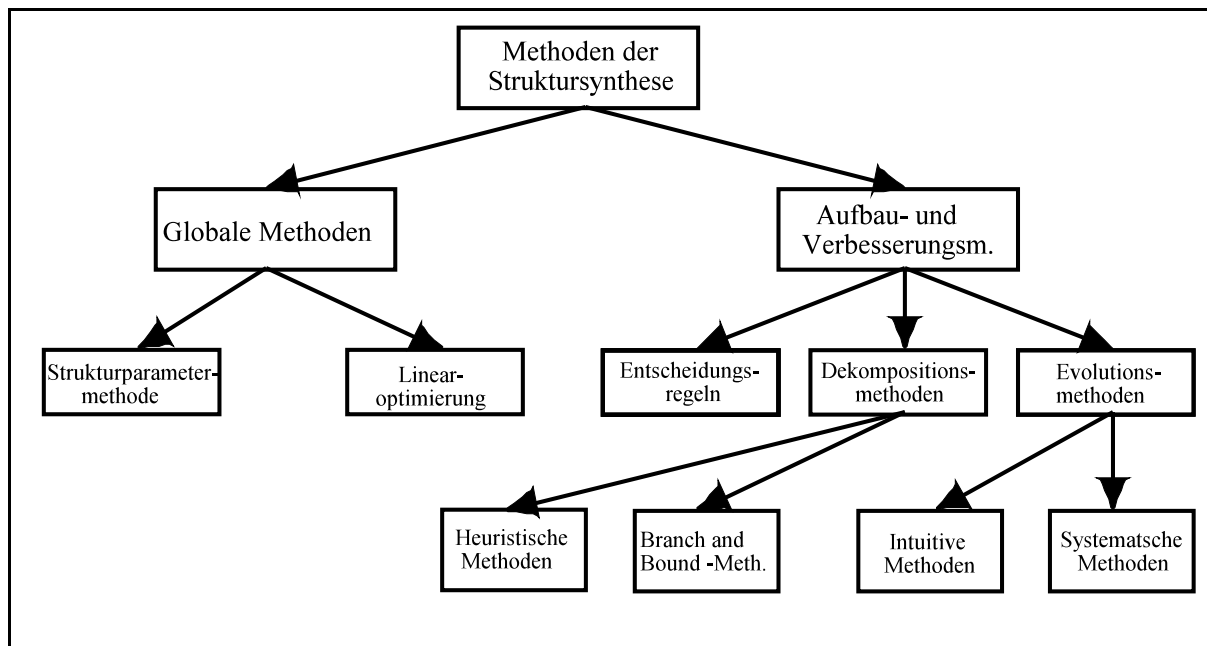
<sup>1</sup> KUSSI, J.; LEIMKÜHLER, H.-J.; PERNE, R. „Ganzheitliche Verfahrensentwicklung und -optimierung aus industrieller Sicht“, Chemie-Ingenieur-Technik 72 (2000) , Heft 11, S.1285.

<sup>2</sup>HARTMANN, K, [Hrsg.] „Analyse und Entwurf chemisch-technologischer Verfahren“, Akademie-Verlag, Berlin, 1985.

nicht überall in den Verfahrensentwurf Eingang gefunden haben, liegt zum einen daran, dass für die Prozesseinheiten mathematische Modelle hoher Präzision erforderlich sind und dass Algorithmen der Struktursynthese i. a. aufwendig in ihrer Implementierung sind.

#### 4.2. Eine Übersicht zu den Methoden der Struktursynthese

Die Verfahren der Struktursynthese lassen sich unter methodischen Aspekten wie folgt klassifizieren<sup>1</sup>:



Die einzelnen Methodengruppen lassen sich wie folgt charakterisieren:

- **Globale Methoden**

Die globalen Methoden lösen das Problem der Struktursynthese ohne weitere Dekomposition. Dabei entstehen hochdimensionale Optimierungsprobleme, die vom gemischt-ganzzahligen Typ sind, da die Kopplungsparameter i. a. nur die Werte 0 oder 1 annehmen können. Eine Lösung ist nur nach der Einführung von vereinfachenden Annahmen möglich.

- **Systematische Aufbau- und Verbesserungsmethoden**

Diese Methoden konstruieren die optimale Struktur schrittweise. Es werden systematische Optimierungsverfahren und die Erfahrungen des Verfahreningenieurs sinnvoll miteinander verbunden. Es sind Dekompositionsmethoden und Evolutionsmethoden zu unterscheiden. Bei den Dekompositionsmethoden geht man von einer Anfangsstruktur aus, die systematisch verbessert wird, während bei den Evolutionsmethoden eine solche Anfangsstruktur nicht vorausgesetzt wird.

---

<sup>1</sup> Die Darstellung folgt im wesentlichen: GRUHN, G. „Systemverfahrenstechnik II“, Verlag für Grundstoffindustrie, Leipzig, 1978.

*Dekompositionsmethoden* verfolgen (analog zu den Dekompositionsmethoden der Optimierung) gewisse Strategien der Zerlegung des Problems in einfacher zu lösende. Wie aus der Übersicht hervorgeht, gibt es zwei Teilstrategien:

- die heuristischen Methoden verfolgen das Ziel, die komplexe Aufgabenstellung in einfacher zu lösende Teilaufgaben zu zerlegen,
- die Branch and Bound - Methoden verfolgen das Ziel, den Lösungsraum in Teilbereiche zu zerlegen.

Die *Evolutionsmethoden* als zweite Gruppe der systematischen Aufbau- und Verbesserungsmethoden sind dadurch gekennzeichnet, dass die Struktur schrittweise verändert wird. Das kann auf der Basis heuristischer Regeln erfolgen oder durch die Lösung des Optimierungsproblems in mehreren Schritten, wobei die Sensitivität der Zielfunktion bezüglich der Strukturänderung für die schrittweise Verbesserung herangezogen wird.

