

Visualisierung modellbasierter Prozessdaten in der verfahrenstechnischen Leitwarte -

Ein Ansatz zur nutzerzentrierten Gestaltung höherer Prozessführungssysteme

vorgelegt von
Dipl.-Ing. Johannes Tilman Barz
aus Cottbus

von der Fakultät III - Prozesswissenschaften
der Technischen Universität Berlin
zur Erlangung des akademischen Grades
Doktor der Ingenieurwissenschaften

- Dr.-Ing. -

genehmigte Dissertation

Promotionsausschuss:

Vorsitzender: Prof. Dr.-Ing. Matthias Kraume

Gutachter: Prof. Dr.-Ing. Günter Wozny

Gutachter: Prof. Dr.-Ing. Leon Urbas

Tag der wissenschaftlichen Aussprache: 11.04.2008

Berlin 2008
D 83

Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als Doktorand am Graduiertenkolleg „**prometei**“ der Technischen Universität Berlin. Diese von der Deutschen Forschungsgemeinschaft seit 2004 finanziell geförderte Einrichtung hat sich, entsprechend seiner Namensgebung, der **PRO**spektiven Gestaltung der **ME**nsh **TE**chnik **I**nteraktion verschrieben. Aufgrund der Beteiligung von Doktoranden ganz unterschiedlicher Fachrichtungen und Disziplinen zeichnet sich das Graduiertenkolleg durch ein interdisziplinäres Arbeitsumfeld aus.

Mein Dank gilt meinen Doktorvätern Herrn Prof. Dr.-Ing. Günter Wozny sowie Herrn Prof. Dr.-Ing. Leon Urbas für die ausgezeichneten Arbeitsbedingungen, geprägt durch ein hohes wissenschaftliches Niveau und einen großen Gestaltungsfreiraum. Positiv zu erwähnen sei an dieser Stelle auch die Zusammenarbeit mit Firmen wie der BASF und der Degussa GmbH. Herrn Prof. Dr.-Ing. Günter Wozny möchte ich besonders für die Möglichkeit der experimentellen Arbeit im Technikum seines Fachgebietes Dynamik und Betrieb technischer Anlagen (DBTA) danken. Die praktische Umsetzung von Methoden der modellbasierten Prozessführung bedeutete eine große Motivation für diese Arbeit. Herr Prof. Dr.-Ing. Leon Urbas hat die interdisziplinäre Kommunikation im Graduiertenkolleg stets gefördert und aktiv gestaltet. Ohne sein Engagement hätte der wissenschaftliche Austausch und die Zusammenarbeit von so unterschiedlichen Disziplinen, wie den Ingenieurwissenschaften und der Psychologie, nicht stattgefunden. Herrn Prof. Kraume danke ich für die Übernahme des Prüfungsvorsitzes.

Ich bedanke mich ausserdem bei allen ehemaligen Kollegen sowohl vom Graduiertenkolleg als auch vom Fachgebiet DBTA für das angenehme Arbeitsklima und die vielfältigen fachlichen Diskussionen. Meinem Zimmerkollegen und Mitstreiter im Forschungsschwerpunkt „Prozessmonitoring“, Jörg Huss möchte ich an dieser Stelle besonders für seine Offenheit und Aufgeschlossenheit danken.

Danken möchte ich weiterhin allen an der Arbeit beteiligten Studenten für ihren Einsatz und ihre Mitarbeit. Gleiches gilt für alle die sich bereit erklärt haben, an den Arbeitstreffen und Evaluationen zur Prototypengestaltung teilzunehmen.

Schliesslich danke ich meinen Eltern, meiner Schwester und Cristina für das entgegengebrachte Verständnis und ihre Unterstützung. Die gemeinsamen Diskussionen zum Kolonnenbetrieb mit meinem Vater haben mir viel Freude bereitet.

Berlin, April 2008

Abstract

The use of digital process control technology in chemical engineering offers a variety of possibilities for complex automation systems. Under the so called advanced process control methods, model-based algorithms exhibit the most applications. Increasing importance has been attached to them due to their high potential with respect to the optimization of plant operation. However, not all implemented systems achieved the expected benefits. This is mainly because of shortcomings and difficulties encountered during operation. As a result, operator acceptance of the systems is often very low. This is due mainly to the complexity of the applied control algorithms, the workload for process monitoring and finally the lack of an established human-machine-interface. The systems are frequently of low ergonomic quality, they lack transparency, and fail to conform with user expectations.

The development of a human-machine-interface for model-based control systems is presented. In order to improve acceptance, the approach is focused on the adequate visualization of the quality of the underlying process models. The model quality is understood as a system-inherent property which is strongly linked to the reliability of the control system. It influences the performance of the control system and is also an important factor for process monitoring and supervisory control. An indirect quantity for the assessment of the model quality can be obtained by uncertainty indicators of model-based process data. The transparent visualization is the basis for the evaluation of the system's performance. It has a positive effect on the correlation of the subjective perception of the user and the reliability of the system, and is thus the key requisite for their acceptance. Guidelines and draft proposals are presented for the visualization of model-based process data and its uncertainty, developed in cooperation with usability experts.

Based on the results, various prototype visualization formats for the curve representation in the trend display are presented. They were implemented as an emulation of the user interface and connected to the process control system of a pilot distillation plant. The setting was determined by typical applications of model-based systems: soft-sensors, model-based control and steady state optimization. For the quantification of the quality of the process models and for the determination of the uncertainty of the model based data, stochastic algorithms were applied. The challenges of dealing with complex and nonlinear dynamic systems in process engineering as well as with the determination of optimal decisions under uncertainty are illustrated. The prototype visualization formats have been evaluated by usability experts and operators, and the result is a clear favorite for the trend display, which can be easily integrated

in existing standard process control systems and can be implemented for linear process models with reasonable effort.

Inhaltsverzeichnis

Symbolverzeichnis & Abkürzungen	XI
1 Thematik & Hintergrund	1
2 Einleitung	3
2.1 Advanced Process Control und modellbasierte Prozessführung	3
2.2 Analyse und Bewertung von APC	5
2.3 Nutzerzentrierte Betrachtung von APC	8
2.4 Motivation & Zielstellung	10
2.5 Lösungsansatz für die nutzerzentrierte Visualisierung modellbasierter Systeme .	10
2.5.1 Erhebung von Vorschlägen und Richtlinien / Expertenbefragung	11
2.5.2 Ergebnisse	12
3 Theoretische Grundlagen zur Güte modellbasierter Daten	13
3.1 Verlässlichkeit von Automatisierungssystemen	13
3.1.1 Zusammenfassung und Implikationen für diese Arbeit	14
3.2 Ergebnisunsicherheit modellbasierter Daten	15
3.2.1 Unsicherheiten von Prozessmodellen	15
3.2.2 Einfluss von Modellunsicherheiten auf Prozessgrößen	17
3.2.3 Modellgestützte Überwachung	17
3.2.4 Modellgestützte Betriebsführung unter Unsicherheiten	19
Indirekte Methoden	19
Direkte Methoden	20
3.2.5 Berücksichtigung von Modellunsicherheiten	21
3.2.6 Implikationen für die Ermittlung der Ergebnisunsicherheit modellbasier-	
ter Daten	23
3.3 Verwendete numerische Methoden	23
3.3.1 Formulierung allgemeiner nichtlinearer Optimierungsprobleme	25
3.3.2 Diskretisierung der Modellgleichungen	25
3.3.3 Sequential Quadratic Programming	26
Die Lagrange Funktion und die Optimalitätsbedingungen	27
Sequentielle Lösungsschritte des SQP-Verfahrens	28

3.3.4	Die Anpassung der Problemformulierung für die Optimierung großer Systeme	30
	Der simultane Ansatz zur Lösung großer Optimierungsprobleme	30
	Der sequentielle Ansatz zur Lösung großer Optimierungsprobleme . . .	31
3.3.5	Verwendete SQP-Algorithmen	33
	Beispielrechnung eines deterministischen NLP Problems	34
3.3.6	Erweiterung für die Berücksichtigung von Wahrscheinlichkeitsrestriktionen	35
	Beispielrechnung eines stochastischen NLP Problems	40
3.3.7	Allgemeine Verfahren der Zustands- und Parameterschätzung	43
3.3.8	Das Extended Kalman Filter	44
4	Theoretische und experimentelle Voruntersuchungen zum Betrieb der Destillationskolonne	49
4.1	Aufbau der Rektifikationskolonne	49
4.2	Rigorese Kolonnenmodellierung	50
4.3	Theoretische Voruntersuchungen	55
4.3.1	Thermodynamische Eigenschaften von Acetonitril/Wasser	55
4.3.2	Der Betrieb mit minimalem Energieeinsatz	56
4.4	Praktische Aspekte des Kolonnenbetriebs	57
4.4.1	Automatisierung und Regelung	58
4.4.2	Druckregelung	60
4.4.3	Anfahren	63
4.4.4	Stabilisierung des dynamischen Betriebs, Stabilisierung des Rücklaufstroms	64
4.5	Experimentelle Untersuchungen zum stationären Betrieb und Modellvalidierung	66
4.5.1	Modellanpassung und Parameterschätzung	66
4.5.2	Modellgüte und Ergebnisunsicherheiten modellbasierter Daten	72
5	Modellbasierte Regelung	75
5.1	Separate Modellierung des Kondensators für die modellbasierte Regelung . . .	75
5.2	Stationäre Modellvalidierung	78
5.3	Dynamische Zustandsschätzung - online	81
5.3.1	Formulierung des Schätzproblems	81
5.3.2	Implementierung des Extended Kalman Filters	82
5.3.3	Validierung des adaptiven dynamischen Modells	86
5.4	Modellbasierte Regelung auf Basis des adaptiven dynamischen Modells	86
5.4.1	Formulierung des Regelungsproblems	86
5.4.2	Implementierung der modellbasierten Regelung	89

5.4.3	Ergebnisse der modellbasierten Regelung	90
6	Modellbasierte Arbeitspunktoptimierung	95
6.1	Das stationäre Optimierungsproblem	95
6.1.1	Lösungsansatz zur Berücksichtigung diskreter Entscheidungen	97
6.2	Lösung ohne Berücksichtigung von Modellunsicherheiten	99
6.3	Untersuchung zum Einfluß von Unsicherheiten auf das Optimierungsergebnis .	100
6.4	Lösung mit Berücksichtigung von Modellunsicherheiten	102
7	Visualisierung modellbasierter Prozessdaten	105
7.1	Praktische Bedeutung der Ergebnisunsicherheit modellbasierter Daten	105
7.2	Prototypenentwicklung für das Kurvenbild	107
7.2.1	Auswahl von Gestaltungsvarianten	107
7.2.2	Ergebnisse für die Darstellung modellbasierter Daten	108
	Varianten zur Ermittlung relativer Angaben	110
7.3	Evaluation der Prototypen	111
7.3.1	Auswertung der heuristischen Evaluationen	112
	Ergebnisse der Evaluation mit usability-Experten	112
	Ergebnisse der Evaluation mit Prozessführungsexperten	113
	Darstellungsfavorit	115
8	Zusammenfassung und Ausblick	117
9	Anhang	121
9.1	Daten der Hochdruckkolonne	121
9.2	Diskretisierung mit dem Orthogonalen Kollokationsverfahren	121
9.3	Berechnung von Stoff- und Gemischdaten	123
9.4	Modifikation des Kondensatorbetriebs	124
9.4.1	Einfluss der Wärmetauscherleistung auf die Druckregelung für Variante A2	124
9.4.2	Durchgeführte Umbaumaßnahmen für Variante B2	125
9.5	Evaluationsunterlagen	126
9.5.1	Informationsmaterial	126
9.5.2	Unterlagen für den Versuchsleiter & Auswertungsvorlagen	129
	Literaturverzeichnis	139
	Im Rahmen dieser Arbeit betreute Studien-, Master- und Diplomarbeiten	153

Symbolverzeichnis & Abkürzungen

Lateinische Buchstaben

A	Jakobimatrix, konstante Matrix	-
$A_{\dagger}^{\S}$	Fläche, $\S = \{Kond, Boden, Glocke\}$, $\dagger = \{/, WU, quer\}$	m^2
ANB	Menge der aktiven Nebenbedingungen	-
AO_i	Anzeigenbereich der Ordinate	-
B_{fl}^{F+R}	Flüssigbelastung der Kolonne (Feed + Rücklauf)	ltr/h
c_i	Nebenbedingungen	-
$c_p^L, c_p^{\S}$	spezifische Wärmekapazität Kondensat bzw. spezifische Wärmekapazität, $\S = \{KW, L, Kol\}$	$kJ/kg/K$ $kJ/ltr/K$
D	Destillatstrom	ltr/h
D^{Feed}, D^{sens}	Menge möglicher Feedböden bzw. Regelböden	-
$D\{\}, E\{\}$	Varianz bzw. Erwartungswert	-
EU_i	Ergebnisunsicherheit modellbasierter Daten	-
EW_i	Ergebniswahrscheinlichkeit modellbasierter Daten	-
F	Fischer'sche Informationsmatrix	-
$f^{\{M\}}, f^{\{P\}}$	Modellgleichungen, Problemfunktionen	-
F_{max}	maximaler F-Faktor	N/m^2
$F^{\S}$	flüssiger volumetrischer Strom, $\S = \{Feed, KW, L, V\}$	ltr/h
F_j^{Feed}	flüssiger molarer Feedstrom	$kmol/h$
g	Erdbeschleunigung	m/s^2
g	Gleichungsnebenbedingung	-
GNB	Menge der Gleichungsnebenbedingungen	-
H	Übertragungsmatrix der Messgleichungen	-
h	Ungleichungsnebenbedingungen bzw. Messgleichungen	-
h^{Wehr}	Wehrhöhe	m
H	Hesse-Matrix	-
$\tilde{H}U_j$	molarer Holdup	$kmol$
h^{LV}	massenbezogene spezifische Verdampfungswärme	kJ/kg
$\tilde{h}^{LV}$	molenbezogene spezifische Verdampfungswärmen	$kJ/kmol$

$\tilde{h}_j^\S$	spez. molare Enthalpie, $\S = \{L, V, Feed\}$	$kJ/kmol$
J	Zielfunktion	-
K_i	Kurve im Kurvenbild	-
$K_{i,j}$	Gleichgewichtskonstante	-
$k_{WU}^\S$	Wärmedurchgangskoeffizient, $\S = \{2ph, L, V\}$	$kJ/m^2/K$
$(kA)^\S$	Wärmedurchgang $\S = \{Kond, WT\}$	kW/K
$L, \mathbf{L}_j$	Rücklaufstrom, molarer Flüssigstrom	$kmol/h$
L^k	Lagrange-Funktion	-
L_j^+	Wehrüberhöhung der Flüssigkeit	m
$l^\S$	Wehrlänge, Füllstand, $\S = \{Wehr, Kond, Sumpf\}$	m
$l_\%^\S$	Wehrlänge, Füllstand, $\S = \{Kond, Sumpf\}$	$\%$
lo_i	untere Grenze (<i>lower</i>)	-
M	Menge der Modellgleichungen	-
$M_i, \mathbf{M}$	Molmasse der Komponente bzw. mittlere M.	$kg/kmol$
$mc_p^\S$	Wärmekapazität, $\S = \{KW, Wand\}$	kJ/K
MV	Kovarianzmatrix der Messfehler	-
$n_\dagger$	Anzahl der Intervalle, $\dagger = \{c, p\}$	-
NC, NL, NK	Anzahl Stützstellen/Intervalle/Komponenten	-
PV_0	Kovarianzmatrix der Zustandsgrößen, $\dagger = \{0\}$	-
$p, \mathbf{p}$	Suchschritt, Lagrange Polynom, Konvergenzordnung	-
$p^\S$	Druck (absolut), $\S = \{/, Kond, soll\}$	bar
$Pr\{\}$	Wahrscheinlichkeit	-
Q	Wichtungsmatrix der Regelabweichungen	-
QV	Kovarianzmatrix der Modellfehler	-
$\dot{Q}_\dagger^\S$	übertragene Wärme, Kondensation, Heizleistung, $\S = \{2ph, EXP, L, LV, MLE, Sumpf, V\}, \dagger = \{\%, WU\}$	$kW, \%$
R	Wichtungsmatrix für die Stellgrößenaktivitäten	-
R, R^*	Rücklaufverhältnis, optimales R.	-
r^L	spezifische volumetrische Kondensationswärme	kJ/ltr
$s_{l,j}$	Sensitivität von l bzgl. j	-
t	Zeit	min, h
$T_\dagger^\S$	Temperatur, $\S = \{Feed, KW, L, LV, sens, V\},$ $\dagger = \{0, 1, aus, ein, j, MW, soll\}$	$^\circ C$
$u_\dagger^\S$	Entscheidungsgrößen, $\S = \{/, KW, L\}, \dagger = \{/, min, max\}$	-
$\vec{u}^\S$	zeitliche Folge von Entscheidungsgrößen $\S = \{/, KW, L\}$	-
$\tilde{u}_j^L$	spez. molare innere Energie	$kJ/kmol$

UNB	Menge der Ungleichungsnebenbedingungen	-
up_i	obere Grenze (<i>upper</i>)	-
$V^{L,Kol}$	volumetrischer Flüssigholdup der Kolonne	<i>ltr</i>
V_j	molarer Dampfstrom	<i>kmol/h</i>
$V_{stat}^{\S}$	statisches Volumen, $\S = \{Boden, Sumpf\}$	m^3
V_{var}^{Sumpf}	regelbares Sumpfvolumen	m^3
w_{max}^V	Dampfleerrohrgeschwindigkeit	m/s
$w_j^{V,Glocke}$	Geschwindigkeit bei Durchtritt durch Flachglocke	m/s
$\vec{w}$	Sollwerte im Regelungsproblem	-
$x, x^{(+)}$	Zustandsgrößen bzw. aktualisierte Z.	-
$x_{\dagger}^{\S}$	molare Flüssigkonzentration, $\S = \{Feed, Kopf, Sumpf\}, \dagger = \{0, Ac, i, j, Wa\}$	<i>kmol/kmol</i>
$\vec{y}$	Regelgrößen im Regelungsproblem	-
y_i	beschränkte Ausgangsgröße bzw. Prozessgröße	-
y_i, y_i^{mess}	Modellgrößen bzw. Messgrößen	-
$y_{i,j}$	molare Dampfkonzentration	<i>kmol/kmol</i>
$y_{\dagger}$	Regelgröße, $\dagger = \{/, max, min\}$	-
$Y^{\S}, \tilde{Y}^{\S}$	Bool'sche Entscheidungsvariable bzw. relaxierte B. E., $\S = \{Feed, sens\}$	-
Y_i	Raum der unsicheren Größen	-
z	Optimierungsvariablen	-

Griechische Buchstaben und kalligraphische Symbole

α	Schrittweite, relative Flüchtigkeit	-
α	Wahrscheinlichkeitsniveau	-
γ_i	Aktivitätskoeffizienten	-
Δ	Differenz	-
$\Delta\lambda_{ij}$	Wechselwirkungsparameter	<i>cal/mol</i>
$\Delta p_j^{\S}$	Druckverlust, $\S = \{stat, trock\}$	<i>Pa</i>
$\Delta\dot{Q}^V$	Wärmeverlust Kolonne	<i>kW</i>
$(\Delta T)^{\S}$	treibende Temperaturdifferenz $\S = \{L, V\}$	<i>K</i>
ΔT^{UK}	Kondensatunterkühlung	<i>K</i>
ε	Fehlervektor des Parameterschätzproblems	-
ε^L	Flüssiganteil der Sprudelschicht	-
ζ_w	Widerstandsbeiwert	-
η^A, η^V	Bodenwirkungsgrad Abtriebs-, Verstärkungsteil	-
η_j	Bodenwirkungsgrad	-