Man kann die Methoden der Struktursynthese auch unter dem Aspekt der Synthese der charakteristischen Verfahrensstufen klassifizieren; dieser eher an den Anforderungen des praktischen Entwurfsprozesses orientierte Ansatz wird beispielsweise von HARTMANN<sup>1</sup> verfolgt. Dabei wird zunächst davon ausgegangen, dass sich der Prozess des Verfahrensentwurfs in die folgenden Schritte untergliedert:

1. Definition der Aufgabendaten.
2. Analyse der Reaktionswege.
3. Synthese der Verfahrensstufe für die Stoffumwandlung (Synthese des Reaktorsystems).
4. Synthese der Verfahrensstufen für die Stoffvorbereitung und die Stofftrennung.
5. Synthese der Verfahrensstufe zur Energieversorgung.
6. Simulation des dynamischen Verhaltens; Bewertung der An- und Abfahrprozesse; Korrekturen an Elementen und an der Struktur sind möglich.
7. Untersuchung der Verfügbarkeit / Zuverlässigkeit; Korrekturen an Elementen und an der Struktur sind möglich

Für die einzelnen Verfahrensstufen wird sich dabei i. a. ein Ablauf ergeben, wie er im Abschnitt 4.1 (S. 4-1) beschrieben wurde. Die Gliederung des Entwurfsprozesses für das Gesamtsystem in die Entwurfsprozesse der Verfahrensstufen hat aus methodischer Sicht zwei entscheidende Vorteile:

- Diese Gliederung stellt eine Dekomposition im Sinne der Zerlegung der Aufgabenstellung dar.
- Die Methoden sind klar umrissenen Aufgabenklassen zuzuordnen.

### 4.3. Ausgewählte Methoden der Struktursynthese

Im Folgenden werden beispielhaft Methoden der Struktursynthese vorgestellt. Dabei wird zunächst eine allgemein anwendbare globale Methode beschrieben; anschließend folgt eine auf

---

<sup>1</sup>HARTMANN u. a. : Quelle s. Fußnote 2 / Seite 4-1

die Stofftrennung ausgerichtete Methode zur Struktursynthese von Kolonnensystemen, die heuristische Regeln nutzt.

### 4.3.1. Strukturparametermethode

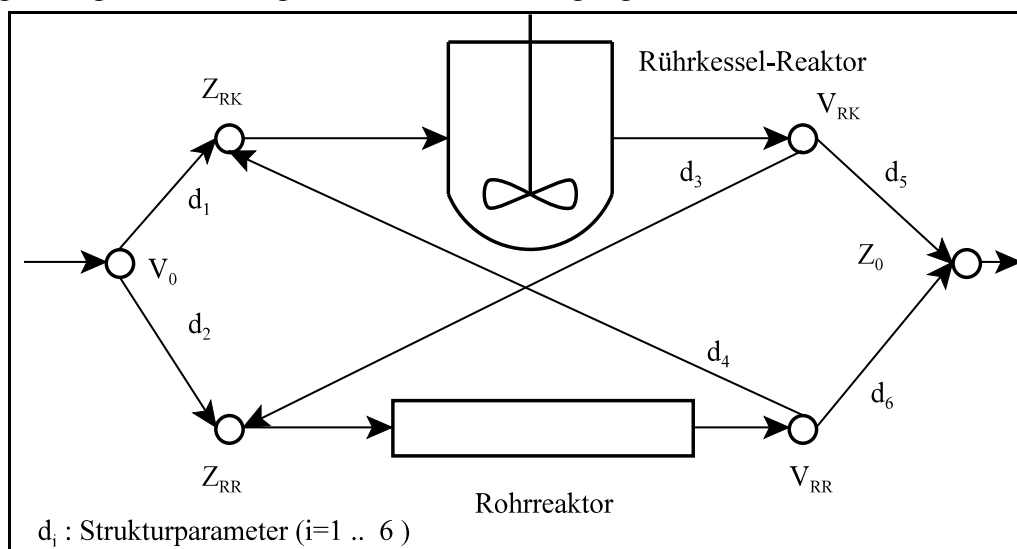
Diese Methode, die als globale Methode anzusehen ist, geht davon aus, dass alle signifikanten, funktionserfüllenden Strukturen bekannt sind. Diese Forderung ist i. a. nur auf der Basis der Erfahrungen des Entwurfsingenieurs sinnvoll zu erfüllen, da die formale Generierung aller Strukturvarianten i. a. mit dem Problem der „kombinatorischen Explosion“ verbunden ist. Heuristische Aspekte sind also auch bei dieser Methode zu berücksichtigen.

Die Methode umfasst die folgenden Schritte:

- ▶ Generierung aller signifikanten Strukturvarianten.
- ▶ Verbindung aller Varianten in einer Vereinigungsstruktur.
- ▶ Formulierung des Zielkriteriums und der Nebenbedingungen; Modellbildung für die Elemente.
- ▶ Lösung des sich ergebenden Optimierungsproblems unter Anwendung geeigneter Methoden.

Die *Vereinigungsstruktur* wird dadurch gebildet, dass man *Verteiler- und Zusammenführungsblöcke* in die Systemstruktur so einführt, dass die Ausgangsströme aller Elemente mit den Eingangsströmen anderer Elemente verbunden werden können. Damit werden die Parameter der Verteiler als neue Entscheidungsvariable in das Optimierungsproblem eingeführt; sie werden als die Strukturparameter bezeichnet. Ihre Bestimmung durch Lösungen des komplexen Optimierungsproblems ( es existieren i. a. noch weitere Entscheidungsvariablen ) stellt die eigentliche Struktursynthese dar. Die optimale Struktur ergibt sich entweder als eine der generierten Grundstrukturen oder als eine Kombination mehrerer dieser Teilstrukturen.

Im Folgenden soll die Vorgehensweise für die Ermittlung der optimalen Schaltung zweier Reaktoren, die aus einem idealen Rührkesselreaktor und einem idealen Rohrreaktor bestehen soll, erläutert werden. Dieses Beispiel wird in der Literatur für unterschiedliche Reaktionstypen ausführlich behandelt<sup>1</sup>; im Folgenden werden die wesentlichen Schritte ohne die Details der Lösungen dargestellt. Es folgt zunächst die Vereinigungsstruktur:



<sup>1</sup>S. z.B. HARTMANN u. a. / S. 158 ff.

Die Lösung des Problems erfolgt nun in folgenden Schritten:

- ▶ Es werden die Modellgleichungen für die beiden Reaktoren unter Berücksichtigung der jeweiligen Reaktion formuliert.
- ▶ Die Massebilanzen um die Zusammenführungen sind zu formulieren.
- ▶ Das Zielkriterium ist zu formulieren.
- ▶ Die Nebenbedingungen, denen die Strukturparameter genügen müssen, sind zu formulieren. I. a. haben diese die Form:  $0 \leq d_j \leq 1$  (j über alle Strukturparameter).
- ▶ Das Optimierungsproblem ist mit einer geeigneten Methode zu lösen.

Für den Fall, dass die Reaktion volumenbeständig und irreversibel nach m-ter Ordnung verläuft, werden sich je nach den Kosten für die Reaktoren die folgende Lösungstypen ergeben:

- Der Rührkesselreaktor wird als alleiniger Typ ermittelt, wenn er den deutlich geringeren Volumenpreis gegenüber dem Rohrreaktor besitzt.
- Die Entscheidung fällt zugunsten des Rohrreaktors aus, wenn dieser den deutlich geringeren Volumenpreis besitzt.
- Wenn die Volumenpreise beider Reaktortypen in der gleichen Größenordnung liegen, ergibt sich die Reihenschaltung beider Reaktoren als optimale Struktur. Die quantitative Lösung liefert hier eine klare Entscheidungshilfe, von welchem Preisverhältnis an die Reihenschaltung günstiger ist als der einzelne Reaktor. Die Folge der Reaktoren ist dabei abhängig von der Ordnung der Reaktion:
  - Reaktionsordnung  $m < 1$ : Der Rohrreaktor folgt dem Rührkesselreaktor.
  - Reaktionsordnung  $m = 1$ : Die Reihenfolge ist beliebig.
  - Reaktionsordnung  $m > 1$ : Der Rührkesselreaktor folgt dem Rohrreaktor.

#### 4.3.2. Struktursynthese einer Verfahrensstufe zur Stofftrennung

Die Anwendung heuristischer Regeln für die Struktursynthese ist eine Strategie von großer Bedeutung. Dabei wird man, wenn die Grundvoraussetzungen für die Modellbildung erfüllt sind, die Entwürfe mit geeigneten Simulationsprogrammen überprüfen und gegebenenfalls weiter (evolutionär) modifizieren.

##### □ *Problemformulierung*

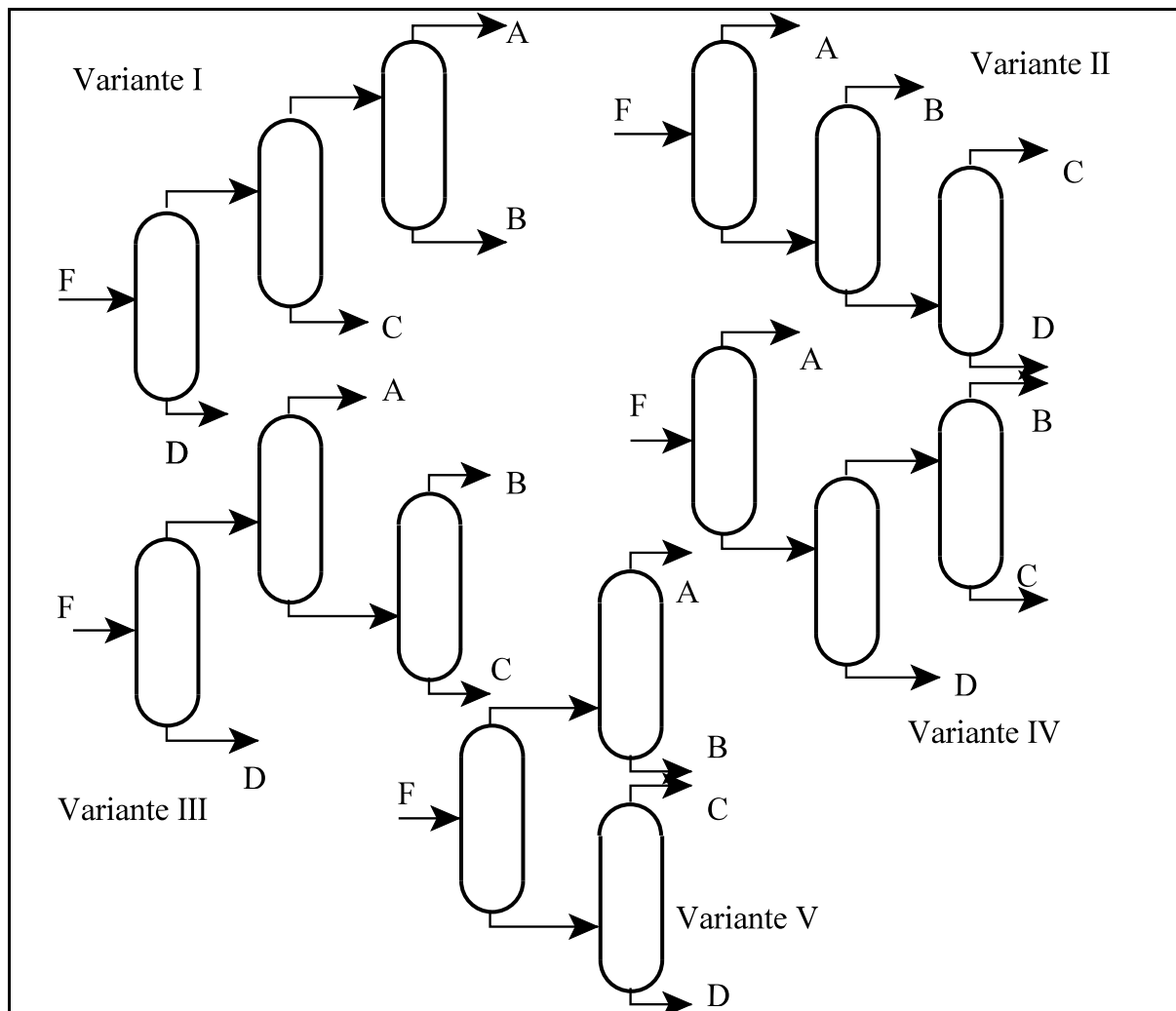
Die Zerlegung eines Stoffgemisches in n Komponenten soll durch Destillation erfolgen. Dabei wird im Folgenden nur der Fall der Hauptstromschaltung berücksichtigt. Für die Lösung des Trennproblems werden n-1 Destillationskolonnen benötigt. Für die Anzahl der möglichen Schaltungsvarianten folgt durch kombinatorische Überlegungen:

$$N_{\text{Varia}} = \frac{[2(n-1)]!}{(n-1)!n!}$$

In der folgenden Tabelle ist die Anzahl der Strukturvarianten der Anzahl der Komponenten gegenübergestellt:

n	3	4	5	6	7	8	9
$N_{\text{Varia}}$	2	5	14	62	132	429	1430

Für ein Gemisch F, das in die vier Komponenten A, B, C und D zerlegt werden soll, ergeben sich die folgenden fünf Struktur-Varianten für die Schaltung der drei Kolonnen:



Dieses Problem lässt sich auf der Basis eines leistungsfähigen Simulationsprogramms durch Variantenvergleich durchaus noch lösen. In dem diesen Abschnitt abschließenden Beispiel wird auf die dargestellten Strukturvarianten zurückgegriffen. Dabei ist zu beachten, dass die Bezeichnungen der Strukturvarianten und der Komponenten genau so gewählt werden, wie in der Abbildung.