$\theta_{\Delta T}^V$	Parameter treibende Temperaturdifferenz	-
$\theta_{\dagger}^{\S}$	Parameter, $\S = \{/, (+), \}$, $\dagger = \{/, k, max, min\}$	-
λ^k, λ_i	Lagrange-Multiplikatoren, Eigenwerte	-
Λ_{ij}	Wilson-Parameter	-
μ	Erwartungswert	-
ν_i	Parameter der <i>circle condition</i>	-
$\mathcal{N}$	normalverteilte Größe	-
ξ_i	unsichere Prozess-/Modellgrößen	-
Ξ_i	Raum der unsicheren Eingangsgröße	-
ρ	Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion	-
$\tilde{\rho}_j^L, \tilde{\rho}_j^V$	molare Dichte von Flüssigkeit bzw. Dampf	$kmol/m^3$
ρ^{KW}, ρ_j^V	Dichte von Kühlwasser bzw. Dampf	kg/m^3
σ	Varianz	-
Σ	Kovarianzmatrix	-
τ^{KW}, τ^L	Zeitkonstante geschlossener Regelkreis	<i>sec</i>
τ, τ_i	normierte Zeitschrittweite, Stützstellen	-
$\tilde{\mathbf{Y}}$	molenbezogene Mischungsgrößen	-
Φ_{MLE}	Zielfunktion <i>Maximum Likelihood Estimation</i>	-
φ	Unsicherheiten der Messdaten	-
Ψ	massenbezogene Mischungsgrößen	-
ω	Wichtungsfaktor	-

Indices

$()^0$	Startwert für die Optimierung
$()^{2ph}$	zwischen zwei Phasen - flüssig/dampfförmig
$()^+$	zusätzlich (zur Wehrhöhe)
$()^*$	Lösung bzw. Optimum
$()^{(+)}$	Aktualisierung (des Kalman Filters)
$()^{\{M\}}$	Gleichungen des Prozessmodells
$()^{\{P\}}$	Problemfunktionen der Optimierung
$()^A$	Abtriebsteil
$()^{Boden}$	Kolonnenboden
$()^{EXP}$	experimentelle Daten
$()^{F+R}$	Summe aus Feed- und Rücklaufstrom
$()^{Feed}$	Feed
$()^{Glocke}$	Flachglocke des Kolonnenbodens
$()^k$	<i>major iterations</i> des Optimierungsverfahrens
$()^{Kond}$	Kondensator

$()^{Kol}$	Kolonne
$()^{KW}$	Kühlwasser
$()^L$	flüssig (<i>liquid</i>), Kondensat
$()^{LV}$	Phasenübergang flüssig/dampfförmig
$()^{mess}$	gemessene Größe
$()^{MLE}$	Ergebnis <i>Maximum Likelihood Estimation</i>
$()^{sens}$	Temperaturfront bzw. sensitiver Boden
$()^{soll}$	Sollwert bzw. Führungsgröße der Regelung
$()^{Sumpf}$	Sumpf
$()^{trock}$	trocken (Druckverlust)
$()^{UK}$	Unterkühlung (Kondensat)
$()^V$	dampfförmig, Filmkondensation, Verlust, Verstärkungsteil
$()^{Wand}$	Kondensatorwand
$()^{Wehr}$	Wehr auf dem Kolonnenboden
$()^{WT}$	Wärmetauscher
$()_0$	Anfangszustand, Versorgung (des Kühlwassers)
$()_1$	Ableitung (des Kühlwassers)
$()_{\%}$	prozentualer Wert
$()_{Ac}$	Acetonitril
$()_{aus}$	Kühlwasseraustritt am Kondensator
$()_c$	Regelung (<i>control</i>) für die Länge des Horizontes
$()_{ein}$	Kühlwassereintritt am Kondensator
$()_{fl}$	Flüssiglast der Kolonne
$()_i$	Zähler/Laufindex, Komponente
$()_j$	Zähler/Laufindex, Bilanzraum
$()_k$	Zähler/Laufindex, Zeitpunkt
$()_{min}$	minimal, Beschränkung
$()_{max}$	maximal, Beschränkung
$()_{MW}$	Mittelwert
$()_p$	bei konstantem Druck
$()_p$	Prädiktion (<i>prediction</i>) für die Länge des Horizontes
$()_s$	Stützstellen der Lagrange-Polynome, ausgewählte unsichere Größe
$()_{stat}$	statisch
$()_l$	Zähler/Laufindex
$()_{quer}$	freie Querschnittsfläche Boden/Kondensator, freie Durchtrittsfläche Flachglocke
$()_{var}$	variabel

$()_{Wa}$	Wasser
$()_{WU}$	Wärmeübergang
$()_x$	bezüglich x-Wert
$\tilde{()}$	relaxierte boolsche Variable, molenbezogene/molare Größe
$\vec{()}$	zeitliche Folge von Größen (Vektor)

Verwendete Abkürzungen

APC	<i>Advanced Process Control</i>
BuB	Bedienen und Beobachten
CPM	<i>Controller Performance Monitoring</i>
DAE	<i>Differential Algebraic Equation</i>
EKF	<i>Extended Kalman Filter</i>
EQP	<i>Equality-Constrained QP</i>
GGW	Gleichgewicht
GNB	Gleichungsnebenbedingungen
IQP	<i>Inequality-Constrained QP</i>
KKT	<i>Karush-Kuhn-Tucker</i>
KPI	<i>Key Performance Indicators</i>
MHE	<i>Moving Horizon Estimation</i>
MLE	<i>Maximum Likelihood Estimation</i>
MMS	Mensch-Maschine-System
MPC	<i>Model Predictive Control</i>
NLP	<i>Nonlinear Programming</i>
NMPC	<i>Nonlinear Model Predictive Control</i>
OTS	Operatortrainingssysteme
PAEKF	<i>Parameter Adaptive Extended Kalman Filter</i>
PLS	Prozessleitsystem
PNK	Prozessnahe Komponenten
QP	<i>Quadratic Programming</i>
RTO	<i>Real Time Optimization</i>
SOP	Standardarbeitsanweisung
SQP	<i>Sequential Quadratic Programming</i>
UE	<i>Usability Evaluation</i>
UNB	Ungleichungsnebenbedingungen
VLE	<i>Vapour-Liquid Equilibrium</i>

1 Thematik & Hintergrund

Die modellbasierte Prozessführung (*Advanced Process Control*, APC) ist eine relativ junge und im Wachstum begriffene Technologie der chemischen Industrie, die sich vor allem durch das hohe Potential auszeichnet, welche sie für die Optimierung komplexer verfahrenstechnischer Prozesse aufweist. Während von der Vielzahl bereits eingesetzter Systeme einige substantiellen Gewinn aufweisen konnten, haben nicht alle die erwarteten Erfolge erzielt, was letztendlich die Akzeptanz der APC-Technologie und damit ihren umfassenden Einsatz beeinträchtigt hat. Potentielle Produktivitätsverbesserungen und Kosteneinsparungen werden auf diese Weise nicht vollständig ausgeschöpft (Ted Su, 2004).

Ausbleibender Erfolg ist hauptsächlich auf Probleme zurückzuführen, die aus der Vielfalt kommerzieller und firmeninterner Lösungen sowie der Komplexität der eingesetzten Verfahren resultieren. Ein wesentliches Resultat uneinheitlicher Vorgehensweisen ist das Fehlen von Standards bezüglich der Einbindung in die konventionellen Mensch-Maschine-Schnittstellen. Als Folge scheint das moderne APC die Visualisierungsmöglichkeiten der Bediensysteme zu überflügeln (Schuler, 2006). Sie weisen eine eingeschränkte Gebrauchstauglichkeit auf, welche hauptsächlich durch das Fehlen von Eigenschaften wie Transparenz, Selbsterklärbarkeit und Lernförderlichkeit begründet ist.

Vor dem Hintergrund der Mängel und Schwierigkeiten vor allem im laufenden Betrieb von APC-Lösungen, werden in dieser Arbeit Möglichkeiten für eine Akzeptanzsteigerung seitens des Nutzers untersucht. Die Aufgabenstellung resultiert daher nicht aus einer spezifischen Problemstellung der Verfahrens- oder Automatisierungstechnik, sondern aus der Notwendigkeit, eine für den Nutzer optimale Lösung zu finden. Im Gegensatz zur rein ingenieurwissenschaftlichen Arbeit, liegt der Fokus dabei auf der ganzheitlichen Betrachtung von Automatisierungssystemen mit besonderer Berücksichtigung der Mensch-Maschine-Schnittstelle. Hier gilt es die Chance wahrzunehmen, in der relativ frühen Entwicklungsphase von APC-Technologien die Systemgestaltung in positiver Weise zu beeinflussen.

Das Vorgehen wird von Kriterien und Anforderungen begleitet, welche aus der nutzerzentrierten Gestaltung von Schnittstellen resultieren (DIN EN ISO 13407, 1999). Es orientiert sich an den technischen Rahmenbedingungen, welche sich aus dem Einsatz modellbasierter Automatisierungssysteme für verfahrenstechnische Problemstellungen ergeben.

2 Einleitung

Die in dieser Arbeit untersuchten modellbasierten Prozessführungssysteme sind APC-Technologien zuzuordnen. Kapitel 2.1 gibt zunächst eine kurze Übersicht zu diesen Technologien. Es folgt eine Analyse und Bewertung allgemeiner Aspekte von APC, mit besonderer Berücksichtigung von Gesichtspunkten, welche entscheidend für den erfolgreichen Einsatz von APC-Systemen sind (Kap. 2.2). Aus den Ergebnissen wird Handlungsbedarf abgeleitet und die Motivation und Zielstellung dieser Arbeit formuliert (Kap. 2.4). Das Thema der Arbeit wird konkretisiert und als Gestaltungsaufgabe formuliert. Die Erarbeitung des zentralen Anforderungskriteriums an die Visualisierung modellbasierter Prozessdaten wird in Kapitel 2.5.1 beschrieben. Damit sind die Rahmenbedingungen der Arbeit definiert.

2.1 Advanced Process Control und modellbasierte Prozessführung

Die Automatisierungstechnik ist heute eine Schlüsseltechnologie für die effiziente Produktion und hohe betriebliche Leistung in der chemischen Industrie (Schuler, 2006). Große Innovationen sind der Entwicklung in der Instrumentierung und den Mensch-Maschine-Schnittstellen zuzuschreiben. Diese sind auf die Einführung der digitalen Computertechnik in den 1960'er Jahren zurückzuführen (Birchfield, 2002). Als Folge hat sich die zentrale Leitwarte zum Standardinstrument der Prozessführung industrieller Anlagen mit einer einheitlichen rechnergesteuerten Mensch-Maschine-Schnittstelle, dem Bedienen und Beobachten (BuB), entwickelt. Zusätzlich zu den konventionellen Prozessführungsmethoden werden seit den 1980'er Jahren weltweit im verstärkten Maße auch höhere Prozessführungsmethoden (APC) eingesetzt (Ted Su, 2004). Diese weisen ein beschleunigtes Wachstum der Anwendungen und eine zunehmende Ausweitung der Anwendungsfelder auf. So wird der Umsatz an APC-Produkten im Jahr 2005 weltweit mit ca. 320 Mio. US Dollar und einer jährlichen Wachstumsrate von 10% angegeben (ARC Advisory Group, 2003). Birchfield (2002) und Pfeiffer (2005a) definieren APC-Technologien wie folgt:

Definition 2.1 *APC-Verfahren sind Überwachungs- und Regelungsverfahren, die über standardmäßige PID-Regelungen und Ablaufsteuerungen hinausgehen.*

Diese Definition aus den frühen 1960'er Jahren wird jedoch heutzutage wesentlich weiter gefasst, so dass APC als Synonym für die Verwendung jeglicher computerbasierter Prozessführungstechnologien, abgesehen von den Standardverfahren, verwendet wird (Willis und Tham,

1994; Birchfield, 2002). Damit decken APC-Lösungen eine sehr vielfältige Palette an verfahrenstechnischen Problemstellungen ab und sind in allen Bereichen der Automatisierungstechnik anzufinden (Reinig und Mahn, 2000; Schuler, 2006). So sind z.B. Softwarewerkzeuge für die Planung, Dokumentation und Analyse von Geschäftsprozessen der Unternehmensleitebene bzw. Werkzeuge für die Produktionslenkung und Organisation der Produktionsleitebene einzuschliessen. Weitere Informationstechnik-basierte Methoden betreffen die Standardisierung von Hard- und Software und die vertikale Integration von Informationssystemen über die Automatisierungsebenen (Enste und Uecker, 2002). Datenbasierte APC-Verfahren stützen sich häufig auf statistische Modelle, z.B. Zeitreihenanalysen für das intelligente Alarm-Management bzw. die Auswertung und Überwachung von Reglern (*Controller Performance Monitoring*, CPM) (Nöth und Pickhardt, 2005) oder Komponenten (*Asset-Management*).

Der Einsatz von Modellen für die Prozessführung basiert auf der Beschreibung des Prozess- bzw. Anlagenverhaltens. Willis und Tham (1994) geben einen Überblick über unterschiedliche Modelle, welche in der Prozessführung verwendet werden.

Definition 2.2 *Die in dieser Arbeit berücksichtigten modellbasierten Ansätze basieren auf mechanistischen Modellen mit konzentrierten Parametern. Die modellierten Zusammenhänge sind chemisch und physikalisch begründet und tragen zum Prozessverständnis bei.*

Mechanistische Modelle sind bereits für viele Prozessklassen und Verfahrensschritte Standard und können aus dem Prozessentwurf und der Auslegung für den Anlagenbetrieb übernommen werden (Schuler, 2006). Dies zeigt sich auch im erfolgreichen Einsatz modellbasierter Operatortrainingssysteme (OTS), welche mit der Verfügbarkeit gleichungsbasierter dynamischer Modellierungs- und Simulationswerkzeuge wächst (Urbas, 1999; Kroll, 2003a,b; Schaich und Friedrich, 2003). Abbildung 2.1 zeigt eine angepasste Darstellung von Dittmar und Pfeiffer (2006), welche die Einbindung modellbasierter Verfahren in die Ebenenmodelle der Automatisierungs- und Informationssysteme illustriert. Entsprechend der hierarchischen Struktur werden hier Messinformationen ausgewertet bzw. optimale Entscheidungen getroffen und als Sollwerte der Basisregler implementiert. Die Zielkriterien und Randbedingungen werden dabei hauptsächlich in der Betriebs- und Produktionsleitebene definiert.

Einen wichtigen Anteil modellbasierter Systeme stellen sogenannte Softsensoren dar, die im Vergleich zu „hard“-Sensoren (echten Sensoren) durch die Auswertung realer Messdaten und auf Basis eines Prozessmodells zusätzliche Informationen zum Prozesszustand bereitstellen. Diese können sowohl für die kontinuierliche Prozessüberwachung, die Qualitätssicherung oder als Regelgröße verwendet werden. Werden betriebstechnisch relevante Kenngrößen berechnet, auch *Key Performance Indicators* (KPI) genannt, handelt es sich häufig um Schlüsselvariablen, welche die Reproduzierbarkeit oder Sicherheit von Prozessen kennzeichnen (Schuler, 2006).

Den größten Anteil an APC besitzt die modellbasierte Regelung (*Model Predictive Control*, MPC). Diese wird seit Mitte der 1970'er Jahre im Raffineriesektor und der Petrochemie großindustriell eingesetzt und hat sich zum Stand der Technik für die Lösung anspruchsvoller

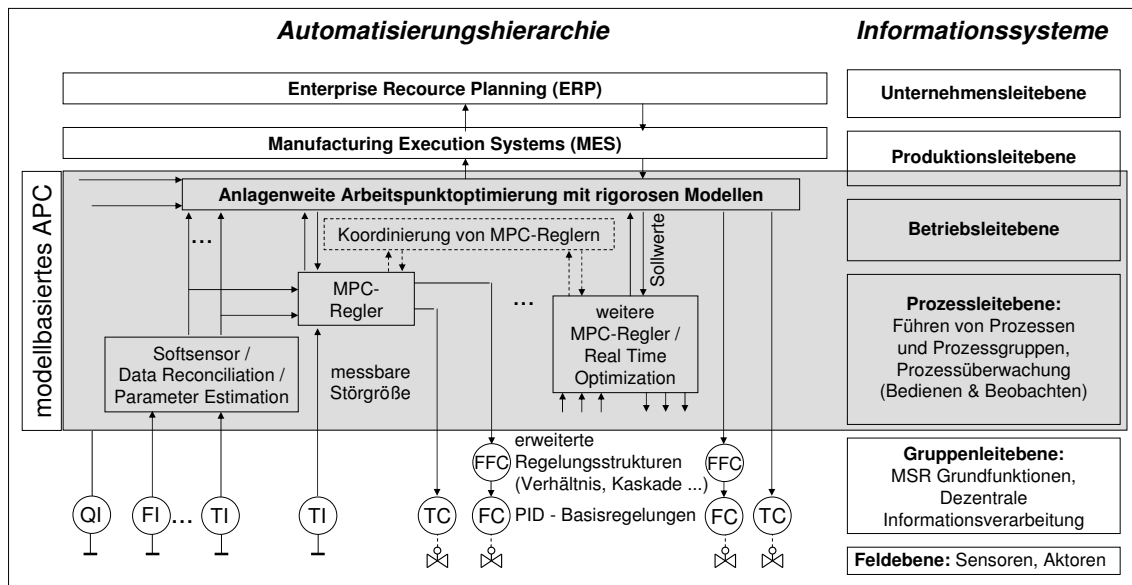


Abbildung 2.1: Einordnung modellbasierter APC-Systeme in die Automatisierungshierarchie bzw. das Ebenenmodell der Informationssysteme

Regelungsaufgaben mit Mehrgrößencharakter und/oder Beschränkungen entwickelt. Qin und Badgewell (2003), Camacho und Bordons (2004), Dittmar und Pfeiffer (2006) geben einen ausführlichen Überblick über industriell eingesetzte Verfahren. Hier sind bereits eine breite Palette kommerzieller Produkte verfügbar. So veröffentlichten Qin und Badgewell (2003) Ergebnisse von Umfragen unter kommerziellen Anbietern, welche im Jahr 1999 eine Verdopplung der MPC-Anwendungen innerhalb von 5 Jahren auf ca. 4600 angeben. Dabei sind firmeninterne Eigenentwicklungen und Anwendungen aufgrund lizenzpflichtiger Software noch nicht enthalten. Im Vergleich spricht Canney (2003) von ca. 5000 Anwendungen von APC weltweit.

Die Lösung stationärer und dynamischer Optimierungsprobleme im laufenden Betrieb, welche auf komplexen Modellen von Gesamtprozessen oder mehreren Anlagenteilen basieren, wird auch als *Real-Time Optimization* (RTO) bezeichnet. Sie dient der Ermittlung optimaler Betriebsbedingungen bzw. optimaler dynamischer Trajektorien. Im Gegensatz zur modellbasierten Regelung ist hier die Zahl erfolgreicher industrieller Anwendungen gering (Schuler, 2006). Canney (2003) beziffert deren Anteil mit ca. 2% aller APC-Anwendungen.

2.2 Analyse und Bewertung von APC

Der Einsatz von APC-Systemen wird allgemein als bedeutungsvoll für das erfolgreiche Bestehen auf dem zunehmend härteren Markt angesehen. Ziel ist die Optimierung und Effizienzsteigerung der Produktion. Es bedarf jedoch bestimmter Voraussetzungen, um den erwarteten ökonomischen Vorteil durch APC auch tatsächlich zu erzielen.

Betrachtet man die in der Literatur beschriebenen Beispiele, so ergibt sich ein uneinheitliches Bild. APC-Lösungen stellen häufig individuelle Einzellösungen für spezifische Anwendungen dar. Naturgemäß findet sich nur eine verhältnismäßig geringe Anzahl kritischer Auseinandersetzungen mit der neuen Technologie. Die Ableitung allgemeingültiger Aussagen wird durch die Tatsache erschwert, dass der Begriff APC häufig als Synonym für MPC-Anwendungen gebraucht wird.