Im Falle zunehmender Komponentenanzahl wächst aber die Zahl der Varianten sehr schnell an. Die möglichen Strukturen zu generieren ist dann bereits sehr aufwendig. Eleganter ist dann der Weg, über einen Satz geeigneter Regeln die Struktur nicht aus der Menge aller möglichen Strukturen zu selektieren, sondern die Struktur auf der Grundlage der heuristischen Regeln zu synthetisieren.

In der Literatur werden unterschiedliche Regelsätze, die sich durchaus widersprechen können und die demzufolge auch zu unterschiedlichen Ergebnissen führen, empfohlen<sup>1,2</sup>.

Wenn man die angebotenen Regelsätze einer vergleichenden Wertung unterzieht, so kristallisieren sich folgende „Hauptregeln“ heraus, die in irgendeiner Form in allen empfohlenen Regelsätzen enthalten sind:

1. Es ist nacheinander jeweils eine Komponente abzutrennen. Das ist die sogenannte *direkte Trennfolge*, die nur dann realisiert werden sollte, wenn die folgenden Regeln 2.-5. nicht anzuwenden sind.
2. Die Trennschnitte sind so zu legen, dass Kopf- und Sumpffractionen möglichst in gleichen Molmengen anfallen (äquimolare Trennung).
3. Die „schwierigen Trennaufgaben“ sind mit kleinen Mengen auszuführen. Vorher sind also die leicht abtrennbaren Komponenten abzutrennen.
4. Die thermisch instabilen und /oder korrosiv wirkenden Komponenten sind als erste abzutrennen.
5. Trennaufgaben, die ein großes Rücklaufverhältnis erfordern, sind zuletzt auszuführen.

### 4.3.3. Ein Beispiel

- **Problemdaten**

Es ist ein Gemisch zu trennen, das sich wie folgt zusammensetzt:

Komponente	Molstrom in kmol/h
Methanol	20.0
Ethanol	10.0
n-Propanol	10.0
n-Butanol	20.0

Für die Vergleichsrechnungen werden drei Kolonnen eingesetzt, die alle die folgenden Parameter aufweisen:

Theoretische Bodenzahl: 10  
Rücklaufverhältnis: 6

---

<sup>1</sup> Eine breite Übersicht bietet HARTMANN u.a., S. 168 ff (Quelle s. o.). In dieser Publikation werden auch Regeln angegeben, die sich auf die Auslegungsparameter (z. B. Kolonnendurchmesser) und die Wahl der Betriebsparameter (z. B. Rücklaufverhältnis) der Kolonnen beziehen.

<sup>2</sup> GRUHN u.a. (Quelle s. o.) , S. 175

- **Zielvorgaben**

Der Molanteil des Methanol im Methanol-Hauptstrom soll bei 0.9 liegen.  
Der Molanteil des Propanol im Propanol-Hauptstrom soll bei 0.7 liegen.

- **Auswahl der Strukturvarianten**

Die Zusammensetzung des Ausgangsgemisches legt es nahe den Trennschnitt zwischen Ethanol und Propanol zu legen; damit wäre die Regel 2. für die erste Kolonne anzuwenden. Das führt auf die Strukturvariante V (s. Abbildung S. 4-6).

Wenn man dagegen die Regel 1. anwendet, also die direkte Trennfolge favorisiert, gelangt man zur Strukturvariante II (s. Abbildung S. 4-6).

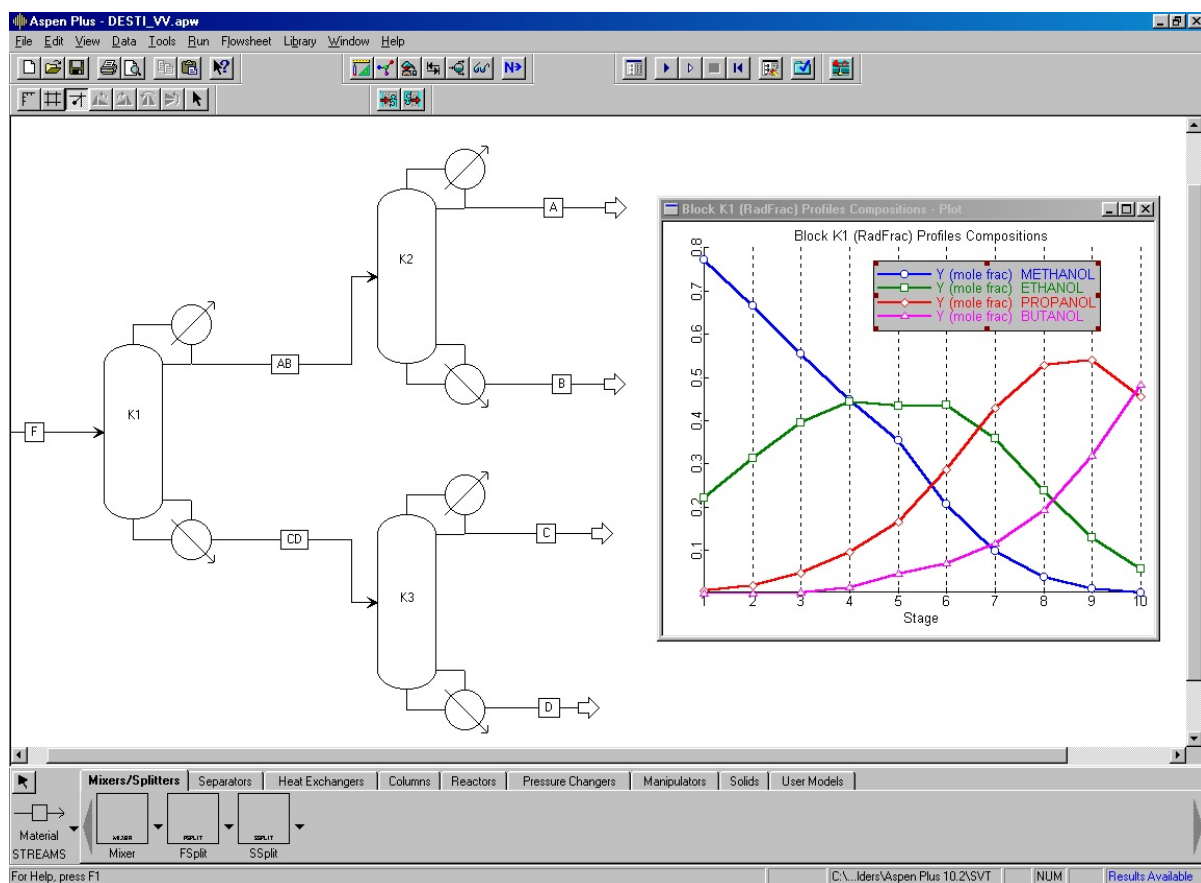
Für den Vergleich der Varianten wird die insgesamt notwendige Leistung für die Sumpfheizungen herangezogen. Diese Leistung, multipliziert mit der jährlichen Betriebsdauer und den spezifischen Energiekosten, steht für den wesentlichen Teil der Betriebskosten.

- **Variantenvergleich**

Beide Varianten wurden unter den getroffenen Voraussetzungen für die angestrebten Reinheiten mit dem Simulationsprogramm ASPEN PLUS nachgerechnet. Dabei ergaben sich die folgenden Resultate:

- ◆ **Strukturvariante V**

Unter ASPEN PLUS stellt sich das Problem wie folgt dar:



Neben der Struktur ist die grafische Darstellung der Konzentrationsprofile in der Kolonne K1 in diesem Bild enthalten.

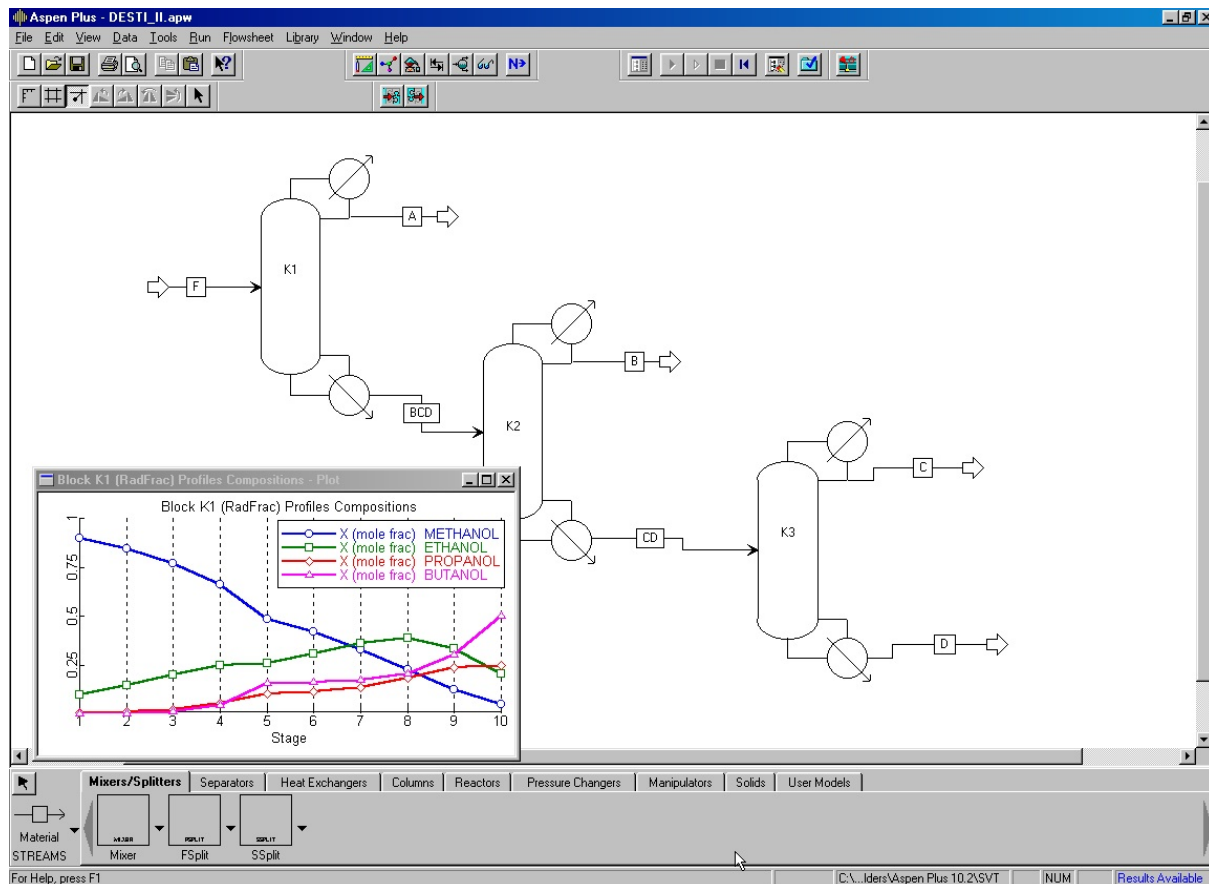
Das Simulationsprogramm liefert die folgenden Ergebnisse:

- ▶ Notwendige Heizleistung: 3000 kW
- ▶ Molare Kopf- und Sumpffzusammensetzungen für die Kolonnen:

Kolonne		Methanol	Ethanol	Propanol	Butanol
K 1	Kopf	0.666	0.313	0.020	0.000
	Sumpf	0.000	0.021	0.313	0.666
K 2	Kopf	0.900	0.010	0.000	0.000
	Sumpf	0.214	0.725	0.059	0.003
K 3	Kopf	0.007	0.162	0.700	0.131
	Sumpf	0.000	0.004	0.268	0.729

◆ Strukturvariante II

Unter ASPEN PLUS stellt sich das Problem wie folgt dar



Das Simulationsprogramm liefert die folgenden Ergebnisse:

- ▶ Notwendige Heizleistung: 2500 KW
- ▶ Molare Kopf- und Sumpfzusammensetzungen für die Kolonnen:

Kolonne		Methanol	Ethanol	Propanol	Butanol
K 1	Kopf	0.900	0.097	0.003	0.000
	Sumpf	0.047	0.202	0.249	0.502
K 2	Kopf	0.157	0.652	0.179	0.012
	Sumpf	0.000	0.009	0.279	0.712
K 3	Kopf	0.000	0.025	0.700	0.274
	Sumpf	0.000	0.000	0.037	0.963

#### ◆ *Bewertung und Auswahl*

Beide Varianten erfüllen die gestellten Anforderungen bezüglich der vorgegebenen Reinheiten (die entsprechenden Felder sind in den Tabellen hervorgehoben).