Der Einsatz und Nutzen von APC-Systemen wird jedoch durchaus kontrovers diskutiert. Dies geschieht besonders im Hinblick auf die Vielfalt existierender APC-Methoden. So diskutieren bspw. Reinig und Mahn (2000) und Martin und Dittmar (2005) praxisrelevante Kriterien für die geeignete Auswahl von APC-Methoden. In der folgenden Analyse soll der Fokus um allgemeine Aspekte, die sowohl technische als auch personelle Gesichtspunkte von APC umfassen, erweitert werden (Abb. 2.2).

	APC	pro	contra
Entwurf und Realisierung	finanziell	schnelle Amortisierung	lange und aufwendige Entwicklungszeit (Modellbildung)
	technisch & methodisch	steigende Anzahl von Methoden und Unterstützungswerkzeugen	ungenügender Entwicklungsstand, kein standardisiertes Vorgehen
	personelle Kompetenz	Grundlagenwissen vorhanden, Technologien sind relativ einfach	verstärkter Aufwand für Weiterbildung, externe Service-Dienstleister notwendig
Betrieb und Wartung	praktische Kriterien	stetige Weiterentwicklung praxisrelevanter Funktionen	geringe Robustheit, theoretische Methoden nicht praxisreif
	konzeptionell & didaktisch	Grundkonzept modellbasierter Systeme in kurzer Zeit und intuitiv verständlich	kausale Zusammenhänge komplexer Modelle schwer zu vermitteln, Beurteilung erfordert erhöhte Aufmerksamkeit
	ergonomisch	zunehmende Einbindung in prozessnahe Komponenten	kein allgemein anerkannter Bedienstandard

Abbildung 2.2: Positive und negative Aspekte höherer Prozessführungsmethoden (APC-Methoden)

finanziell Der Einsatz von APC ist letztendlich finanziell motiviert, wobei hauptsächlich der Aufwand für Entwurf und Implementierung durch den bei der Prozessoptimierung entstehenden Gewinn gerechtfertigt werden muss. Während im Bereich der OTS häufig Erfassungen von Schadenshöhen bzw. zeitliche Einsparungen bei der Anlageninbetriebnahme angeführt werden, um deren Einsatz zu rechtfertigen (Urbas, 1999; Kroll, 2003a; Deutel, 2004), ist der erwirtschaftete Gewinn aufgrund eines verbesserten Anlagenverhaltens nicht immer quantifizierbar (Reinig und Mahn, 2000). Ausserdem werden im Zuge einer APC-Implementierung häufig weitere Verbesserungen am Prozess vorgenommen (Bsp. Tuning der Basisregler), so dass der finanzielle Erfolg nicht eindeutig zuzuordnen ist (Hugo, 2000). Erfolgreiche Umsetzungen weisen eine relativ kurze Amortisierungszeit von weniger als einem Jahr (Schuler, 2006) bzw. 1-2 Jahren (Dittmar und Pfeiffer, 2006) auf. Wichtig ist, dass dabei auch finanzielle Faktoren für Wartung, Personalschulungen bzw. benötigte Servicekräfte berücksichtigt werden müssen

(Schuler, 2006).

technisch & methodisch Die digitale Prozessführung, die Vernetzung der Automatisierungsebenen (Enste und Uecker, 2002) und ausgereifte Algorithmen ermöglichen einen einfachen Zugriff auf APC-Technologien (Ted Su, 2004). Während die Mehrzahl auf separaten Systemen läuft werden APC-Komponenten auch zunehmend als Teil des Leitsystems angeboten (Dittmar und Pfeiffer, 2006). Es existiert bereits eine Fülle von Unterstützungswerkzeugen für die Identifikation, den Test und die Einbindung von MPC-Lösungen, mit dem Ziel den Aufwand von Entwurf und Realisierung zu minimieren (Reinig et al., 2000; Qin und Badgewell, 2003). Die automatische Identifikation und das Reglertuning für Mehrgrößensysteme werden allerdings nur begrenzt unterstützt (Qin und Badgewell, 2003). Weiterhin wird viel Aufwand getrieben, neben den gewöhnlich verwendeten *black-box* oder parameterfreien Modellen, auch parametrische Übertragungsfunktionen und Zustandsraummodelle in Verbindung mit Zustandsschätzverfahren bzw. Kopplungen zu Programmen mit rigorosen nichtlinearen Prozessmodellen, Fließschemata oder dynamischen Simulatoren für die Regelung zu nutzen (Dittmar und Pfeiffer, 2006).

personelle Kompetenz Die bereits in den 1970'er Jahren eingeführte APC-Technologie ist längst nicht mehr neu für Ingenieure. Ted Su (2004) weist darauf hin, dass im Rahmen von Aus- und Weiterbildung sowie durch die verfügbare Literatur das allgemeine Verständnis so weit gewachsen ist, dass die Methoden relativ einfach anwendbar sind. AspenTech räumt dagegen ein, dass nur etwa 10% seiner Kunden in der Lage sind, das kommerzielle MPC-Produkt DMC-plus ohne teure Engineering Leistungen zu nutzen (Reinig et al., 2000). Neben den Unterschieden zwischen Theorie und Praxis ist dies auch darauf zurückzuführen, dass die meisten Methoden noch keinen Status erreicht haben, in dem sie vom technischen Anlagenpersonal implementiert und gewartet werden können (Schuler, 2006). Hier ist intensives Training von Betriebs- und technischem Personal Voraussetzung, um eine hinreichende Kompetenz bei den Anwendern zu gewährleisten (Dittmar und Pfeiffer, 2006).

praktische Kriterien Die Praxistauglichkeit wird vor allem nach der Robustheit im Betrieb und Teilsystembetrieb (Anfahren, Systemausfall, Wartung) beurteilt. Hier zählt die Unterstützung von In- und Außerbetriebnahmen, dem Umschalten von manuellem auf automatischen Modus und der intelligente Umgang mit Sensor- und Softwarefehlern durch eine automatische Strukturanpassung (Reinig und Mahn, 2000; Dittmar und Pfeiffer, 2006). Bezüglich der Möglichkeit, Parameter oder Anlagendaten *online* zu ändern (Reglertuning), ist der Stand der Technik noch unzureichend (Schuler, 2006). Auch die Einbeziehung von Meß- und Modellfehlern rückt zunehmend in den Fokus der Entwicklungsarbeit. Robuste Regelungs- und Zustandsschätzverfahren sollen die Stabilität und Zulässigkeit bezüglich Beschränkungen garantieren (Camacho und Bordons, 2004).

konzeptionell & didaktisch Komplexe multivariate Modelle, die Vorhersage des dynamischen Prozessverhaltens und die Folgen für die Regelung sind häufig auch erfahrenen Operateuren und Ingenieuren nicht plausibel (Ted Su, 2004). Ein besonderes Problem optimierungsbasierter APC-Systeme stellt die Diskrepanz zwischen den vom Operator verfolgten Zielen (sicherer und robuster Betrieb) und den vom Management bestimmten Kriterien für die optimale Betriebsführung (Profitmaximierung durch Betrieb an den Prozessgrenzen) dar. Allgemein erfordert die Überwachung automatischer Eingriffe, besonders in Verbindung mit langsamen Störungen und Dynamiken (Hugo, 2000) oder unter der simultanen Berücksichtigung verschiedener (häufig konkurrierender) Zielvorstellungen und Beschränkungen eine erhöhte Aufmerksamkeit. Trotz der genannten Schwierigkeiten bemerken Dittmar und Pfeiffer (2006), dass auch ohne den mathematischen Hintergrund, zumindest das Grundkonzept von MPC für alle Anwender (also auch den Operateur) in kurzer Zeit und intuitiv verständlich und damit auch der Aufwand für die Einsatzvorbereitung und Betriebsbetreuung überschaubar sei. Zusätzlich wird versucht, durch die Weiterentwicklung automatisierter Systeme für die Überwachung und Bewertung konventioneller Regler (CPM: (Dittmar et al., 2003; Nohr und Boll, 2003; Pfeiffer, 2005b)) auch Unterstützungswerkzeuge für die Bewertung von APC-Systemen bereitzustellen (Mitchell et al., 2007).

ergonomisch Während 80% der konventionellen Automatisierungssysteme aus wiederverwendbaren Standardblocks bestehen (Burmester et al., 2000), haben sich vor allem für die grafische Integration von APC in betriebsspezifische Bedienkonzepte noch keine einheitlichen Standards etabliert (Reinig und Mahn, 2000). Dabei eröffnen die gestiegenen Anforderungen an die prozessnahen Komponenten (PNK) des Prozessleitsystems (PLS) die technischen Möglichkeiten, auch APC-Lösungen direkt auf den PNK laufen zu lassen. Die Integration vorgefertigter standardisierter Funktionsbausteine und Bedienoberflächen wird jedoch hauptsächlich im Hinblick auf die Reduktion des Entwicklungsaufwandes verfolgt (Qin und Badgewell, 2003; Dittmar und Pfeiffer, 2004). Burmester et al. (2000) und Komischke und Burmester (2001) bemerken, dass die nutzerzentrierte Gestaltung von Anzeige- und Bedienkomponenten allgemein eine untergeordnete Rolle bei der Systemgestaltung in der Automatisierungstechnik spielt. So werden Fragen der Bedienbarkeit und Ergonomie auf fundamentale Grundlagen, wie Gestalt und Farbe von Elementen des BuB, reduziert.

2.3 Nutzerzentrierte Betrachtung von APC

Der Erfolg von APC ist nicht allein von der effektiven und kostengünstigen Implementierung, sondern auch von anwendungsspezifischen Faktoren abhängig. Dennoch wird die Entwicklung größtenteils einseitig vorangetrieben. Primäres Ziel ist die Verbesserung der Betriebsführung. Daneben werden die Belange von Operateuren, aber auch von Betriebsingenieuren, Service und Wartung nur sekundär berücksichtigt.

Generell gilt, dass gut ausgebildete Operateure, mit guten Unterstützungswerkzeugen einen größeren Arbeitsumfang bewältigen können. Während für klassische PID-Regelkreise praktische Einschätzungen von 200 bis maximal 280 Regelkreisen ausgehen, welche von einem Operateur überwacht werden können (Nimmo, 2005), ist die Anzahl für komplexe Automatisierungssysteme weitaus geringer.

Die Situation von Operateuren im Umgang mit hoch-automatisierten Mensch-Maschine-Systemen wird in Sheridan (1997) diskutiert, welcher für die Tätigkeiten des Operateurs den Begriff des *supervisory control*¹ prägte. Ein wichtiges Merkmal ist der geringe Anteil an direkten Steuerungsaufgaben. Dagegen bildet die Überwachung automatisch ausgeführter Aktionen sowie die Diagnose von Fehlfunktionen eine wichtige Aufgabenklasse (Sheridan, 1997; Kindsmüller, 2006). Die Arbeitsbelastung wird im wesentlichen durch die Informationsaufnahme und die Beurteilung der aktuellen Situation bestimmt.

In diesem Zusammenhang nennen Wickens und Hollands (2000) vier typische Probleme hochautomatisierter Systeme, welche hier speziell im Hinblick auf APC-Systeme diskutiert werden.

- APC-Systeme funktionieren aufgrund ihrer hohen Komplexität nicht immer erwartungskonform, was zu Fehleinschätzungen führen kann. Dies ist vor allem durch die besprochenen konzeptionellen Mängel bedingt (Kap. 2.2). Allgemein sind die Systeme jedoch auch fehleranfälliger und machen eine Überwachung notwendiger.
- Die Folgen einer geringen Erwartungskonformität oder Zuverlässigkeit sind Verwirrung bzw. Mißtrauen, welche zum Nicht-Gebrauch bzw. der Nicht-Beachtung des Systems führen können (*undertrust*, (Wickens und Hollands, 2000)). Dabei sind diese Empfindungen durchaus subjektiv. So bemerkt Hugo (2000), dass auch für gut funktionierende MPC-Lösungen schon das unregelmäßige/unerwartete Verhalten zum Abschalten des Systems durch den Operateur führen kann.
- Das Gegenteil stellt das übermäßige Vertrauen (*overtrust*, (Wickens und Hollands, 2000)) dar, welches bis zur Gleichgültigkeit gegenüber dem Systemverhalten führen kann. Als Folge findet keine kritische Überwachung des Systems mehr statt und der Operateur verliert seine Fähigkeiten, Fehlverhalten zu erkennen und das System im Falle eines Ausfalls zu ersetzen.
- Schließlich besitzen APC-Systeme häufig kein transparentes Verhalten bezüglich ihrer Systemfunktionen, was auf ungenügende Rückmeldungen und eingeschränkte Dialogsysteme zurückzuführen ist (Wickens und Hollands, 2000). Dies ist im besonderen auf ergonomische Mängel der Bediensysteme zurückzuführen (Kap. 2.2).

¹Der Begriff *supervisory control* kann nach Kindsmüller (2006) als '(an-)leitende Steuerung' übersetzt werden.

2.4 Motivation & Zielstellung

Intransparente, unverständliche und/oder nur schwer zu bedienende Systeme verlangen einen erhöhten Arbeitsaufwand und zwingen dem Anwender Systemeigenheiten auf. In der Praxis führt dies zu einem Akzeptanzverlust der Systeme, welche bis zur Ignoranz bzw. dem Abschalten führen kann. Im Rahmen dieser Arbeit wird vor allem versucht, dem Operateur das Maximum an hilfreicher Information für seine Überwachungstätigkeit anzubieten. Die Kernhypothese besteht dabei in der Annahme, dass mit der Erhöhung der Transparenz der Darstellung zugrundeliegender Informationen sowie der Funktionsweise von Automatisierungssystemen, eine akzeptanzförderliche Wirkung erzielt wird.

Mit dem Ziel eine geeignete verständnisförderliche Visualisierung zu entwickeln, welche ein Schlüsselement für den angemessenen operativen Umgang mit modellbasierten Systemen darstellt, wird die Entwicklung innovativer Darstellungsformen verfolgt.

Da die Schnittstellengestaltung von APC-Systemen aufgrund der Vielfalt der Produkte und Entwicklungen noch nicht an Standards oder Konventionen gebunden ist, ergibt sich die Gelegenheit, relativ frei Gestaltungslösungen zu generieren und zu testen. Der Fokus sollte dabei auf der Entwicklung von standardisierten Grafikelementen liegen. Damit wird letztendlich sowohl die ergonomische Qualität, als auch die effiziente Implementierung von APC-Systemen garantiert (Komischke und Burmester, 2001).

Die Lösungen sollten eine Erweiterung bereits existierender Elemente des BuB darstellen und sich an deren Konventionen und Richtlinien orientieren. Die Gebrauchstauglichkeit der Lösung ist zu prüfen und zu bewerten. Weiterhin soll die Machbarkeit sowohl der Gestaltung als auch der automatisierungstechnischen Umsetzung prototypisch nachgewiesen werden.

2.5 Lösungsansatz für die nutzerzentrierte Visualisierung modellbasierter Systeme

Der Einsatz von APC verursacht relevante Änderungen in der Arbeitssituation des Menschen. Vor diesem Hintergrund verweist Wittenberg (2004) auf die Vorgehensweisen zur Systemgestaltung in DIN EN ISO 13407 (1999). Danach sind zunächst die Anforderungen des Benutzers an das System zu erheben, mit dem Ziel diese bereits in frühen Phasen von Gestaltungsprozessen zu berücksichtigen. Da in dieser Arbeit die Einbindung von modellbasierten Systemen in die konventionellen BuB verfolgt wird, sind bei der Gestaltung gewisse Randbedingungen zu berücksichtigen, welche in den entsprechenden Richtlinien und Empfehlungen zur Gestaltung von Bildschirmsystemen in der Leitwarte formuliert sind (VDI/VDE 3699, Blatt 1, 2005) bis (VDI/VDE 3699, Blatt 6, 2002).

2.5.1 Erhebung von Vorschlägen und Richtlinien / Expertenbefragung

Die grundsätzlichen Anforderungen an die Gestaltung von Mensch-Maschine-Schnittstellen sind unter Berücksichtigung des Nutzerkontextes, also seiner Arbeitsaufgaben, Arbeitsmittel sowie der physischen und sozialen Umgebung, zu erfassen (DIN EN ISO 9241-11, 1998). Diese wurden im Rahmen dieser Arbeit während eines zweistündigen Arbeitstreffens als Gestaltungsrichtlinien für die Darstellung modellbasierter Prozessgrößen formuliert und in Form erster Visualisierungsvorschläge veranschaulicht (Barz et al., 2006b). Dazu wurden ca. 25 Teilnehmer aus dem universitären Umfeld, mit mindestens einjähriger Tätigkeit auf dem Gebiet der Mensch-Maschine-Interaktion (Kraftfahrzeugführung, Flugsicherung, Kommunikationssysteme, ...), eingeladen.

Die Zusammenarbeit mit Experten aus sehr unterschiedlichen Domänen ermöglichte die Sammlung einer sehr breiten Palette von Ideen und Hinweisen zur Gestaltung. Operateure können hier vergleichsweise wenig konkrete und detaillierte Informationen beisteuern, da sie mental zu sehr an existierende Systeme gebunden sind Komischke und Burmester (2001). Die Informationen zum prozesstechnischen Hintergrund und zum Nutzerkontext wurden für die durchgeführten Untersuchungen im Rahmen einer einführenden Präsentation sowie durch die Unterstützung von fünf Prozessführungsexperten vermittelt.

Während des Arbeitstreffens wurden zunächst am Beispiel einer Hochdruckkolonne (siehe Kap. 4) die konventionellen Steuerungs-, Automatisierungs- und Überwachungseinrichtungen des konventionellen Leitsystems speziell für die Darstellungsräume: Fließbild, Gruppenbild und Kurvenbild diskutiert. Anschließend wurde eine modellbasierte Erweiterung vorgestellt, welche zusätzliche Informationen (z.B. Softsensor, Prädiktion) zur Beurteilung des aktuellen und zukünftigen Prozessgeschehens liefert. Die Funktionsweise und Einsetzbarkeit der Methoden wurde anhand konkreter experimenteller Anwendungsszenarien der Anlage beispielhaft illustriert (siehe auch Kap. 5). Dabei wurde auf die wesentlichen Anwendungsgebiete (Vorhersage dynamischen Prozessverhaltens, Ermittlung nicht-messbarer Zustände, automatisierte Prozessführung) eingegangen, Grenzen des Systems aufgezeigt und typische Vorgehensweisen für die Beurteilung und Bewertung der modellbasierten Informationen diskutiert.

Im Folgenden wurde in fünf Kleingruppen, welche von je einem Prozessführungsexperten geleitet wurden, jeweils ein Darstellungsraum bearbeitet.

Zunächst wurde die Frage nach der Notwendigkeit der Darstellung folgender Sachverhalte diskutiert. Die Darstellung:

- der Funktionsweise verwendeter mathematischer Algorithmen,
- vom Algorithmus berechneter Größen,
- fehlerhafter Annahmen des Systems,
- vorhergesagten Prozessverhaltens,
- modellierter Wirkmechanismen von Prozessgrößen.

Im Anschluss wurden konkrete Darstellungsvarianten entworfen und hinsichtlich folgender Kriterien bewertet:

- Unterstützungspotential für den Operateur,
- Transparenz der Darstellung,
- Konsistenz zu Standard-Visualisierungsformen.

2.5.2 Ergebnisse

Als Ergebnis wurden folgende Punkte von den Teilnehmern des Arbeitstreffens als wichtig erachtet:

- klare Unterscheidung modellbasierter und echter Prozessgrößen,
- Transparenz der Datengrundlage, Statusanzeige der Funktion,
- Adaptierbarkeit des Umfanges von Nutzung und Darstellung des Systems,
- Bereitstellung von Indikatoren für die Güte modellbasierter Daten,
- Nutzung konventioneller Bildelemente und Dialogsysteme,
- gemeinsame Darstellung modellbasierter und gemessener Prozessgrößen,
- Verzicht auf explizite Vermittlung von Prozesswissen im BuB.

Die Erhöhung der Nutzungswahrscheinlichkeit durch die Förderung der Nutzerakzeptanz steht klar im Vordergrund. Aufgrund des hohen Automatisierungsgrades, der Grenzen der modellbasierten Verfahren sowie der daraus resultierenden hohen Anforderungen an die Überwachung, wurde die Notwendigkeit eines quantitativen Indikators, als Maß für die Güte modellbasierter Daten, betont. Dieser soll als eine Grundlage für die Beurteilung des modellbasierten Systems dienen und möglichst einheitlich, mit fester Skala (0-100%), arbeiten. Der Verzicht auf die Visualisierung von Wirkzusammenhängen der Prozessgrößen auf dem Detaillierungsgrad der zugrunde liegenden mathematischen Modelle ist der Berücksichtigung der Unterschiede in den mentalen Prozessmodellen der einzelnen Anlagenfahrer geschuldet. Das Kurvenbild wurde allgemein als besonders geeigneter Darstellungsraum angesehen. Dies deckt sich mit Untersuchungen von Kindsmüller (2006), in denen die herausragende Bedeutung der Kurvendarstellung (das „Fenster zum Prozess“) für die Trendinterpretation und damit die Beurteilung des dynamischen Prozessverhaltens betont wird.

Weiterhin wurden konkrete Gestaltungsvorschläge im Besonderen für die Visualisierung modellbasierter Daten, der Güteindikatoren sowie die Darstellung zeitlicher Vorhersagen gesammelt. Die Auswertung wird im Kapitel 7 beschrieben.

3 Theoretische Grundlagen zur Güte modellbasierter Daten

Ausgehend von der Hypothese, dass die Steigerung der Transparenz modellbasierter Systeme akzeptanzförderlich wirkt, wurde als zentrales Anforderungskriterium für die Visualisierung modellbasierter Daten die Darstellung eines Indikators für ihre Güte gefordert (Kap. 2.5). Im Folgenden soll zunächst geklärt werden, welche Rolle die damit verbundenen Begriffe Zuverlässigkeit und Verlässlichkeit in den einzelnen Disziplinen der Automatisierungstechnik einnehmen, in welchem Zusammenhang sie verwendet werden und welche qualitativen und quantitativen Bewertungsmaßstäbe für sie gelten (Kap. 3.1). Es werden Schlussfolgerungen für diese Arbeit abgeleitet. Im Kapitel 3.2 werden Einflüsse auf die Genauigkeit modellbasierter Daten und Strategien zum Umgang mit unsicheren Prozessmodellen untersucht. Schließlich werden die in dieser Arbeit verwendeten numerischen Grundlagen präsentiert (Kap. 3.3).

3.1 Verlässlichkeit von Automatisierungssystemen

APC-Systeme sind software-basierte Komponenten industrieller Echtzeit- bzw. Automatisierungssysteme. Sie nutzen die bestehenden Strukturen für den Daten und Informationsaustausch und können aktiv das Prozessgeschehen beeinflussen. Sie sind daher sicherheitskritisch.

Ingenieurtechnische Sicherheitsbetrachtungen dienen in erster Linie der Gefahrenanalyse, welche von der Sicherheit einer Betrachtungseinheit abhängt. Es resultiert ein bestimmtes Risiko, dessen Vertretbarkeit von der Wahrscheinlichkeit des Auftretens zum Schaden führenden Zustände oder Ereignisse bzw. vom zu erwartenden Schadensausmaß abhängt (VDI/VDE 3542, Blatt 2, 2000). Nach (DIN VDE 31000-2, 1979), ist ein System sicher, falls das Risiko aller Einzelvorgänge kleiner ist, als ein definiertes Grenzkrisiko. Das vertretbare Grenzkrisiko wird dabei indirekt anhand sicherheitstechnischer Festlegungen definiert.

Sicherheitstechnische Normen und Richtlinien beziehen sich auf Verhaltensmerkmale technischer Erzeugnisse, Systeme und Systemkomponenten denen stochastische Prozesse zugrunde liegen. Hier sind in erster Linie die Zuverlässigkeit und Verfügbarkeit relevant (VDI/VDE 3542, Blatt 2, 2000; VDI/VDE 3542, Blatt 4, 2000). Die Richtlinien VDI 4004, Blatt 1-4 (1986) geben konkrete Hinweise zu den mathematischen Vorgehensweisen für die Ermittlung probabilistischer Kennzahlen, welche mit Hilfe funktionslogischer Verknüpfungen für die Risiko- und Gefahrenanalyse herangezogen werden können.

Im Rahmen der klassischen Softwareentwicklung gilt der Begriff der Zuverlässigkeit (*engl. reliability*) von Softwareprodukten als eines der wichtigsten Qualitätsmerkmale (Sommerville, 1996; Balzert, 1998). Der Begriff wird analog zur Hardwarezuverlässigkeit (VDI/VDE 3542, Blatt 4, 2000) als Fähigkeit definiert, ein spezifiziertes Leistungsniveau unter festgelegten Bedingungen über einen festgelegten Zeitraum zu bewahren (DIN ISO 9126, 1991).

Industrielle Echtzeit- bzw. Automatisierungssysteme werden neben der Zuverlässigkeit besonders auch bezüglich ihrer inhärenten Sicherheit bewertet. Besonders im Hinblick auf Entwurfs- und Herstellungsfehler lassen sich hier klassische Sicherheitskenngrößen nicht mehr anwenden. Vor diesem Hintergrund wird der von Laprie geprägte Begriff der Verlässlichkeit (*engl. dependability*) eingeführt (Avizienis et al., 2001; Sommerville, 1996; Kochs, 2001; Kochs und Petersen, 2002). Die Verlässlichkeit vereint klassische Systemattribute wie Sicherheit, Zuverlässigkeit und Verfügbarkeit, aber auch die Wartbarkeit und Leistungsfähigkeit von Komponenten und Systemen (Kochs, 2001; Avizienis et al., 2001). In VDI/VDE 3542, Blatt 4 (2000) wird sie als „Grad des Vertrauens, das aufgrund geringer Versagenswahrscheinlichkeit, großer Korrektheitswahrscheinlichkeit oder geringer Ausfall- bzw. Versagensrate gerechtfertigt scheint“ aufgefasst. Kochs (2001) und Kochs und Petersen (2002) schliessen zusätzlich sowohl interne, als auch externe Einflüsse der Betrachtungseinheit, einschließlich der Mensch-Maschine-Interaktion, ein.

Mit dem Ziel der ganzheitlichen Optimierung von Mensch-Maschine-Systemen wird der Begriff der Verlässlichkeit im Kontext der Arbeits- und Ingenieurspsychologie noch weiter gefasst (Timpe et al., 2002; Giesa, 2003). Er charakterisiert die anforderungsgerechte Zielerreichung eines Mensch-Maschine-Systems (MMS). Im Vordergrund steht dabei die gestaltungsrelevante Systembewertung für festgelegte kognitive Anforderungsprofile des Menschen. Während Verlässlichkeitsaspekte (bspw. die menschliche Handlungszuverlässigkeit) anhand von probabilistischen Sicherheitsanalysen oder Expertenschätzungen erhoben werden können, ist die Verlässlichkeit selber quantitativ nicht erfassbar. So verwendet Giesa (2003) bspw. quantitative Indikatoren, wie die Nutzerbeanspruchung, für die Bewertung von Kommunikationsschnittstellen im Flugsimulator.

3.1.1 Zusammenfassung und Implikationen für diese Arbeit

Der Begriff der Verlässlichkeit vereint bereits normierte Größen, im Besonderen die Sicherheit und Zuverlässigkeit und ist auf APC-Technologien anwendbar. Er ist allerdings zum aktuellen Zeitpunkt noch nicht einheitlich definiert und wird auch hier nur qualitativ verwendet:

Definition 3.1 *Die Verlässlichkeit modellbasierter Automatisierungssysteme ist der Grad des Vertrauens, das der Funktionsfähigkeit entgegengebracht wird. Sie beeinflusst maßgeblich die Akzeptanz des Systems und wird anhand der (quantitativen) Ergebnisunsicherheit der zugrundeliegenden Daten beurteilt.*

Modellbasierte Daten werden entsprechend DIN 55350-12 (1989) und DIN 55350-13 (1987) als Ermittlungsergebnisse verstanden, welche aus Beobachtungs-, Mess-, Berechnungs- bzw. statistischen Schätzverfahren oder Kombinationen daraus resultieren können. „Ein Ermittlungsergebnis ist im allgemeinen nur dann vollständig, wenn es eine Angabe über die Ergebnisunsicherheit (...) enthält.“ (DIN 55350-12, 1989). Die Ergebnisunsicherheit ist ein geschätzter Betrag zur Kennzeichnung eines Wertebereichs, in dem das Ermittlungsergebnis liegt. Sie wird hier als quantitativer Indikator für die Güte modellbasierter Daten und damit für die Beurteilung der Zuverlässigkeit des Automatisierungssystems herangezogen. Die Forderung nach einem quantitativen Indikator oder Gütemaß ist das Ergebnis des Arbeitskreises zur Visualisierung modellbasierter Daten (Kap. 2.5), wobei dort explizit ein relatives Gütemaß gewünscht wurde. Dieses entspricht einer Ergebniswahrscheinlichkeit und ist mit der Existenz eines Bezugswertes bzw. eines geforderten Toleranzmaßes, wie es bspw. für die Berechnung des Prozessfähigkeitsindex gebraucht wird (DIN 55350-33, 1993), verbunden.

Die Herausforderung liegt nun in der Ermittlung der Ergebnisunsicherheit bzw. der Ergebniswahrscheinlichkeit. Aufgrund der Komplexität höherer Automatisierungssysteme können nicht alle Einflussfaktoren auf diese Indikatoren berücksichtigt werden. Die Indikatoren sind daher nicht exakt, vervollständigen jedoch die bereitgestellten Informationen und sind als Aufforderung zur kritischen Auseinandersetzung mit dem modellbasierten System zu verstehen¹.

3.2 Ergebnisunsicherheit modellbasierter Daten

Obwohl für viele Prozessklassen und verfahrenstechnische Grundoperationen bereits anerkannte Modelle genutzt werden können, existieren exakte Abbildungen von konkreten Anlagen und Anlagenteilen in der Praxis nur selten (Srinivasan et al., 2003a; Venkatasubramanian et al., 2003). Dies ist vor allem auf den großen Aufwand zurückzuführen, der mit der Erstellung und Anpassung akkurater mathematischer Prozessmodelle verbunden ist (Schuler, 2006). Die für APC-Systeme verwendeten Modelle geben daher das Prozessverhalten nur im begrenzten Maße wieder. Sie haben im Vergleich zu den übrigen, größtenteils standardisierten Komponenten, moderner Leitsysteme einen weit größeren Einfluss auf die Ergebnisunsicherheit modellbasierter Daten. Es werden in dieser Arbeit daher ausschließlich Modellunsicherheiten für die Ermittlung der Ergebnisunsicherheit berücksichtigt.

3.2.1 Unsicherheiten von Prozessmodellen

Die Modellgüte wird gewöhnlich durch Unsicherheiten in der Beschreibung gekennzeichnet. Diese können sowohl die Modellstruktur, als auch unbekannte interne und externe Parameter

¹An dieser Stelle soll noch einmal darauf hingewiesen werden, dass es nicht das Ziel dieser Arbeit ist, die Ergebnisunsicherheit modellbasierter Daten zu minimieren. Vielmehr werden Methoden zur Ermittlung und geeigneten Visualisierung von Güteindikatoren modellbasierter Daten untersucht.

und Randbedingungen betreffen. Für die chemische Verfahrenstechnik lassen sich Unsicherheiten wie folgt klassifizieren (Ierapetritou et al., 1996):

1. Modell-inherente Unsicherheiten: Betreffen Prozessparameter, die anhand experimenteller Daten im Labor oder Technikum bestimmt werden. Dies können z.B. kinetische Parameter oder Wärmeübergangszahlen sein. Die Unsicherheiten lassen sich durch Fehlerbetrachtungen quantifizieren.
2. Prozess-inherente Unsicherheiten: Betreffen Betriebsvariablen wie den Durchfluss- oder die Temperatur. Diese Parameter sind abhängig von der Basis-Regelung des Prozesses. Unsicherheiten können durch Auswertung der Prozessdaten (z.B. automatische Werkzeuge zum CPM) quantifiziert werden.
3. Externe Unsicherheiten: Betreffen äussere Einflussgrößen, die nicht vom Prozess beeinflusst werden können. Die können Feedbedingungen, Produktspezifikationen und Gewinne/Kosten sein. Unsicherheiten werden aufgrund historischer Prozessdaten und Marktanalysen quantifiziert.
4. Diskrete Unsicherheiten: Betreffen die Verfügbarkeit von Anlagen und Einrichtungen. Hier werden diskrete Wahrscheinlichkeitsverteilungen zur Beschreibung von Unsicherheiten genutzt, wie sie aus Datenblättern der Hersteller entnommen werden können².

Die für die Prozessführung relevanten Unsicherheiten ξ lassen sich durch Gauß'sche Normalverteilungen charakterisieren, mit $\xi \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$. Diese werden durch ihren Erwartungswert $E\{\xi\} = \mu$ und die Varianz $E\{\xi \xi^T\} = \sigma^2$ vollständig beschrieben. Sie kommen in der Natur relativ häufig vor, da Zufallsvariablen als Summe vieler stochastisch gleichverteilter Zufallsgrößen eine Normalverteilung ergeben (zentraler Grenzwertsatz).

$$\rho(\xi|\mu, \sigma) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left[-\frac{1}{2} \frac{(\xi - \mu)^2}{\sigma^2}\right] \quad (3.1)$$

Für den multivariaten Fall, $\boldsymbol{\xi} = [\xi_1 \cdots \xi_m]^T$ mit $\boldsymbol{\xi} \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ ergibt sich die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion aus dem Produkt der Einzel-Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen:

$$\rho(\boldsymbol{\xi}|\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^m \det \boldsymbol{\Sigma}}} \exp\left[-\frac{1}{2}(\boldsymbol{\xi} - \boldsymbol{\mu})^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{\xi} - \boldsymbol{\mu})\right] \quad (3.2)$$

mit dem Vektor der Erwartungswerte $\boldsymbol{\mu}$ und der symmetrischen Kovarianzmatrix $\boldsymbol{\Sigma}$. Die Varianzen $\sigma_i^2, i = 1, \dots, m$ befinden sich auf der Diagonalen von $\boldsymbol{\Sigma}$. Sind die Zufallsvariablen paarweise korreliert, nehmen die Nebenelemente die Werte der Kovarianz an:

$$\text{cov}(\xi_j, \xi_k), \quad (j, k = 1, \dots, m; j \neq k) \quad (3.3)$$

²Diskrete Unsicherheiten sind für die Prozessführung weniger relevant und werden hier nicht berücksichtigt.

3.2.2 Einfluss von Modellunsicherheiten auf Prozessgrößen

Als Folge der expliziten Berücksichtigung von Unsicherheiten sind die Lösung der Modellgleichungen (Simulation) und die Ermittlung optimaler Entscheidungen (Optimierung) stochastische Problemstellungen. Ermittelte Prozessgrößen sind mit einer Ergebnisunsicherheit zu kennzeichnen. Optimale Entscheidungen sind bezüglich dieser Unsicherheiten zu bewerten.

Am Beispiel des Dampf-Flüssig-Gleichgewichtsmodells (*Vapour-Liquid-Equilibrium-VLE*) für Acetonitril-Wasser (Wilson Ansatz, siehe Anhang 9.3) wird der Einfluss einer unsicheren Betriebsvariablen illustriert (Abb. 3.1). Die unsichere Betriebsvariable ist die Temperatur (bspw. aufgrund von Messunsicherheiten oder Reglerschwankungen). Sie wird als normalverteilte Größe beschrieben. In Abhängigkeit des Drucks, lässt sich durch Lösen der nichtlinearen Modellgleichungen die Konzentration am Siedepunkt berechnen. Die resultierende Verteilung der Konzentrationen wird hier durch Monte-Carlo-Sampling mit 5000 Simulationen approximiert. Es existieren 2 physikalisch mögliche Lösungen, jeweils für die linke und rechte Siedelinse. Stehen die unsicheren Variablen in einer nichtlinearen Beziehung zu den Ausgangsvariablen,

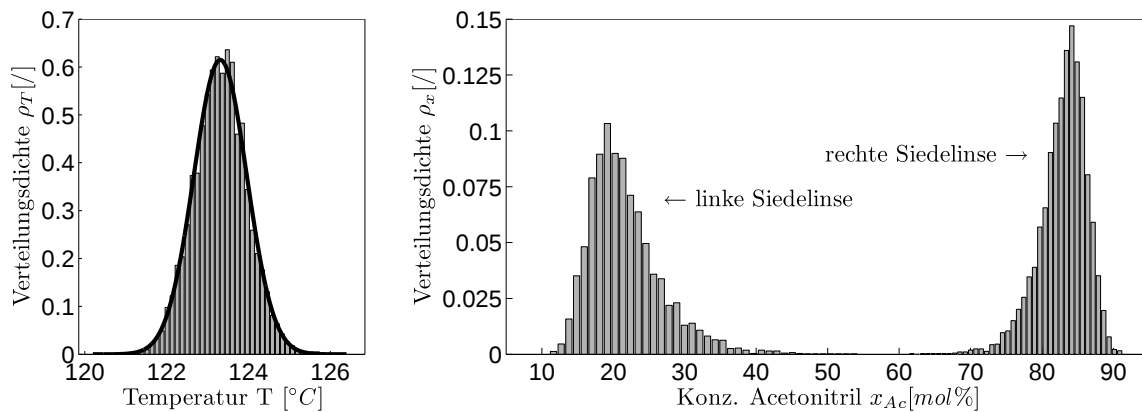


Abbildung 3.1: Konzentrationsbestimmung durch Druck und Temperaturmessungen auf Basis eines VLE-Modells, **links**: bekannte Verteilung der unsicheren Betriebsgröße Temperatur, **rechts**: approximierter Verteilung der unsicheren Ausgangsgrößen Konzentration ($p = 3,85$ bar, $T \sim \mathcal{N}(\mu = 123,4^{\circ}\text{C}, \sigma = 0,65 \text{ K})$)

so lässt sich deren Verteilung nicht mehr durch eine Normalverteilung beschreiben (Abb. 3.1, rechts). Dieses Verhalten ist typisch für verfahrenstechnische Problemstellungen. Im Folgenden wird die Abschätzung von Ergebnisunsicherheiten sowie die Berücksichtigung von Unsicherheiten bei der Ermittlung optimaler Entscheidungen bzw. bei der optimalen Schätzung von Zuständen diskutiert.

3.2.3 Modellgestützte Überwachung

Verfahren der modellgestützten Überwachung haben das Ziel, die Prozessführung durch die Bereitstellung zusätzlicher Informationen zu verbessern. Der einfachste Ansatz ist die Simulation

für bekannte Betriebsgrößen. Methoden der Zustands- und Parameterschätzung basieren auf der optimalen Anpassung von modellbasierten Prozessgrößen an Messdaten. In beiden Fällen lassen sich aufgrund der Verknüpfung der modellierten Prozessgrößen über die Modellgleichungen für alle modellierten Prozessgrößen Werte ermitteln. So können Betriebskenngrößen (bspw. Reaktionswärme, Wärmeübergangszahl) aber auch nicht oder nur aufwendig meßbare Qualitäts- bzw. Sicherheitskenngrößen (bspw. Produktspezifikationen, Kristallgrößenverteilungen, Eduktakkumulationen) für die Überwachung, als Grundlage für die Regelung aber auch für die automatische Fehlererkennung (Venkatasubramanian et al., 2003; Huang et al., 2003) genutzt werden.