Die Variante II, die die direkte Trennfolge realisiert, liefert die günstigeren Ergebnisse bezüglich der Betriebskosten. Da ansonsten gleiche Kolonnentypen vorausgesetzt wurden, fallen Unterschiede in den festen Kosten nicht ins Gewicht. Außerdem ist festzustellen, dass bei der Variante II das Butanol deutlich schärfer abgetrennt wird als bei Variante V. Die größere Trennschärfe der Variante V bezüglich des Ethanol gegenüber Variante II fällt dagegen relativ gering aus.

Für eine Verfeinerung der Entscheidung müssen in weiteren Schritten die Betriebsparameter und auch die Auslegungsparameter der Kolonnen variiert werden.

## 7. Übung

### Beispiel für die optimale Gestaltung eines verfahrenstechnischen Systems

**Aufgabenstellung:** Die Stufenzahl einer Gleichstrom-Verdampferkaskade sowie die Parameter der Elemente der Kaskade (Verdampfer und Kondensator) sind so zu bestimmen, dass die jährlichen Gesamtkosten minimal werden.

**Bekanntes Daten:**

- $c_D$  Spezifische Dampfkosten
- $c_{KW}$  Spezifische Kühlwasserkosten
- $c_V$  Spezifische Verdampferkosten
- $c_K$  Spezifische Kondensatorkosten
- $d$  Jährliche Betriebsdauer
- $f_{FV}$  Jährliche Tilgungsrate der Investitionskosten für die Verdampfer

$f_{FK}$  Jährliche Tilgungsrate der Investitionskosten für den Kondensator

Für die Verdampferkosten gelte der folgende empirische Ansatz:

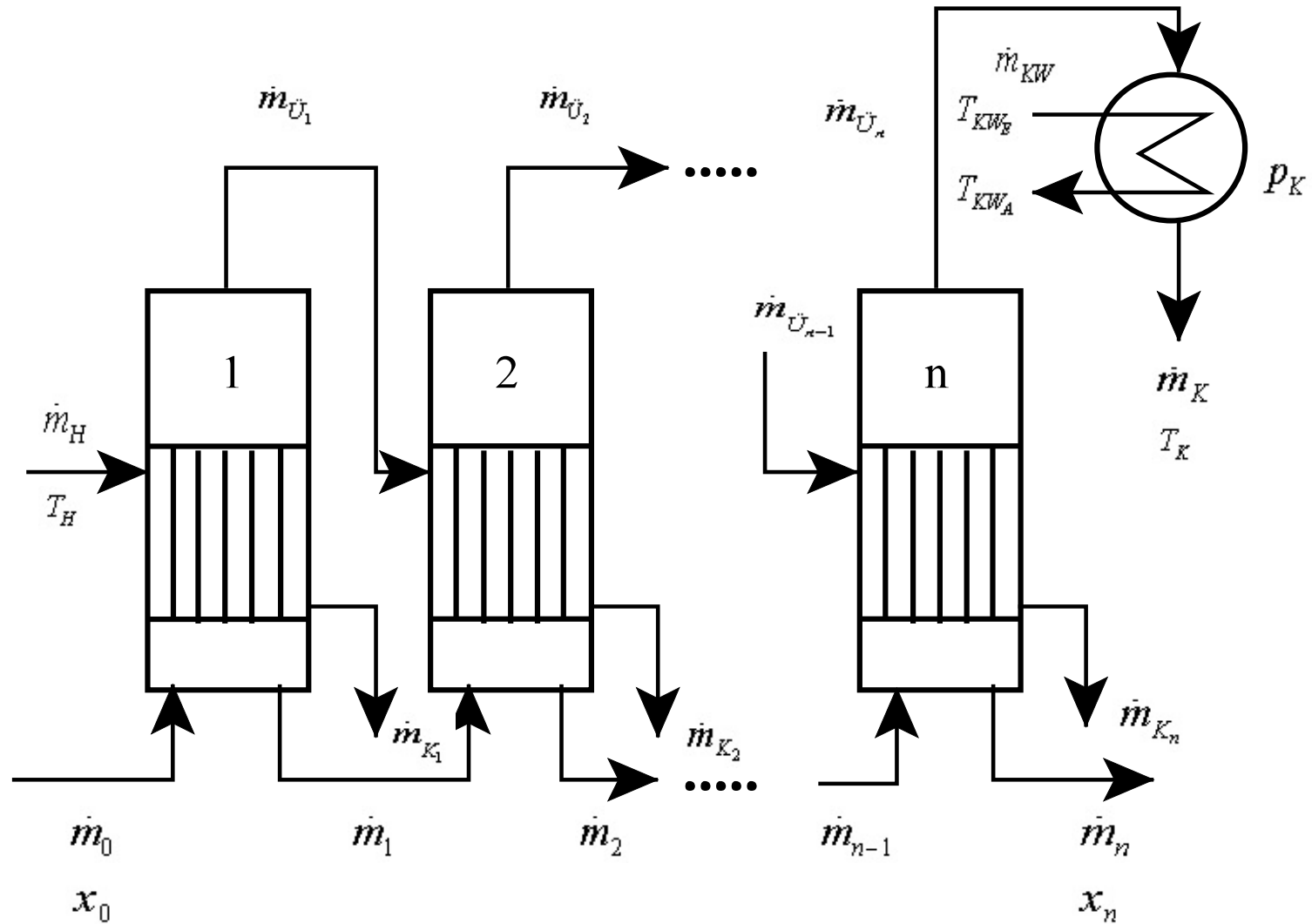
$$K_{FV} = C_V F^p \quad p = [1.2 \dots 1.3]$$

#### Vereinfachende Annahmen:

- Alle Verdampfer besitzen gleichgroße Heizflächen.
- Die Lösung am Eintritt in den ersten Verdampfer befinde sich im Siedezustand. Die Siedepunktserhöhung sei zu vernachlässigen.
- Der Druck im Kondensator sei konstant.
- Es kann mit einer mittleren, konstanten Verdampfungswärme gerechnet werden.
- Die Wärmedurchgangszahl  $k_v$  sei in allen Verdampfern gleich.
- Die Gesamt-Temperaturdifferenz verteile sich gleichmäßig auf alle Kaskadenelemente.
- Die Stoffwerte der einzudampfenden Lösung sind bekannt.
- Die Eintrittskonzentration der Lösung ist bekannt; die Austrittskonzentration ist vorgegeben. Der Mengenstrom der eintretenden Lösung ist ebenfalls bekannt.