Neben der Ermittlung nicht-messbarer Prozessgrößen können durch den Vergleich von Prozessdaten und Modelldaten auch Messfehler identifiziert bzw. korrigiert werden (*data reconciliation*). Faber et al. (2003) bzw. Faber et al. (2004) präsentieren die Anwendung auf unsichere bzw. fehlerbehaftete Messdatensätze eines stationären Koksofengasreinigungsprozesses. Im Anschluss wurden die verbesserten Messdaten mehrerer Datensätze für die Parameterschätzung genutzt.

Die verwendeten Verfahren basieren auf der Auswertung des Fehlers $\varepsilon(\theta)$ zwischen den gemessenen $\mathbf{y}^{mess}$ und den berechneten Messwerten $\mathbf{g}[\mathbf{x}, \mathbf{u}, \theta]$ (Kap. 3.3.7).

$$\varepsilon(\theta) = \mathbf{y}^{mess} - \mathbf{g}[\mathbf{x}, \mathbf{u}, \theta] \quad (3.4)$$

Hier werden Unsicherheiten der Messdaten und der Modellparameter im Fehlervektor $\varepsilon(\theta)$ zusammengefasst. Im Gegensatz dazu unterscheiden spezielle dynamische Zustands- und Parameterschätzverfahren, wie der Kalman-Filter und der Moving-Horizon-State Estimator, explizit zwischen Modell- und Messunsicherheiten. Modellunsicherheiten werden jedoch nur allgemein als additives Systemrauschen quantifiziert ohne einen direkten Bezug zu unsicheren Parametern zu geben (siehe auch Kap. 3.3.8):

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{f}[\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t), \theta, t] + \boldsymbol{\xi}(t) \quad (3.5)$$

Gesthuisen (2001) führt umfangreiche theoretische Untersuchungen zum Einsatz beider Verfahren zur Schätzung von Produkteigenschaften am Beispiel von drei Polymerisationsprozessen durch. Deren experimentelle Anwendung wird in Heine (2004) für die Schätzung nicht-messbarer Zustände und Modellparameter eines Fed-Batch-Prozesses zur Antibiotika-Produktion präsentiert. Unter der Berücksichtigung von Modellungenauigkeiten gewinnt die Ermittlung von Prozessgrößen und -parametern eine zusätzliche Bedeutung. Durch die gezielte Anpassung von Parametern kann die (lokale) Gültigkeit des Modells auch für verschiedene Arbeitspunkte gewährleistet werden. Zusätzlich wird sichergestellt, dass die Prozessgrößen den gemessenen Größen entsprechen bzw. diesen nachgeführt werden. Damit sind die Voraussetzungen für die modellbasierte Prozessführung geschaffen.

3.2.4 Modellgestützte Betriebsführung unter Unsicherheiten

Die Optimalität von Entscheidungen wird anhand zu minimierender (oder maximierender) Kriterien (bspw. Betriebskosten) bewertet. Weiterhin sind Beschränkungen bezüglich der Prozessgrößen und Entscheidungsgrößen zu berücksichtigen (bspw. maximale Prozesstemperatur oder maximaler Kühlwasserstrom). Der funktionale Zusammenhang zwischen Zielkriterien sowie Prozessgrößen und Entscheidungsgrößen (bspw. Energie- und Rohstoffeinsatz) liefert das unsichere Modell. Im Folgenden werden nur in der Prozessführung relevante Vorgehensweisen für die Berücksichtigung von Unsicherheiten diskutiert. Die Flexibilität bzw. Regelbarkeit eines Prozesses in Abhängigkeit des gewählten Designs ist daher nicht Gegenstand der Arbeit (Grossmann et al., 1983; Sakizlis et al., 2004). Skogestad (2004) und Govatsmark und Skogestad (2005) weisen weiterhin auf den Einfluss der Reglerstruktur auf die Robustheit des optimalen Betriebs hin. Auch dieser Punkt wird im Rahmen dieser Arbeit nicht betrachtet.

Für die Ermittlung optimaler Entscheidungen auf Basis von Prozessmodellen lassen sich direkte und indirekte Vorgehensweisen zur Berücksichtigung von Unsicherheiten unterscheiden.

Indirekte Methoden

In der industriellen Praxis erfolgt die Auslegung und Planung von Anlagen anhand deterministischer Vorgehensweisen. Zufallswerte werden durch ihre Erwartungswerte ersetzt. Das Ergebnis wird durch die Verwendung empirischer Faktoren, welche aus Sicherheits- und Robustheitsbetrachtungen resultieren, korrigiert (Grossmann et al., 1983). Das Resultat sind konservative Entscheidungen (bspw. die Überdimensionierung von Anlagenteilen, die Übererfüllung von Spezifikationen und Sicherheitsvorschriften). Die Wahl von Betriebsvariablen erfolgt analog. Hier werden Unsicherheiten und Betriebsschwankungen durch die konservative Vorgabe von Entscheidungen (Sollwerten) kompensiert. Laut Henrion et al. (2001) und Li (2007) lassen sich ebenso *worst-case*-Analysen sowie der Kompensationsansatz zu den indirekten Methoden zählen.

Werden modellbasierte Systeme im laufenden Betrieb (*online*) eingesetzt, so lassen sich durch die Einbeziehung der Messdaten (*feed-back*) Entscheidungen iterativ verbessern und damit Modellunsicherheiten kompensieren. Dieses Standardvorgehen aus der Regelungstechnik findet auch in der modellbasierten Prozessführung Anwendung. Eine Erweiterung dieses Ansatzes stellt die Kombination mit Methoden der Zustands- und Parameterschätzung dar (Kapitel 3.2.3). Experimentelle Beispiele für die Kombination einer modellgestützten Regelung in Verbindung mit einem *Extended Kalman Filter* (EKF) finden sich bspw. in Diehl (2001) (Zwei-Punkt-Regelung des Temperaturprofils einer Destillationskolonne), Nagy et al. (2007) (Regelung eines Temperaturprofils eines industriellen Batch-Reaktors) oder Heine (2004) (Ermittlung der optimalen Zuführung von drei Nährmedien für einen Fed-Batch-Prozess).

Direkte Methoden

Im Gegensatz zu den indirekten Methoden wird hier der Bereich für die mögliche Realisierung der unsicheren Variablen explizit berücksichtigt. Das Ergebnis sind robuste optimale Entscheidungen.

Varianz der Zielgröße: Das zu minimierende Zielkriterium ist eine Funktion der Prozessgrößen $\mathbf{x}$, der Entscheidungsvariablen $\mathbf{u}$ und der unsicheren Variablen $\boldsymbol{\xi}$. Für die robuste Formulierung werden sowohl Erwartungswert E als auch Varianz D der Zielgröße berücksichtigt (Gl. (3.6)). Die Terme stehen für das Zielkriterium und die Zuverlässigkeit der Erreichbarkeit des Optimierungszieles und sind mit der Konstanten ω gewichtet (Sahinidis, 2004).

$$\min \quad E\{f(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \boldsymbol{\xi})\} + \omega D\{f(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \boldsymbol{\xi})\} \quad (3.6)$$

Erwartungswert:

$$\mu = E\{x\} = \int_{-\infty}^{+\infty} x \rho(x) dx \quad (3.7)$$

Varianz:

$$\sigma^2 = D[x] = E\{(x - \mu)^2\} = \int_{-\infty}^{+\infty} (x - \mu)^2 \rho(x) dx \quad (3.8)$$

Zulässigkeit gegenüber Beschränkungen: Optimale Entscheidungen für verfahrenstechnische Prozesse sind häufig durch Betriebsgrenzen bestimmt (Skogestad, 2004; Grossmann et al., 1983). Das heisst die Prozessgrößen liegen an den Prozessbeschränkungen. Haben Unsicherheiten einen Einfluss auf die beschränkten Größen, kann der Betrieb unzulässig werden. Dies kann einerseits einen Qualitätsverlust, andererseits aber auch ein Sicherheitsrisiko bedeuten (Srinivasan et al., 2003b). Zur Illustration ist in Abbildung 3.2 eine unsichere Betriebskennlinie dargestellt. Der kostenminimale Betrieb ist nicht realisierbar, da Beschränkungen zu berücksichtigen sind. Der optimale und robuste Betriebspunkt (2) ist durch höhere Kosten gekennzeichnet als die nominale deterministische Entscheidung (1). Im Vergleich zu jedem anderen konservativ gewählten Betriebspunkt (Bsp. 3) ist er jedoch durch den minimalen Abstand zu den Betriebsgrenzen charakterisiert, der für den robusten und optimalen Betrieb notwendig ist. Folglich liegt die Herausforderung in der Reduktion der Distanz (*back-off*) zu den aktiven Betriebsbeschränkungen, ohne diese bei auftretenden Unsicherheiten zu verletzen. Die Größe des *back-offs* lässt sich für direkt gemessene Variablen über ihre Schwankungsbreite bzw. Varianz abschätzen. Sind keine Messdaten beschränkter Prozessgrößen verfügbar, bzw. die Auswirkungen von Unsicherheiten nicht a priori bekannt, so ist der *back-off*, indirekt durch Lösen der Modellgleichungen, zu ermitteln (Govatsmark und Skogestad, 2005; Barz et al., 2006a). Dies führt zur Formulierung der Beschränkungen der Prozessgrößen als Wahrschein-

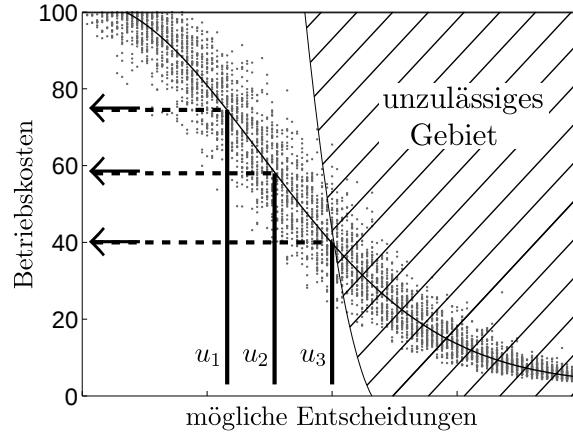


Abbildung 3.2: Wahl des Betriebspunktes: u_1 -konservativ, u_2 -optimal korrigiert, u_3 -aggressiv

lichkeitsrestriktionen. Ziel ist es, die Einhaltung der Beschränkungen mit einem vorgegebenen Wahrscheinlichkeitsniveau $\alpha \in (0, 1)$ zu garantieren.

$$\Pr \{x \geq 0\} \geq \alpha \quad (3.9)$$

Für die Definition von Wahrscheinlichkeitsrestriktionen (*chance constraints*) wird nach der simultanen oder separaten Einhaltung der Beschränkungen unterschieden (Prekopa, 1995):

$$\begin{array}{llll} \Pr_i \{x_i \leq 0\} & \geq \alpha_i, & i = 1, \dots, m & \text{separat} \\ \Pr_i \{x_i \leq 0, & i = 1, \dots, m\} & \geq \alpha & \text{simultan} \end{array} \quad (3.10)$$

Für die separate Formulierung können für jede Beschränkung individuelle Wahrscheinlichkeitsniveaus α definiert werden. In der simultanen Formulierung wird ein Wahrscheinlichkeitsniveau für alle Beschränkungen formuliert. Sie ist die strengere Vorgabe, da hier alle Beschränkungen der Prozessgrößen in die Wahrscheinlichkeitsberechnung einbezogen werden. Die Wahl des Wahrscheinlichkeitsniveaus lässt eine direkte Entscheidung über eine eher konservative oder eher robuste Betriebsführung zu. Die Wahrscheinlichkeit der Einhaltung von Beschränkungen ergibt sich zu:

$$\begin{array}{ll} \Pr \{x_n \leq x_n^{max}\} = \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{x_n^{max}} \rho(x_1, \dots, x_n) dx_1 \cdots dx_n & \text{separat} \\ \Pr \{x_1 \leq x_1^{max}, \dots, x_n \leq x_n^{max}\} = \int_{-\infty}^{x_1^{max}} \cdots \int_{-\infty}^{x_n^{max}} \rho(x_1, \dots, x_n) dx_1 \cdots dx_n & \text{simultan} \end{array} \quad (3.11)$$

3.2.5 Berücksichtigung von Modellunsicherheiten

Der Einsatz probabilistischer Herangehensweisen für die modellgestützte Überwachung und Betriebsführung stellt teilweise noch große Herausforderungen dar. Dies gilt besonders für

optimierungsbasierte Ansätze, denen komplexe Prozessmodelle zugrundeliegen.

Für die Auswertung der Zielfunktion (Gl. (3.6)) und der Prozessbeschränkungen (Gl. (3.10)) ist die Mehrfachintegration der Verteilungsdichtefunktion der Prozessgrößen $\rho(\mathbf{x})$ erforderlich. Diese ist jedoch auch für bekannte Dichtefunktionen auf analytischem Wege nicht möglich. Prekopa (1995) präsentiert einen effizienten numerischen Lösungsansatz für die Wahrscheinlichkeitsberechnung linearer Systeme mit korrelierten stochastischen Variablen, der auf der Kombination von numerischer Integration und *sampling* Methoden basiert. Erste theoretische Umsetzungen für lineare MPC-Algorithmen mit Wahrscheinlichkeitsrestriktionen finden sich in Schwarm und Nikolaou (1999) und Wendt (2005).

Ein weitaus komplexeres Problem stellen nichtlineare Beziehungen zwischen unsicheren Variablen ξ und beschränkten Prozessgrößen $\mathbf{x}$ dar (Kapitel 3.2.2). Eine Herangehensweise ist die Ermittlung der unbekannten Verteilung der Ausgangsvariablen durch *sampling*-Techniken (Srinivasan et al., 2003a). Diwekar und Kalagnanam (1997) zeigen, dass der damit verbundene hohe Rechenaufwand durch den Einsatz systematischer *sampling*-Methoden beträchtlich reduziert werden kann. Weitere Ansätze basieren auf der vereinfachten Repräsentation der Dichtefunktionen $\rho(\xi)$. So lässt sich $\rho(\xi)$ in mehrere Intervalle aufteilen, welche jeweils ein Szenario mit einer approximierten Verteilung repräsentieren. Damit lässt sich ein sogenanntes *multi-period optimization problem* lösen (Halemane und Grossmann, 1983; Henrion et al., 2001; Rooney und Biegler, 2003).

Im Rahmen der *feed-back* basierten Ansätze für die modellbasierte Regelung und Optimierung sowie der Parameter und Zustandsschätzung werden neben vereinfachten Modellgleichungen auch vereinfachende Annahmen bezüglich der Verteilung der Prozessgrößen $\rho(\xi)$ gemacht. Werden diese als normalverteilt angenommen, liegt die Herausforderung in der Ermittlung der beschreibenden Momente der Gaussverteilung, μ und Σ . Diese lassen sich über die Modellgleichungen entwickeln (Julier und Uhlmann, 1997).

Heine et al. (2006) zeigen am theoretischen Beispiel, wie sich durch die geeignete Näherung nichtlinearer Modellgleichungen die approximierten Verteilungen unsicherer Prozessgrößen ermitteln lassen und wie sich mit diesem Wissen die Einhaltung sicherheitskritischer Beschränkungen verbessern lässt.

Alternativ dazu nutzen Loeblein und Perkins (1999a) und Loeblein und Perkins (1999b) ein zweistufiges Vorgehen für die Berücksichtigung von Unsicherheiten für lineare Systeme. Hier wird zunächst die Größe des notwendigen *back-offs* anhand der Varianz der beschränkten Prozessgrößen ermittelt. Dieser wird dann direkt bei der Lösung des MPC-Algorithmus berücksichtigt.

Nagy und Braatz (2003) präsentieren einen analytischen Ansatz zur Ermittlung der dynamischen Entwicklung der Verteilung der Prozessgrößen, der auf der Beschreibung der Unsicherheiten als hyperellipsoide Konfidenzregion beruht. Basierend auf der linearen Approximation der Modellgleichungen wird der *worst-case* der Parameterunsicherheiten innerhalb der

definierten Konfidenzregion für das Optimierungsziel ermittelt und für die Problemlösung verwendet. Am Beispiel eines simulierten Batch-Kristallisationsprozesses wird die Minimierung der Kristallgrößenverteilung des Produktes präsentiert.

In dieser Arbeit wird ein von Wendt et al. (2002) entwickelter Lösungsansatz für allgemeine nichtlineare Problemstellungen mit Wahrscheinlichkeitsrestriktionen verfolgt (Kap. 3.3.6). Anwendungen für komplexe stationäre und dynamische nichtlineare Prozesse (Destillationskolonnen und Reaktoren) finden sich bspw. bei Wendt (2005), Arellano-Garcia (2006), Li (2007) oder Flemming et al. (2007).

3.2.6 Implikationen für die Ermittlung der Ergebnisunsicherheit modellbasierter Daten

Für die Ermittlung der Ergebnisunsicherheit modellbasierter Daten werden stochastische Simulations- und Optimierungsverfahren verwendet. Hier sind folgende Punkte relevant:

- Die Genauigkeit modellbasierter Daten ist eine Funktion der Güte des Modells und der Messdaten. Diese wird über die Normalverteilung von Modellparametern und Messdaten charakterisiert.
- Es ist vorteilhaft die Prozessgrößen ebenfalls als normalverteilte Größen zu approximieren. Dafür sind die Modellgleichungen zu linearisieren. Im dynamischen Fall ist die zeitliche Entwicklung der Genauigkeit zu berechnen.
- Modellbasierte Entscheidungen sind bezüglich ihrer Robustheit zu bewerten. Dafür ist ein Maß für die Zuverlässigkeit der Zielerreichung (Ergebnisunsicherheit) sowie die Einhaltung von Beschränkungen (Ergebniswahrscheinlichkeit) zu ermitteln.

3.3 Verwendete numerische Methoden

Der folgende Abschnitt ist den numerischen Grundlagen der in dieser Arbeit genutzten Methoden für die Lösung statischer und dynamischer Optimierungsprobleme gewidmet. Für die Lösung allgemeiner verfahrenstechnischer Optimierungsprobleme haben sich iterative numerische Verfahren etabliert, die auf der Diskretisierung der Zustands- und Optimierungsvariablen basieren. In Abbildung (3.3) ist schematisch das Vorgehen für die nichtlineare Optimierung mit dem hier verwendeten *Sequential Quadratic Programming*-Verfahren (SQP) dargestellt. Die Abschnitte 3.3.1-3.3.4 beziehen sich auf die Problemdefinition, die Modelldiskretisierung, den Lösungsalgorithmus sowie Strategien für die Behandlung großer Systeme. Die verwendeten Algorithmen werden vorgestellt und am Beispiel erläutert. In Kapitel 3.3.6 wird eine Erweiterung des Lösungsansatzes für die Ermittlung optimaler und robuster Entscheidungen bezüglich unsicherer beschränkter Prozessgrößen beschrieben. Das Optimierungsproblem für

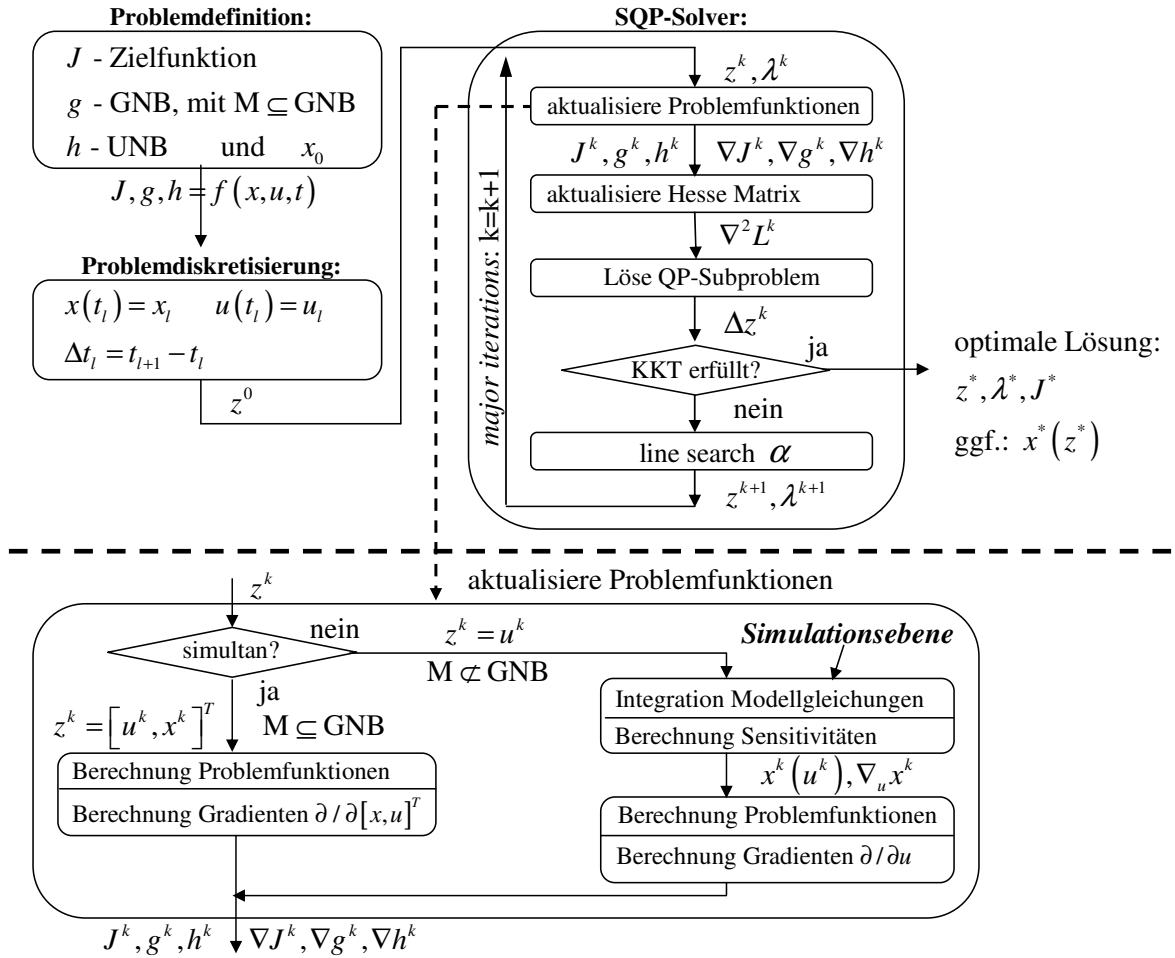


Abbildung 3.3: Struktogramm des SQP-Verfahrens

die Zustands- und Parameterschätzung sowie die Abschätzung der Zuverlässigkeit geschätzter Parameter wird erläutert (Kap. 3.3.7). Schliesslich wird auf ein spezielles dynamisches Schätzverfahren eingegangen, das besonders für den *online*-Einsatz geeignet ist (Kap. 3.3.8).

3.3.1 Formulierung allgemeiner nichtlinearer Optimierungsprobleme

Die Formulierung des allgemeinen Optimierungsproblem ist in Gl. 3.12 gegeben. Das stationäre Problem stellt mit $\dot{\mathbf{x}} = 0$ einen Spezialfall dar.

$$\begin{aligned}
& \min_{\mathbf{u}(t)} && J(\dot{\mathbf{x}}, \mathbf{x}, \mathbf{u}, \boldsymbol{\theta}, t) && (3.12) \\
\text{so dass} &&& 0 = \mathbf{g}[\dot{\mathbf{x}}, \mathbf{x}, \mathbf{u}, \boldsymbol{\theta}, t] && : \text{GNB} \\
&&& 0 \leq \mathbf{h}[\dot{\mathbf{x}}, \mathbf{x}, \mathbf{u}, \boldsymbol{\theta}, t] && : \text{UNB} \\
&&& \mathbf{x}_{\min} \leq \mathbf{x} \leq \mathbf{x}_{\max} \\
&&& \mathbf{u}_{\min} \leq \mathbf{u} \leq \mathbf{u}_{\max} \\
&&& \mathbf{x}(t=0) = \mathbf{x}_0
\end{aligned}$$

Das Optimierungsziel wird durch den skalaren Ausdruck J als Funktion der zeitabhängigen Prozessgrößen $\mathbf{x}$ und der freien Variablen $\mathbf{u}$ beschrieben. Das zulässige Lösungsgebiet wird durch Gleichungs- und Ungleichungsnebenbedingungen (GNB und UNB) sowie die Beschränkungen der Prozessgrößen $\mathbf{x}$ und Optimierungsvariablen $\mathbf{u}$ definiert. Die maximale Anzahl zu definierender Entscheidungsgrößen $\mathbf{u}$ hängt vom Freiheitsgrad des Systems ab. Stellen die Entscheidungsgrößen $\mathbf{u}$ freie Betriebsvariablen dar, sind die Modellparameter $\boldsymbol{\theta}$ konstant (Gl. (3.12)). Für das Parameterschätzproblem kehren sich die Verhältnisse um. Die Definition von Entscheidungsgrößen und Modellparametern hängt also im wesentlichen von der Formulierung des Optimierungsproblems ab. Die Gleichungen des Prozessmodells (Gl. (3.13)) sind Teil der GNB, mit $M \subseteq \text{GNB}$.

$$\left. \begin{aligned} \dot{\mathbf{x}} &= \mathbf{f}[\mathbf{x}, \mathbf{u}, \boldsymbol{\theta}, t] \\ 0 &= \mathbf{f}[\mathbf{x}, \mathbf{u}, \boldsymbol{\theta}, t] \end{aligned} \right\} : M \quad \text{mit} \quad \mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0 \quad (3.13)$$

3.3.2 Diskretisierung der Modellgleichungen

Durch die Diskretisierung der zeitabhängigen Variablen wird das DAE-System in ein System nichtlinearer algebraischer Gleichungen überführt³. Für die Diskretisierung der Zustandsvariablen (Gl. (3.14)) wurde in dieser Arbeit das Orthogonale Kollokationsverfahren in finiten Intervallen oder Schritten entlang des zeitlichen Horizontes verwendet (Biegler, 1984). Anwendungsbeispiele für Kolonnen- und Reaktormodelle finden sich bspw. in (Biegler und Grossmann, 2004; Li, 1998; Wendt, 2005; Arellano-Garcia, 2006). Kollokationsverfahren sind

³Im Rahmen dieser Arbeit wird nur die zeitliche Diskretisierung berücksichtigt, grundsätzlich lassen sich die Verfahren auch für die örtliche Diskretisierung anwenden.

implizite Einschrittverfahren höherer Ordnung und zählen zu den Runge-Kutta-Verfahren. Sie sind besonders für die Lösung von steifen und differentiell-algebraischen Systemen geeignet. Der Verlauf von $\mathbf{x}(t)$ im Intervall l wird über Polynome der Ordnung N im Intervall approximiert.

$$\begin{aligned} \mathbf{x}(t_{l,i}) &= \mathbf{x}_{l,i} \quad \text{mit } i = 1, \dots, N \\ \text{und } \Delta \mathbf{t}_l &= t_N - t_1 \end{aligned} \tag{3.14}$$

Die hier verwendete Variante wird auch als Radau-Kollokationsverfahren bezeichnet. Die exakte Formulierung findet sich im Anhang 9.2.

Als Alternative zum orthogonalen Kollokationsverfahren sei hier das Mehrschießverfahren (*multiple-shooting*) erwähnt (Bauer et al., 1999). Dies erlaubt eine flexiblere Behandlung der abhängigen Variablen, da die Anfangsbedingungen in jedem Intervall als unabhängige Größen definiert werden. Die Kontinuität der Variablen wird im Laufe der Optimierung durch zusätzliche GNB erzwungen. Die Entkopplung der Zustände in den einzelnen Intervallen wirkt sich vorteilhaft auf die Konvergenz von Problemen mit stark anwachsenden Sensitivitäten über den Horizont aus. Die online-Anwendung für die modellgestützte Regelung einer Destillationskolonne wird in (Diehl, 2001) beschrieben.

Zusätzlich zu den Zustandsvariablen sind auch die Optimierungsvariablen zu diskretisieren. In dieser Arbeit wurde die einfachste Form der Approximation mit stückweise konstanten Optimierungsvariablen im Intervall angewendet.

$$\mathbf{u}(t_l) = \mathbf{u}_l \quad \text{für } t \in [t_l, t_{l+1}] \tag{3.15}$$

Für eine höhere Genauigkeit der berechneten Trajektorien sind auch Approximationen höherer Ordnung mit lokalen Stützstellen denkbar. Es entstehen jedoch zusätzliche Parameter, die die Größe des Problems durch den zusätzlichen Freiheitsgrad vergrößern. Da die Anzahl der Optimierungsvariablen von der Intervalllänge über den Optimierungshorizont abhängt, kann durch die Wahl eines guten Diskretisierungsverfahrens sowohl die Anzahl der Zustandsvariablen als auch der Optimierungsvariablen beeinflusst werden.

3.3.3 Sequential Quadratic Programming

Mit den diskretisierten Modellgleichungen lässt sich Problem (3.12) in die allgemeine mathematische Form eines nichtlinearen Optimierungsproblems (*Nonlinear Programming Problem*,

NLP) überführen.

$$\begin{aligned} \min_z \quad & J(\mathbf{z}) \\ \text{so dass} \quad & \mathbf{lo} \leq \begin{bmatrix} \mathbf{z} \\ \mathbf{A}\mathbf{z} \\ \mathbf{c}(\mathbf{z}) \end{bmatrix} \leq \mathbf{up} \end{aligned} \quad (3.16)$$

Die konstanten Vektoren $\mathbf{lo}$ und $\mathbf{up}$ repräsentieren die unteren und oberen Grenzen für die Optimierungsvariablen sowie die linearen und nichtlinearen Nebenbedingungen $\mathbf{A}\mathbf{z}$ (mit der konstanten Matrix $\mathbf{A}$) und $\mathbf{c}$, welche die GNB und UNB in Gleichung (3.12) beschreiben. Dabei wird zwischen fixierten, $\mathbf{lo}_i = \mathbf{up}_i$, beschränkten, $\mathbf{lo}_i, \mathbf{up}_i \in \mathbb{R}$ und freien, $\mathbf{lo}_i = -\infty, \mathbf{up}_i = +\infty$ Grenzen unterschieden. Fixierte Nebenbedingungen entsprechen den GNB in Gl. (3.12), während die beschränkten Nebenbedingungen den UNB entsprechen. Die Optimierungsvariablen vereinen die diskretisierten Problemgrößen $\mathbf{z} = [\mathbf{x}_k, \mathbf{u}_k]^T$. Voraussetzung ist, dass alle Funktionen mindestens zweimal stetig differenzierbar sind.

Als Lösungsmethode für das NLP-Problem wird das SQP-Verfahren eingesetzt, welches besonders effizient bei der Berücksichtigung nichtlinearer Nebenbedingungen ist. Es handelt sich um ein weit verbreitetes lokales gradientenbasiertes Suchverfahren zu dem bereits umfangreiche einführende Literatur existiert (Edgar und Himmelblau, 1989; Nocedal und Wright, 1999; Schittkowski, 2007). Im Gegensatz zu den stochastischen Suchverfahren ist hier die Lösung stark abhängig von den Startbedingungen und konvergiert häufig zu einer lokalen Lösung. Dies liegt in der Tatsache begründet, dass verfahrenstechnische Problemstellungen selten konvexe Zielfunktionen aufweisen und der zulässige Lösungsraum für die Berücksichtigung nichtlinearer Nebenbedingungen ebenfalls durch ein nicht-konvexes Gebiet beschrieben wird.

Die Lagrange Funktion und die Optimalitätsbedingungen

Die Lösung eines NLP-Problems mit Nebenbedingungen basiert auf der Definition der Lagrange-Funktion, die sämtliche Problemfunktionen $\mathbf{f}^{\{P\}} \stackrel{\text{def}}{=} [J, \mathbf{g}, \mathbf{h}]$ in einer einzigen reellwertigen und unbeschränkten Problemfunktion $L(\mathbf{z}, \boldsymbol{\lambda})$ vereint.

$$L(\mathbf{z}, \boldsymbol{\lambda}) = J(\mathbf{z}) - \sum_{i \in \text{GNB}} \lambda_i c_i(\mathbf{z}) - \sum_{i \in \text{UNB}} \lambda_i c_i(\mathbf{z}) \quad (3.17)$$

Die Beschränkungen $\mathbf{c}_i$ enthalten sowohl GNB als auch UNB und Grenzen der Variablen $\mathbf{x}$, wobei letztere im Folgenden als UNB zusammengefasst werden. Die Lagrange-Multiplikatoren λ stellen zusätzliche Optimierungsvariablen dar, welche den Wert der Zielfunktion J und die Verletzung der Beschränkungen wichten. Es ergibt sich eine korrigierte Suchrichtung, die senkrecht zu den Gradienten der Ableitungen steht und die Einhaltung linearer, bzw. linearisierter Beschränkungen garantiert. Die UNB sind während der Iterationen und für die Lösung nicht

immer aktiv, das heisst die Variablen $\mathbf{z}$ liegen nicht unbedingt an den definierten Grenzen. Die *active-set*-Methode aktualisiert für jeden Suchschritt die aktive Menge der Nebenbedingungen (ANB).

$$\text{ANB} = \text{GNB} \cup \{\mathbf{i} \in \text{UNB} \mid \mathbf{c}_i(\mathbf{z}) = 0\} \quad (3.18)$$

Durch die Komplementaritätsbedingungen werden inaktive UNB in der Lagrangefunktion nicht berücksichtigt.

$$\begin{aligned} \lambda_i &= 0, & \forall i \in \text{UNB} \setminus \text{ANB} \\ \lambda_i &\geq 0, & \forall i \in \text{GNB} \cup (\text{UNB} \cap \text{ANB}) \end{aligned} \quad (3.19)$$

Die notwendigen Optimalitätsbedingungen 1. Ordnung (auch Karush-Kuhn-Tucker (KKT) Bedingungen) stellen die Konvergenzkriterien dar.

$$\begin{aligned} \nabla_{\mathbf{z}} L(\mathbf{z}^*, \boldsymbol{\lambda}^*) &= \nabla J(\mathbf{z}^*) - \sum_{i \in \text{ANB}(\mathbf{z}^*)} \lambda_i^* \nabla \mathbf{c}_i(\mathbf{z}^*) = 0; & (3.20) \\ \mathbf{c}_i(\mathbf{z}^*) &= 0; & \forall i \in \text{GNB}; \\ \mathbf{c}_i(\mathbf{z}^*) &\geq 0; & \forall i \in \text{UNB}; \\ \lambda_i^* &\geq 0; & \forall i \in \text{UNB}; \\ \lambda_i^* \mathbf{c}_i(\mathbf{z}^*) &= 0 & \forall i \in \text{GNB} \cup \text{UNB} \end{aligned}$$

Sequentielle Lösungsschritte des SQP-Verfahrens

Das SQP-Verfahren beruht auf der sequentiellen Lösung einer Approximation des Originalproblems (Gl. (3.17)). Diese sogenannten *major iterations* (Abbildung 3.3) erzeugen eine Folge von $\mathbf{z}^k, \boldsymbol{\lambda}^k$ die zur Lösung $\mathbf{z}^*, \boldsymbol{\lambda}^*$ konvergieren soll. Die im folgenden dargestellten Elemente werden auch als *minor*-Iteration bezeichnet.

Lösung des QP-Subproblems: Die Approximation des Originalproblems beruht auf der Taylorentwicklung erster Ordnung der KKT-Bedingungen nach $\mathbf{z}$ und $\boldsymbol{\lambda}$ (Gl. (3.20)) für jeden Iterationsschritt k . Es ergibt sich ein lineares Gleichungssystem (Newton-Gleichungen), dessen Lösung der Lösung des äquivalenten Problems (Gl. (3.21)) entspricht.

$$\begin{aligned} \min_{\Delta \mathbf{z}} \quad & \nabla J(\mathbf{z}^k)^T \Delta \mathbf{z} + \frac{1}{2} \Delta \mathbf{z}^T \mathbf{H} \Delta \mathbf{z} & (3.21) \\ \text{so dass} \quad & \mathbf{c}(\mathbf{z}^k) + \nabla \mathbf{c}(\mathbf{z}^k)^T \Delta \mathbf{z} = 0 \quad \text{und} \quad \mathbf{H} = \nabla_{\mathbf{z}\mathbf{z}}^2 L(\mathbf{z}, \boldsymbol{\lambda}) \end{aligned}$$

Für die Lösung des QP-Subproblems mit UNB (Gl. (3.22)) ist ein iteratives rechenaufwendiges Verfahren notwendig.

$$\mathbf{c}(\mathbf{z}^k) + \nabla \mathbf{c}(\mathbf{z}^k)^T \Delta \mathbf{z} \geq 0 \quad (3.22)$$

Der größte Aufwand ist der Suche nach dem korrekten *active-set* zuzuschreiben. Hier wird zwischen den *Inequality-Constrained-QP* (IQP) und dem *Equality-Constrained-QP* (EQP) unterschieden, wobei letztere Lösungsmethode einen geringeren Rechenaufwand bei großen Systemen aufweist. Die Lösung liefert eine aktualisierte Schätzung der Optimierungsvariablen $\mathbf{z}$, der Lagrange-Multiplikatoren $\boldsymbol{\lambda}$ sowie der Menge aktiver Beschränkungen ANB am optimalen Punkt.

Der line-search: Die quadratische Suche weist sehr gute lokale Konvergenzeigenschaften auf. Globale Strategien, wie der *line-search* oder die *trust-region*-Methode ermöglichen die Konvergenz, ausgehend von beliebigen (nicht lösungsnahen) Startpunkten und aus nicht-konvexen Lösungsräumen. Die in dieser Arbeit genutzten Algorithmen nutzen den *line-search* in Verbindung mit einer erweiterten Lagrange-Funktion (*augmented-lagrangian-merit-function*). Die ursprüngliche Funktion wird um zusätzliche gewichtete quadratische Strafterme erweitert, die für ein Verlassen des zulässigen Suchgebietes, den Wert der Zielfunktion verschlechtern. Durch die Minimierung der erweiterten Lagrange-Funktion erfolgt eine Prüfung und ggf. Korrektur der Schrittweite α des Newton-Suchschrittes $\Delta \mathbf{z}^k$.

$$\mathbf{z}^{k+1} = \mathbf{z}^k + \alpha \Delta \mathbf{z}^k \quad (3.23)$$

Der *line-search* stellt eine kritische und ineffiziente Komponente von SQP dar, da er sowohl die Stabilität des Suchalgorithmus beeinflusst als auch die mehrmalige rechenaufwändige Auswertung der (nichtlinearen) Problemfunktionen $J, \mathbf{c}$ notwendig macht (Schittkowski, 1985). Die Anzahl an Funktionsaufrufen wird im allgemeinen durch die Verwendung effizienter (sub-optimaler) Lösungen reduziert.

Wichtig ist anzumerken, dass die Erfüllung von Gleichungsnebenbedingungen sowie die Einhaltung nichtlinearer Beschränkungen während der Iterationen nicht garantiert wird. Diese Tatsache erweist sich für die zeitkritische *online*-Anwendung mit beschränkter Anzahl von Suchschritten als nachteilig. Alternativen zur erweiterten Lagrangefunktion bieten die *interior point* oder *barrier*-Methoden (Edgar und Himmelblau, 1989; Nocedal und Wright, 1999; Gould et al., 2005). Hier konvergiert der Algorithmus vom inneren zulässigen Gebiet zur Lösung.