#### Wichtige Formelzeichen:

$\dot{m}_0$	eintretender Massestrom der Lösung
$x_0$	Feststoffbeladung des eintretenden Stromes
$x_n$	Feststoffbeladung des austretenden Stromes
$\dot{m}_{\dot{U}_i}$	der den Verdampfer $i$ verlassende Dampfstrom
$\dot{m}_H$	Heizdampfstrom
$\dot{m}_K$	Kondensatstrom
$\dot{m}_{KW}$	Kühlwasserstrom
$T_H$	Temperatur des Heizdampfes
$T_K$	Temperatur im Kondensator
$T_{KW_E}$	Kühlwassereintritt-Temperatur
$T_{KW_A}$	Kühlwasseraustritt-Temperatur



## Ergänzungen zur 1. Übung

### Mischer

$$\begin{aligned}\dot{n}_1 &= \dot{a}_0 + \dot{n}_5 & \dot{a}_1 &= \dot{a}_0 + \dot{a}_5 \\ T_1 &= \frac{\dot{a}_0 T_0 + \dot{n}_5 T_5}{\dot{n}_1}\end{aligned}$$

### Wärmeübertrager

$$\begin{aligned}\dot{n}_2 &= \dot{n}_1 = \dot{a}_2 = \dot{a}_1 \\ \dot{n}_4 &= \dot{n}_3 \\ \dot{a}_4 &= \dot{a}_3 \\ T_4 + T_2 &= T_1 + T_3 \Rightarrow T_4 = T_1 + \Delta T_R \\ T_2 &= \frac{WT_1 + T_3}{1+W} & T_4 &= \frac{T_1 + WT_3}{1+W} \quad \text{mit} \quad W = \frac{c_p \dot{n}_1}{kA}\end{aligned}$$

### Rührkesselreaktor

$$\begin{aligned}\dot{a}_3 &= \frac{\dot{a}_2}{1 + \bar{t}k(T_3)} \\ T_3 &= T_2 + \Delta T_R\end{aligned}$$

### Separator

$$\begin{aligned}\dot{n}_5 &= \dot{n}_4 - \dot{n}_6 & \dot{a}_5 &= \dot{a}_4 - \dot{a}_6 \\ \dot{a}_6 &= \alpha \dot{a}_4 & \dot{a}_5 &= \dot{a}_4 (1 - \alpha) \\ \dot{n}_5 &= \dot{a}_5 & T_5 &= T_4 & T_6 &= T_4 \\ \dot{n}_5 &= (1 - \alpha) \dot{a}_4\end{aligned}$$

## Gleichungsorientierter Lösungsweg

**Ziel:** Reduktion der Ordnung des Gleichungssystems (damit Reduktion des Lösungsaufwandes).

**Weg:** Substitution möglichst vieler Variablen durch “auflösbare” Gleichungen.

### Beschreibung des Substitutionsprozesses für des konkrete Gleichungssystem

- Ausgangspunkt des Substitutionsprozesses ist die Wärmebilanz am Mischer:

$$T_1 \dot{n}_1 = T_0 \dot{a}_0 + T_4 (\dot{n}_1 - \dot{a}_0)$$

Mit der für den Wärmeübertrager gewonnen Beziehung  $T_4 = T_1 + \Delta T_R$  folgt nach Einsetzen und “Umsortieren” der Terme:

$$\boxed{T_1 = T_0 + \left( \frac{\dot{n}_1}{\dot{a}_0} - 1 \right) \Delta T_R} \quad (1)$$

- Aus den Gleichungen für den Wärmeübertrager

$$T_3 = T_2 + \Delta T_R \quad \text{und} \quad T_2 = \frac{W T_1 + T_3}{1 + W}$$

folgt nach Einsetzen der zweiten in die erste Beziehung

$$T_3 = \frac{W T_1 + T_3}{1 + W} + \Delta T_R$$

Diese Gleichung läßt sich wie folgt umstellen

$$T_3 = T_1 + \left( 1 + \frac{1}{W} \right) \Delta T_R$$

Durch Einsetzen von Gleichung (1) folgt:

$$T_3 = T_0 + \left( \frac{\dot{n}_1}{\dot{a}_0} + \frac{k A}{c_p \dot{n}_1} \right) \Delta T_R \quad (2)$$

- Wenn in die für den Mischer abgeleitete Beziehung  $\dot{n}_1 = \dot{a}_0 + \dot{n}_5$  die für den Separator gewonnene Bilanz eingesetzt wird, so folgt

$$\dot{n}_1 = \dot{a}_0 + (1 - \alpha) \dot{a}_4 = \dot{a}_0 + (1 - \alpha) \dot{a}_3$$

Dabei wurde berücksichtigt, daß

$$\dot{n}_5 = \dot{a}_5 \quad \text{und} \quad \dot{a}_4 = \dot{a}_3$$

gilt.

- In diese Beziehung läßt sich die für den Reaktor gewonnene Bilanzgleichung einsetzen. Es folgt dann:

$$\dot{n}_1 = \dot{a}_0 + \frac{(1 - \alpha) \dot{n}_1}{1 + \bar{t} k_R (T_3)} \quad (3)$$

Diese Gleichung läßt sich nach  $\dot{n}_1$  auflösen

$$\dot{n}_1 = \dot{a}_0 \frac{(1 + \bar{t} k_R (T_3))}{(\alpha + \bar{t} k_R (T_3))}$$

- Damit verbleiben noch die zwei Gleichungen (2) und (3) für die Unbekannten  $\dot{n}_1$ ,  $T_3$ .
- Dieses System läßt sich nun iterativ lösen:
  - $T_3$  wird zunächst vorgegeben.
  - Gleichung (3) liefert damit  $\dot{n}_1$ .
  - Mit Gleichung (2) kann nun  $T_3$  nachgerechnet werden. Damit ergibt sich eine neue Näherung, mit der ein neuer Iterationszyklus beginnen kann.