Aktualisierung der Hesse-Matrix: Die Hesse Matrix $\nabla_{\mathbf{z}\mathbf{z}}^2 L(\mathbf{z}^k, \boldsymbol{\lambda}^k)$ enthält Informationen über die Krümmung der Problemfunktionen und ist Voraussetzung für die Definition des approximierten QP-Problems in jeder Iteration k . Während die ersten Ableitungen vom Nutzer, bzw. durch numerische Berechnungen ermittelt werden, ist die Berechnung der Hesse Matrix oft zu aufwendig. Als Alternative zur expliziten Berechnung (*exact Hessian SQP method*) wird in den hier verwendeten Algorithmen eine Approximation (*full quasi Newton Approximation*) auf Basis der weitverbreiteten Methode nach Broydon, Fletcher, Goldfarb, Shanno (BFGS) eingesetzt. Unter Nutzung der Sensitivitäten aus früheren Iterationen wird hier eine Nähe-

rung der Hesse-Matrix berechnet. Damit wird der Rechenaufwand reduziert. Zusätzlich wird die positive Definitheit der Matrix, das wesentliche Konvergenzkriterium des QP-Problems, garantiert.

3.3.4 Die Anpassung der Problemformulierung für die Optimierung großer Systeme

Die Betrachtung komplexer räumlich bzw. zeitlich verteilter diskretisierter verfahrenstechnischer Systeme führt zu großen Optimierungsproblemen (*large scale optimization problems*). Die Dimensionen des Optimierungsproblems ergibt sich aus der Anzahl der freien und abhängigen Variablen ($\dim(\mathbf{x})$, $\dim(\mathbf{u})$) sowie der Ordnung des Diskretisierungsverfahrens und der Anzahl der Intervalle. Mit den aktuellen Verfahren sind Probleme mit $n \leq 10^6$ Variablen lösbar (Grossmann und Biegler, 2004). Es können zwei Lösungsansätze unterschieden werden. Der simultane Ansatz (*full discretization method*) verfolgt die Anpassung und Weiterentwicklung von SQP-Methoden speziell für die Behandlung großer Systeme. Der sequentielle Ansatz (*partial discretization method*) basiert auf der Reduktion des Optimierungsproblems (Biegler und Grossmann, 2004).

Der simultane Ansatz zur Lösung großer Optimierungsprobleme

Im simultanen Ansatz gilt das bisher beschriebene Vorgehen, dass die Modellgleichungen direkt im Optimierungsproblem als GNB berücksichtigt werden. Die Zustandsgrößen $\mathbf{x}$ werden simultan mit den freien Variablen $\mathbf{u}$ gelöst.

$$\mathbf{z} = [\mathbf{u}, \mathbf{x}]^T \quad \mathbf{M} \subseteq \text{GNB} \quad (3.24)$$

Es resultieren Optimierungsprobleme mit einer großen Anzahl von GNB (Modellgleichungen) und Optimierungsvariablen (Biegler, 2007). Der Rechenaufwand und Speicherbedarf steigt jedoch beträchtlich, so dass sowohl die Effizienz als auch die numerische Stabilität negativ beeinflusst werden können (Edgar und Himmelblau, 1989). Weiterhin werden die Modellgleichungen während der Iterationen k nicht zwangsläufig erfüllt. Im Vergleich zum sequentiellen Ansatz verhält sich die Methode jedoch robuster bei Systemen mit instabilen Dynamiken und für Systeme mit hohen Sensitivitäten $\partial \mathbf{x} / \partial \mathbf{u}$ (wie sie oft bei der Simulation über lange zeitliche Horizonte auftreten) (Li, 1998; Biegler und Grossmann, 2004; Hong et al., 2006; Biegler, 2007). Mit dem Ziel große Systeme effizient zu lösen, wurde das simultane SQP-Verfahren in den letzten Jahren konsequent weiterentwickelt. Für die Aktualisierung der Jacobi- und Hesse Matrix lassen sich bspw. block-diagonale Strukturen nutzen, wie sie bei der Diskretisierung dynamischer Systeme auftreten (Diehl, 2001; Diehl et al., 2002; Biegler und Grossmann, 2004). Im kommerziellen Löser SNOPT kommt ein *limited-memory quasi-Newton update* zur Aktualisierung der Hesse-Matrix zum Einsatz, der eine Erweiterung der BFGS-Formel für die

Approximation großer Matrizen darstellt (Gill et al., 2002; Gould et al., 2005). Ein weiteres Beispiel ist das *reduced*-SQP-Verfahren, indem abhängige und unabhängige Variablen sowie lineare und nichtlineare Nebenbedingungen getrennt voneinander behandelt werden (Leineweber et al., 2003a,b; Grossmann und Biegler, 2004).

Der sequentielle Ansatz zur Lösung großer Optimierungsprobleme

Für typische verfahrenstechnische Problemstellungen gilt $\dim(\mathbf{M}) \lesssim \dim(\text{GNB})$ und $\dim(\mathbf{x}) \gg \dim(\mathbf{u})$. Beim sequentiellen Ansatz werden die Modellgleichungen $\mathbf{M}$ sowie die abhängigen Variablen $\mathbf{x}$ nicht im Optimierungsproblem berücksichtigt. Stattdessen werden die Beziehungen $\mathbf{x}(\mathbf{u})$ in einer separaten Simulationsebene aufgelöst. Damit wird die Größe des NLP-Problems stark reduziert⁴. Es resultieren kleine bis mittlere Probleme mit dicht besetzten KKT-Matrizen.

$$\mathbf{z} = \mathbf{u} \quad \mathbf{M} \not\subseteq \text{GNB} \quad (3.25)$$

Durch die Enkopplung von Simulation und Optimierung ist die vollständige Lösung des DAE-Systems für jeden Iterationsschritt k notwendig, da die Berechnung der Problemfunktionen der Optimierungsebene darauf aufbaut (Abb. 3.3). Der Rechenaufwand des SQP-Algorithmus wird nun von der Effizienz der Lösung der Modellgleichungen bestimmt. Ein wesentlicher Vorteil ist, dass durch die Nutzung spezieller Diskretisierungs- und Integrationsverfahren auch schwierige Simulationsprobleme (steife Systeme) und Unstetigkeiten in den Modellgleichungen behandelt werden können. Die erwähnten Nachteile gegenüber dem simultanen Ansatz für instabile Systeme und Systeme mit hohen Sensitivitäten lassen sich durch eine Schrittweitenregelung von $\mathbf{z}$ (im SQP-Algorithmus) bzw. das adaptive Skalieren von Zeitintervallen bzw. Änderungen der Optimierungsvariablen (in der Simulationsebene) verbessern (bspw.: *multiple time scaling* (Wendt et al., 2000)). Ein wichtiger Punkt für die dynamische Optimierung ist die Einhaltung von Beschränkungen der Zustandsvariablen, die über den gesamten Optimierungshorizont definiert sind (*path-constraints*). Da im klassischen sequentiellen Ansatz die Berücksichtigung der Zustandsvariablen im Optimierungsproblem nicht vorgesehen ist, ist die Behandlung von *path-constraints* nicht möglich (Biegler und Grossmann, 2004). Hong et al. (2006) weist explizit darauf hin, dass sich beschränkte Variablen $\mathbf{x}$ durchaus berücksichtigen lassen und sprechen in diesem Zusammenhang von einem quasi-sequentiellem Ansatz. Die Implementierung wird bspw. in Li (1998), Hong et al. (2006) oder Arellano-Garcia et al. (2007) gezeigt.

In dieser Arbeit wird der sequentielle Ansatz in Verbindung mit dem Orthogonalen Kollokationsverfahren zur Lösung von Optimierungsproblemen verwendet. Wichtig ist anzumerken, dass die im Kapitel 3.3.6 beschriebene Methode zur Berücksichtigung von Unsicherheiten auf dem sequentiellen Ansatzes basiert.

⁴Beschränkungen der Prozessgrößen, $\mathbf{x}_{\min} \leq \mathbf{x} \leq \mathbf{x}_{\max}$ (siehe Gl. (3.12)), sind nun Teil der UNB, da $\mathbf{x} = \mathbf{f}(\mathbf{z})$.

Berechnung der Sensitivitäten Der SQP-Algorithmus benötigt die ersten Ableitungen der Zielfunktion und Nebenbedingungen für die Definition des QP-Problems und die Aktualisierung der Hesse-Matrix (Abb. 3.3). Können diese analytisch berechnet werden, bedeutet das einen erheblichen Vorteil gegenüber der Approximation über finite Differenzen, da hier rechenaufwendige Funktionsaufrufe verringert und die Genauigkeit des SQP-Verfahrens verbessert werden können. Da die Problemfunktionen $\mathbf{f}^{\{P\}} = [J, \mathbf{g}, \mathbf{h}]$ sowohl direkt, als auch indirekt (über die impliziten Modellgleichungen) von den freien Variablen $\mathbf{z}$ abhängen, gilt die Kettenregel für Funktionenvektoren:

$$\frac{d\mathbf{f}^{\{P\}}(\mathbf{x}(\mathbf{z}_j), \mathbf{z}_j)}{d\mathbf{z}_j} = \frac{\partial \mathbf{f}^{\{P\}}}{\partial \mathbf{z}_j} + \sum_{i=1}^n \frac{\partial \mathbf{f}^{\{P\}}}{\partial \mathbf{x}_i} \cdot \frac{\partial \mathbf{x}_i}{\partial \mathbf{z}_j} \quad (3.26)$$

mit $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \quad \mathbf{z} \in \mathbb{R}^m$

Für die Sensitivitäten $\partial \mathbf{x} / \partial \mathbf{z}$ gilt der Satz der impliziten Funktionen:

$$\frac{\partial \mathbf{f}^{\{M\}}}{\partial \mathbf{x}} d\mathbf{x} + \frac{\partial \mathbf{f}^{\{M\}}}{\partial \mathbf{z}} d\mathbf{z} = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{z}} = - \left(\frac{\partial \mathbf{f}^{\{M\}}}{\partial \mathbf{x}} \right)^{-1} \frac{\partial \mathbf{f}^{\{M\}}}{\partial \mathbf{z}} \quad (3.27)$$

Im dynamischen Fall ist die Größe der Jakobi-Matrix der Modellgleichungen $\partial \mathbf{f}^{\{M\}} / \partial \mathbf{x}$ durch die Anzahl der (kontinuierlichen) Prozessgrößen, der Anzahl der Intervalle sowie der Ordnung des Diskretisierungsverfahrens bestimmt. Für große Systeme steigt der Rechenaufwand vor allem für die Matrixinversion beträchtlich⁵. Werden die Modellgleichungen eines Intervalls l als Block zusammengefasst (mit der Dimension der kontinuierlichen Prozessgrößen und der Ordnung des Diskretisierungsverfahrens), ist die Matrix $\partial \mathbf{f}^{\{M\}} / \partial \mathbf{x}$ blockdiagonal und die Matrix $\partial \mathbf{x} / \partial \mathbf{z}$ in der unteren Diagonalmatrix belegt. Während die Blöcke auf der Diagonalen ($i = j$) die lokalen Abhängigkeiten in einem Intervall darstellen $\partial \mathbf{x}_l / \partial \mathbf{z}_l$, werden die globalen Abhängigkeiten (Wirkungen von $\mathbf{z}_l$ auf $\mathbf{x}_{l+s}$, mit $s \geq 1$) durch die darunterliegenden Blöcke ($i \geq j$) beschrieben. Li (1998) schlägt daher eine alternative Berechnung, basierend auf der separaten Betrachtung der lokalen Sensitivitäten, vor. Es werden für jedes Intervall l zusätzlich die Anfangsbedingungen als Variablen berücksichtigt $0 = \mathbf{f}_l^{\{M\}}[\mathbf{x}_{l,0}, \mathbf{x}_l, \mathbf{z}_l]$. Analog zu Gl. (3.27) ergibt sich:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{f}_l^{\{M\}}}{\partial \mathbf{x}_{l,0}} d\mathbf{x}_{l,0} + \frac{\partial \mathbf{f}_l^{\{M\}}}{\partial \mathbf{x}_l} d\mathbf{x}_l + \frac{\partial \mathbf{f}_l^{\{M\}}}{\partial \mathbf{z}_l} d\mathbf{z}_l &= 0 \quad \Rightarrow \\ \frac{\partial \mathbf{x}_l}{\partial \mathbf{x}_{l,0}} &= - \left(\frac{\partial \mathbf{f}_l^{\{M\}}}{\partial \mathbf{x}_l} \right)^{-1} \frac{\partial \mathbf{f}_l^{\{M\}}}{\partial \mathbf{x}_{l,0}}; \quad \frac{\partial \mathbf{x}_l}{\partial \mathbf{z}_l} = - \left(\frac{\partial \mathbf{f}_l^{\{M\}}}{\partial \mathbf{x}_l} \right)^{-1} \frac{\partial \mathbf{f}_l^{\{M\}}}{\partial \mathbf{z}_l} \end{aligned} \quad (3.28)$$

⁵Für die Verdopplung einer Matrix steigt der Rechenaufwand für die Invertierung ca. um das 8-fache.

Für die Anfangs- und Endzustände eines jeden Intervalls l gelten die Transitionsbedingungen:

$$\mathbf{x}_{l,end} = \mathbf{x}_{l+1,0}; \quad \partial \mathbf{x}_{l,end} / \partial \mathbf{z}_l = \partial \mathbf{x}_{l+1,0} / \partial \mathbf{z}_{l+1} \quad (3.29)$$

Durch mehrfache Anwendung von Gl. (3.30) links lassen sich die Sensitivitäten für geänderte Anfangsbedingungen über mehrere Intervalle übertragen. Die Sensitivitäten bezüglich einer konkreten Änderung von $\mathbf{z}$ im Intervall j ergeben sich durch Gl. (3.30) rechts⁶.

$$\frac{\partial \mathbf{x}_{l+1,0}}{\partial \mathbf{z}_{l-1}} = \frac{\partial \mathbf{x}_{l+1,0}}{\partial \mathbf{x}_{l,0}} \cdot \frac{\partial \mathbf{x}_{l,0}}{\partial \mathbf{z}_{l-1}}; \quad \frac{\partial \mathbf{x}_l}{\partial \mathbf{z}_j} = \frac{\partial \mathbf{x}_l}{\partial \mathbf{x}_{l,0}} \cdot \frac{\partial \mathbf{x}_{l,0}}{\partial \mathbf{z}_j} \quad (3.30)$$

Das Verfahren ist wesentlich effizienter, da hier lediglich die Blöcke der Matrizen in Gl. (3.27) invertiert werden müssen.

Ein weiterer effizienter Ansatz wird im Programmpaket DyOS verfolgt (Brendel et al., 2006). Für die Bestimmung der Sensitivität einer abhängigen Variablen $\mathbf{x}_k$ bezüglich der unabhängigen Variablen $\mathbf{z}_j$ werden die Modellgleichungen $\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}^{\{M\}}[\mathbf{x}(t), \mathbf{z}]$ um zusätzliche Beziehungen erweitert.

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{s}_{k,j}}{dt} &= \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathbf{x}_k(t)}{\partial \mathbf{z}_j} \right) = \frac{\partial \dot{\mathbf{x}}_k(t)}{\partial \mathbf{z}_j} = \sum_{i=1}^n \frac{\partial \mathbf{f}_k^{\{M\}}}{\partial \mathbf{x}_i} \cdot \frac{\partial \mathbf{x}_i}{\partial \mathbf{z}_j} \\ \text{mit } \mathbf{s}_{k,j} &= \frac{\partial \mathbf{x}_k}{\partial \mathbf{z}_j}; \quad \mathbf{s}(t=0) = \mathbf{s}_0; \quad \text{und } \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n; \quad \mathbf{z} \in \mathbb{R}^m \end{aligned} \quad (3.31)$$

Für die gemeinsame Integration und Auswertung der Gl. (3.31) und der Modellgleichungen, können kommerzielle Simulationswerkzeuge genutzt werden (Stein et al., 2004).

3.3.5 Verwendete SQP-Algorithmen

Die im Rahmen dieser Arbeit verwendeten kommerziellen Lösungsalgorithmen sind in Tabelle 3.1 aufgeführt. Alle verwendeten Löser nutzen die *active-set* Methode in Verbindung mit einem *line-search* für eine *augmented-lagrangian merit function*. Beim NLPQL Algorithmus handelt es sich um eine frühe, allgemein einsetzbare SQP Version, die als aktualisierte Version im TOMLAB Programmpaket eingebunden wurde. Der NPSOL Algorithmus ist für relativ kleine, stark nichtlineare und nichtkonvexe Probleme mit dicht besetzten Matrizen der KKT Kriterien geeignet (Gill et al., 1984; Thanedar et al., 1986). Er benötigt relativ wenige Aufrufe der Problemfunktionen $\mathbf{f}^{\{P\}}$ und zeichnet sich durch einen sehr effizienten und robusten EQP-Algorithmus zur Lösung des QP-Problems aus. NPSOL nimmt eine Korrektur unzulässiger Startwerte vor und berücksichtigt explizit temporär inkonsistente Beschränkungen im *line-search* (hervorgerufen durch die Linearisierung) (Gill et al., 1985). Er ist daher

⁶Für die Ermittlung der Sensitivitäten aller unabhängigen Variablen $\mathbf{x}$ im 4. Intervall nach den Optimierungsvariablen $\mathbf{z}$ im 2. Intervall ergibt sich entsprechend: $\frac{\partial \mathbf{x}_4}{\partial \mathbf{z}_2} = \frac{\partial \mathbf{x}_4}{\partial \mathbf{x}_{4,0}} \cdot \frac{\partial \mathbf{x}_{3,end}}{\partial \mathbf{x}_{3,0}} \cdot \frac{\partial \mathbf{x}_{2,end}}{\partial \mathbf{z}_2}$.

Tabelle 3.1: Verwendete SQP-Lösungsalgorithmen; Referenzen: ① - Schittkowski (1985), ② - IMSL® (1997), ③ - Holmström et al. (2007), ④ - Gill et al. (1998), ⑤ - Holmström et al. (2006a), ⑥ - Gill et al. (2006), ⑦ - Holmström et al. (2006b)

Löser (Subroutine)	Behandlung von UNB	globale Strategie	Hesse- Matrix	Programm- paket	Ref.
NLPQL (DNCONG)	<i>active set</i>	<i>line- search</i>	<i>full Quasi Newton</i>	IMSL Library für Fortran, 1997	① ②
NLPQL (conSolve)				TOMLAB /BASE für MATLAB, 2005	① ③
NPSOL 5.0 (NPSOL)				TOMLAB /SOL für MATLAB, 2005	④ ⑤
SNOPT 7.1-1 (SNOPT)	<i>active set</i>	<i>line- search</i>	<i>reduced Q. Newton</i>	TOMLAB /SOL für MATLAB, 2005	⑥ ⑦

besonders für Regelungsaufgaben und in Verbindung mit dem sequentiellen Lösungsansatz geeignet (Stein et al., 2004).

Der SNOPT Algorithmus ist ein typischer Algorithmus für große nichtlineare Probleme. Er arbeitet besonders effizient, wenn viele Beschränkungen und Variablengrenzen aktiv sind (simultaner Ansatz). SNOPT benötigt relativ wenige Matritzenrechnungen und nutzt eine *limited-memory/reduced quasi-Newton* Approximation der Hesse-Matrix der Lagrange-Funktion. Die Reduktion des QP-Problems um Beschränkungen mit negativen Lagrange-Multiplikatoren, macht ihn im Vergleich zum NLPQL und NPSOL Löser sehr effizient im Umgang mit großen dünn besetzten KKT-Matritzen und beugt numerischen Instabilitäten vor (Thanedar et al., 1986).

Zur Beschleunigung der iterativen Lösung des QP-Subproblems nutzen NPSOL und SNOPT die letzte Lösung ($k - 1$) als Initialisierung des *active-set* (*warm-start-Option*).