Die Iteration wird abgebrochen, wenn die Differenz zwischen zwei Zyklen kleiner als eine vorgegebene Schranke wird.

## Ergänzungen zur 5. Übung

- *Zu lösende Gleichung*

Die „richtige“ Scheinauflösung der zu lösenden nichtlinearen Gleichung hat die folgende Form:

$$\dot{V}_1 = \dot{V} - \frac{k V_R}{\left(1 + \frac{k V}{3 \dot{V}_1}\right)^2 \sqrt{\frac{1+2k \frac{V_R}{\dot{V} - \dot{V}_1}}{1 + \frac{4k V}{3 \dot{V}_1}} - 1}}$$

- *Iterationsvorschrift*

Damit ergibt sich für das Einsetzverfahren die folgende Iterationsvorschrift :

$$\dot{V}_1^{i+1} = \dot{V} - \frac{k V_R}{\left(1 + \frac{k V}{3 \dot{V}_1^i}\right)^2 \sqrt{\frac{1+2k \frac{V_R}{\dot{V} - \dot{V}_1^i}}{1 + \frac{4k V}{3 \dot{V}_1^i}} - 1}}$$

Das Verfahren wird abgebrochen, wenn  $|\dot{V}_1^{i+1} - \dot{V}_1^i| < \epsilon$  gilt.

## Ergänzungen zur 7. Übung

### □ MATLAB-Rahmenskript für die Lösung der Aufgabe.

```
%+++++
%
% Berechnung der Optimalen Stufenzahl einer Verdampfer-Kaskade +
%
%+++++

% Globale Daten für die Zielfunktionsberechnung
clear
global h1 h2 h3 h4 h5 tkwe tk

% Festlegung der Problem Daten:
% 1. Wirtschaftliche Rahmendaten:
%-----

cd = 0.0025; % Spezifische Dampfkosten in €/kg.
ckw = 0.00025; % Spezifische Kühlwasserkoste in €/kg.
cv = 500; % Spezifische Verdampferkosten in €/m2.
ck = 375; % Spezifische Kondensatorkosten in €/m2.
p = 1.3; % Kosten-Exponent für Verdampferfläche.
ffv = 0.5; % Feste Kosten pro Jahr für Verdampfer in 1/a.
ffk = 0.5; % Feste Kosten pro Jahr für Kondensator in 1/a.
d = 1500; % Jährliche Nutzungsdauer in h/a:

% 2. Prozessspezifische Daten:
%-----
m0 = 30000; % Strom dünne Lösung in Kg/h.
x0 = 0.17; % Eingangskonzentration in kg/kg.
xn = 0.55; % Ausgangskonzentration in kg/kg.
th = 115; % Heizedampf Temperatur in °C.
tk = 33; % Kondensattemperatur in °C.
tkwe = 18; % Kühlwasser-Eintrittstemperatur in °C.
v = 1.1; % Verlust-Faktor.

% 3. Stoffdaten:
%-----
rm = 2300; % Verdampfungswärme in kJ/kg.
rn = 2420; % Kondensationswärme in kJ/kg.
kv = 8380; % k-Zahl Verdampfer in kJ/m2h K.
kk = 8380; % k-Zahl Kondensator in kJ/m2h K.
cpk = 4.19; % Spezifische Wärme des Kondensats in kJ/Kg K.

% Berechnung von Hilfsgrößen für die rationelle Ermittlung der Werte der
% Zielfunktion.

dtges=th-tk;
w=m0*(1-x0/xn);
dt=1;
h1=(v*rm*w/(kv*dtges))^p*cv*ffv;
h2=w*d;
h3=cd*v;
h4=ckw*rn/cpk;
h5=ck*ffk*rn/d/kk;

% Optimierungszyklus
% n (Stufenzahl) wird schrittweise erhöht.
```

```

% TKWa wird über das Suchschrittverfahren mit Schrittweitenhalbierung
% ermittelt.

n=0; K_neu=1E19; K_alt=1E20; ende=0;
while ~ende
    n=n+1;
    K_alt=K_neu;
    dt=1;
    tkwa=tkwe+dt;
    K1=Kosten(n,tkwa);
    tkwa=tkwa+dt;
    K2=Kosten(n,tkwa);

    while K2 < K1
        K1=K2;
        tkwa=tkwa+dt;
        K2=Kosten(n,tkwa);
    end

    dt=-0.5*dt;
    while(abs(K1-K2)) > 0.005
        K1=K2;
        tkwa=tkwa+dt;
        K2=Kosten(n,tkwa);
        if K2 > K1
            dt=-0.5*dt;
        end
    end
    K_neu=K2;
    K(n)=K_neu;
    if K_neu>K_alt
        ende=1;
        n=n-1;
    end
end
end

% Ergebnisberechnung und -darstellung

dtkw=tkwa-tkwe;
dtkwm=dtkw/log((tk-tkwe)/(tk-tkwa));
plot(K)
fprintf('                Ergebnisse\n');
fprintf('-----\n');
fprintf('Stufenzahl                :    %5i  \n',n);
fprintf('Kühlwasseraustritts-Temperatur : %10.2f °C \n',tkwa);
fprintf('Dampfmenge                  : %10.2f kg/h \n',w*v/n);
fprintf('Kühlwassermenge            : %10.2f kg/h
\n\n',w*rn/(cpk*n*(tkwa-tkwe)));
fprintf('Verdampferfläche           : %10.2f m² \n',v*rm*w/kv/dtges);
fprintf('Kondensatorfläche         : %10.2f m²
\n\n',w*rn/(n*kk*dtkwm));
fprintf('Gesamtkosten               : %10.2f €/a \n',Kosten(n,tkwa));
fprintf('Investitionskosten         : %10.2f €
\n',n*h1/ffv+h5/dtkwm*h2/n/ffk);
fprintf('Betriebskosten            : %10.2f €/a
\n',h2*(h3+h4/dtkw)/n);

```

- MATLAB-Skript für das Unterprogramm zur Berechnung der Gesamt-Kosten

```
function K = Kosten(n,tkwa)
%
% Zielfunktion (Gesamtkosten) für Optimierung
% einer Verdampferkaskade.
%

global h1 h2 h3 h4 h5 tkwe tk

dtkw=tkwa-tkwe;
dtkwm=dtkw/log((tk-tkwe)/(tk-tkwa));

K=h2*(h3 + h4/dtkw + n*n*h1/h2 + h5/dtkwm)/n;
```