Beispielrechnung eines deterministischen NLP Problems

Die Algorithmen wurden zunächst auf ein einfaches Beispiel (Gl. (3.32)) angewendet. Im Gegensatz zum sequentiellen Ansatz sind hier die Zielfunktion und NB explizit gegeben und können direkt ausgewertet und geplottet werden. Es wurde ein stark nichtlineares Optimierungsproblem gewählt, welches im durch die Variablengrenzen definierten Bereich konvex und im Bereich der Lösung sehr flach ist. An der Lösung sind beide Beschränkungen aktiv.

$$\begin{aligned}
\min_{\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2} \quad & J = -\mathbf{u}_1 \cdot \exp[-\mathbf{u}_1^2 - (\mathbf{u}_2 - 2)^2 + 10] \\
\text{mit} \quad & 0,7 \leq \mathbf{u}_1 \leq 2; \quad 0,8 \leq \mathbf{u}_2 \leq 4; \quad \xi = 0 \\
& \mathbf{c}_1 : \quad -\mathbf{u}_2 + (1/\mathbf{u}_1 \cdot \xi)^3 - 5\mathbf{u}_1^2 + 12\mathbf{u}_1 - 4,6 \leq 0 \\
& \mathbf{c}_2 : \quad -\mathbf{u}_2 + 6 \cdot \exp[-(\mathbf{u}_1 + \xi/7)^2] \leq 0
\end{aligned} \tag{3.32}$$

Der Parameter ξ wird erst im folgenden Kapitel zur stochastischen Optimierung verwendet. Der Startwert liegt im zulässigen Gebiet mit $\mathbf{u}(k=0) = [1, 9; 1]$. Tabelle 3.2 zeigt die Ergebnisse für die in dieser Arbeit genutzten SQP-Algorithmen. Das Problem wurde sowohl mit der algorithmen-internen numerischen Routine zur Berechnung der Sensitivitäten, als auch mit nutzer-definierten analytischen Sensitivitäten gelöst. Die Spalten SQP It. kennzeichnen die Anzahl der Hauptiterationen k des SQP-Algorithmus und stehen für den generellen rechen-technischen Lösungsaufwand. Die Iterationen zur Lösung des QP-Subproblems (QP Sub-It.) und des *line-search* (*line-search*) beschreiben den Aufwand zum Erreichen einer zulässigen und optimalen Lösung. Schließlich ist die Summe aller Aufrufe der Problemfunktionen (Fkt. Eval.) aufgeführt. Entsprechend der beiden Fallunterscheidungen, kann diese sowohl Funktionsaufrufe für die numerische Gradientenbildung, als auch Aufrufe der Funktionen zur Sensitivitätsberechnung beinhalten. Neben den deutlichen Qualitätsunterschieden der internen Algorithmen

Tabelle 3.2: Anzahl der Iterationen und Funktionsaufrufe für die deterministische Optimierung (* Lösung nicht gefunden)

	numerische Gradienten				analytische Gradienten			
	SQP It.	QP Sub-It.	<i>line-search</i>	Fkt. Eval.	SQP It.	QP Sub-It.	<i>line-search</i>	Fkt. Eval.
NLPQL (conSolve)	16*	22*	32*	344*	12	16	14	68
NPSOL 5.0	21	23	27	217	21	22	27	109
SNOPT 7.1-1	10	10	14	146	11	9	17	70

für die numerische Sensitivitätenberechnung wird deutlich, dass die Bereitstellung der analytischen Sensitivitäten für die exakte Suche und Recheneffizienz von Vorteil ist. Obwohl hier der NPSOL Algorithmus schlechter abschneidet als die anderen beiden Algorithmen, zeigte er sich für die in dieser Arbeit zu lösenden Problemstellungen (sequentieller Ansatz, analytische Sensitivitäten) durchweg robuster und effizienter (teilweise sogar bedeutend effizienter) als der NLPQL. Es konnten jedoch keine klaren Vorteile gegenüber SNOPT gefunden werden. Allgemein variiert die Performanz der Algorithmen abhängig vom Problem und Startwert sehr stark. In Abb. 3.4 sind alle Iterationsschritte (Haupt-, Nebeniterationen und line-search) für einzelne Optimierungsläufe dargestellt. Aufgrund der ungenügenden Genauigkeit der approximierten Sensitivitäten konvergiert der NLPQL-Algorithmus mit numerischen Gradienten nicht zur Lösung.

3.3.6 Erweiterung für die Berücksichtigung von Wahrscheinlichkeitsrestriktionen

Die Berücksichtigung von Unsicherheiten ξ in den UNB führt zur Formulierung von Wahrscheinlichkeitsrestriktionen, bzw. *chance constraints* (Kap. 3.2.4). Für die Lösung des stochastischen Optimierungsproblems wird der von Wendt et al. (2002) präsentierte Ansatz zur Relaxierung in ein nichtlineares Optimierungsproblem angewandt. Dazu werden die betroffe-

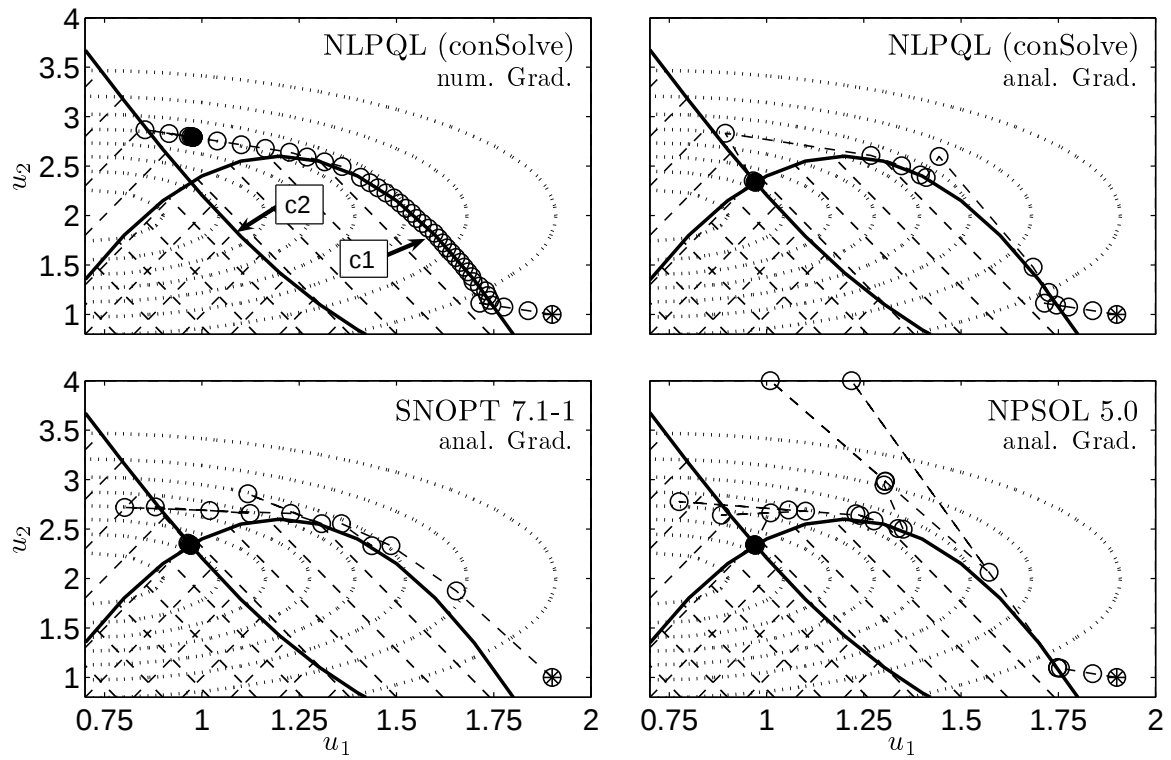


Abbildung 3.4: Iterationen zur Lösung des Optimierungsproblems mit verschiedenen Lösungsalgorithmen und mit bzw. ohne Nutzung der internen numerischen Differentiation ($\otimes$ - Startwert, $\circ$ - Iterationen, $\bullet$ - Lösung)

nen UNB als einseitig beschränkte Zustände $\mathbf{y}_i \leq \mathbf{y}_i^{max}$, mit $\mathbf{y}_i = -\mathbf{h}_i[\dot{\mathbf{x}}, \mathbf{x}, \mathbf{u}, \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\xi}, t]$ (Vgl. Gl. (3.12)), formuliert. Ausgangspunkt ist die Annahme, dass eine monotone Beziehung zwischen mindestens einer unsicheren Größe (hier: Eingangsgröße $\boldsymbol{\xi}_s$ im Raum Ξ_s mit bekannter Verteilung) und der zu beschränkenden Prozessgröße (hier: Ausgangsgröße $\mathbf{y}_i$ im Raum $\mathbf{Y}_i$ mit unbekannter Verteilung) vorliegt. Diese Annahme ist für viele verfahrenstechnische Prozesse gerechtfertigt (Wendt, 2005). Die eindeutige Beziehung zwischen den Ein- und Ausgangsvariablen ist durch die Modellgleichungen $\mathbf{y}_i = \mathbf{f}^{[M]}[\boldsymbol{\xi}_s]$ gegeben und wird für die Projektion der Variablen genutzt (siehe Abbildung 3.5). Das bedeutet, dass jede Realisierung von $\mathbf{y}_i \in \mathbf{Y}_i$

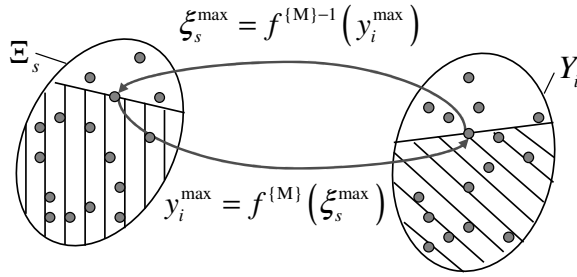


Abbildung 3.5: Projektion der unsicheren Ein- und Ausgangsvariablen

einer Realisierung von $\boldsymbol{\xi}_s \in \Xi_s$ entspricht. Die Wahrscheinlichkeit, dass $\mathbf{y}_i$ im schraffierten Bereich liegt, ist durch die Integration der Verteilung von $\tilde{\rho}(\mathbf{y}_i)$ über $[-\infty, \mathbf{y}_i^{max}]$ definiert. Durch die Projektion der Integrationsgrenzen $\mathbf{y}_i^{max}$ auf $\boldsymbol{\xi}_s^{max}$ lässt sich die Wahrscheinlichkeit ebenfalls durch die Integration der bekannten Verteilungsfunktion $\rho(\boldsymbol{\xi}_s)$ über $[-\infty, \boldsymbol{\xi}_s^{max}]$ berechnen. Für die positive monotone Beziehung $\boldsymbol{\xi}_s \uparrow \Leftrightarrow \mathbf{y}_i \uparrow$ (Abbildung 3.5) gilt daher:

$$\Pr\{\mathbf{y}_i \leq \mathbf{y}_i^{max}\} = \int_{-\infty}^{\mathbf{y}_i^{max}} \tilde{\rho}(\mathbf{y}_i) d\mathbf{y}_i = \Pr\{\boldsymbol{\xi}_s \leq \boldsymbol{\xi}_s^{max}\} = \int_{-\infty}^{\boldsymbol{\xi}_s^{max}} \rho(\boldsymbol{\xi}_s) d\boldsymbol{\xi}_s \quad (3.33)$$

Für die negative monotone Beziehung $\boldsymbol{\xi}_s \uparrow \Leftrightarrow \mathbf{y}_i \downarrow$ gilt:

$$\Pr\{\mathbf{y}_i \leq \mathbf{y}_i^{max}\} = \int_{-\infty}^{\mathbf{y}_i^{max}} \tilde{\rho}(\mathbf{y}_i) d\mathbf{y}_i = \Pr\{\boldsymbol{\xi}_s \geq \boldsymbol{\xi}_s^{max}\} = \int_{\boldsymbol{\xi}_s^{max}}^{+\infty} \rho(\boldsymbol{\xi}_s) d\boldsymbol{\xi}_s \quad (3.34)$$

Haben mehrere korrelierte unsichere Variablen einen Einfluß auf die beschränkte Ausgangsgröße, ist die multivariate Wahrscheinlichkeitsintegration erforderlich:

$$\Pr\{\mathbf{y}_i \leq \mathbf{y}_i^{max}\} = \Pr\{\boldsymbol{\xi}_s \leq \boldsymbol{\xi}_s^{max}\} = \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{\boldsymbol{\xi}_s^{max}} \rho(\boldsymbol{\xi}_1, \dots, \boldsymbol{\xi}_{s-1}, \boldsymbol{\xi}_s) d\boldsymbol{\xi}_s d\boldsymbol{\xi}_{s-1} \cdots d\boldsymbol{\xi}_1 \quad (3.35)$$

Die Wahrscheinlichkeit, dass $\mathbf{y}_i \leq \mathbf{y}_i^{max}$, kann also durch Integration im bekannten Raum der unsicheren Parameter $\boldsymbol{\xi}$ berechnet werden. Dafür ist jedoch die Rückprojektion der Beschränkung der Ausgangsvariablen $\mathbf{y}_i^{max}$ in den Raum der Eingangsvariablen auf eine einzelne, die Monotoniebedingung erfüllende Unsicherheit $\boldsymbol{\xi}_s^{max}$ notwendig. Unter Berücksichtigung der Optimierungsvariablen $\mathbf{u}$ ergibt sich:

$$\boldsymbol{\xi}_s^{max} = \mathbf{f}^{\{M\}-1}[\boldsymbol{\xi}_1, \dots, \boldsymbol{\xi}_{s-1}, \mathbf{y}_i^{max}, \mathbf{u}] \quad (3.36)$$

Wie bereits erwähnt, wird hier der sequentielle Ansatz zur Lösung des Optimierungsproblems verwendet (Kap. 3.3.4). Damit wird auch die Rückprojektion separat vom SQP-Algorithmus, durch Lösen des nichtlinearen Gleichungssystems (Gl. (3.36)), durchgeführt. Die Berechnung der multivariaten Integration in Gl. (3.35) muss auf numerischem Weg erfolgen (Vgl. Kap. 3.2.5). Dazu sind die äußeren Integrale geeignet zu diskretisieren. Wichtig ist, dass die obere Grenze des inneren Integrals $\boldsymbol{\xi}_s^{max}$ eine Funktion der übrigen Unsicherheiten $\boldsymbol{\xi}_1, \dots, \boldsymbol{\xi}_{s-1}$ ist. Damit müssen die Beziehungen (3.36) für alle diskreten Punkte gelöst werden. Die Lösung stellt typischerweise den geschwindigkeitsbestimmenden Schritt beim sequentiellen Vorgehen der Optimierung dar (Kap. 3.3.4). Die Effizienz der Wahrscheinlichkeitsberechnung hängt somit maßgeblich vom Diskretisierungsverfahren für die Integration der äußeren Integrale ab. Die Anzahl der Rücktransformationen ergibt sich aus der Anzahl der Stützstellen für ein Integral NK und der Anzahl unsicherer Variablen $\dim(\boldsymbol{\xi})$, zu $NK^{\dim(\boldsymbol{\xi})-1}$.

Für die Diskretisierung mit dem orthogonalen Kollokationsverfahren mit approximierten Integrationsgrenzen von $[\mu - 3\sigma, \mu + 3\sigma]$ wurden bereits Untersuchungen durchgeführt (Wendt, 2005). So konnten für die Kollokation mit $NK = 2 * 5$ Stützstellen gute Ergebnisse bezüglich der Genauigkeit und Effizienz erzielt werden. Im Gegensatz zu den Arbeiten von Wendt (2005), Arellano-Garcia (2006), Li (2007) und Flemming et al. (2007) wurde in dieser Arbeit auf die Transformation der Normalverteilung in die Standardform verzichtet. Alle Integrale wurden direkt mit dem Radau-Kollokationsverfahren (siehe Anhang) mit $NK = 6$ Stützstellen diskretisiert. Während für die Verwendung von einem Integrationsintervall $NK = 6$ Stützstellen benötigt werden, sind es für zwei Integrationsintervalle $[\mu - 3\sigma, 0]$ und $[0, \mu + 3\sigma]$ lediglich $NK = 11$. In Tabelle 3.3 werden die Ergebnisse für die Berechnung von Einfachintegralen über die Normalverteilung im Vergleich zur Trapezmethode (MATLAB®, 2007) gezeigt. Als Referenz dienten Bibliotheksfunktionen sowie numerische Integratoren mit maximaler Genauigkeit. Die Fehler des Kollokationsverfahrens im Vergleich zur Trapezmethode sind bei ähnlicher Effizienz wesentlich geringer. Sie sind jedoch auch leicht höher als in Wendt (2005). Daher wurden in dieser Arbeit das Radau-Verfahren mit $NK = 11$ Stützstellen verwendet. In Tabelle 3.4 sind die Fehler für Mehrfachintegrale angegeben.

Für die Berechnung der Sensitivitäten der Beschränkungen bezüglich der Entscheidungsvariablen $\mathbf{u}$ ist zunächst die Ableitung des Integrals nach seiner oberen Grenze zu bilden. Nach Bronstein et al. (2001) gilt für das bestimmte Integral mit variabler oberer Grenze:

Tabelle 3.3: Fehler und Anzahl der Stützpunkte für die univariate Integration

Verfahren	Radau 1 Intervall	Radau 2 Intervalle	Trapezmethode 1 Intervall	Trapezmethode 2 Intervalle
Anz. Stützstellen	6	11	5	10
Fehler	1,68 %	0,13 %	4,18 %	1,11 %

Tabelle 3.4: Fehler für die univariate und multivariate Integration

Integration	Radau, 2 Intervalle (11 Stützstellen)
univariat	0,13 %
bivariat	0,27 %
trivariat	0,40 %

$\frac{d}{dx} \int_a^x f(t) dt = f(x)$. Es ergibt sich:

$$\frac{\partial \Pr\{\mathbf{y}_i \leq \mathbf{y}_i^{\max}\}}{\partial \mathbf{u}} = \frac{\partial \Pr\{\boldsymbol{\xi}_s \leq \boldsymbol{\xi}_s^{\max}\}}{\partial \boldsymbol{\xi}_s^{\max}} \frac{\partial \boldsymbol{\xi}_s^{\max}}{\partial \mathbf{u}} = \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(\boldsymbol{\xi}_1, \dots, \boldsymbol{\xi}_{s-1}) \frac{\partial \boldsymbol{\xi}_s^{\max}}{\partial \mathbf{u}} d\boldsymbol{\xi}_{s-1} \cdots d\boldsymbol{\xi}_1 \quad (3.37)$$

Die Sensitivitäten $\partial \boldsymbol{\xi}_s^{\max} / \partial \mathbf{u}$ können für jede Rückprojektion zusammen mit $\boldsymbol{\xi}_s^{\max}$ berechnet werden (Vgl. Kap. 3.3.4). Damit ist die rechenaufwändige Rückprojektion für die Auswertung der Wahrscheinlichkeit und der Sensitivitäten für gegebene $\mathbf{u}$ nur einmal notwendig. In Abbildung 3.6 ist die Anbindung der Wahrscheinlichkeitsberechnung an den SQP-Algorithmus dargestellt. Es wird deutlich, dass das sequentielle Lösungsverfahren direkt auf die Behandlung von Wahrscheinlichkeitsrestriktionen erweitert werden kann. Die bisher hergeleiteten Be-

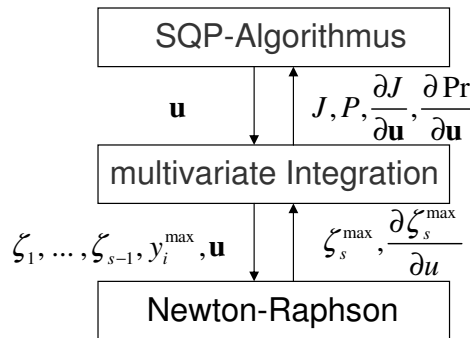


Abbildung 3.6: Anbindung der Wahrscheinlichkeitsberechnung an den SQP-Algorithmus

ziehungen sind lediglich für die Berechnung von separaten Wahrscheinlichkeitsrestriktionen gültig (siehe auch Gl. (3.10)). Dies hat neben der individuellen Vorgabe der Wahrscheinlich-

keitsniveaus α den Vorteil, dass die Behandlung der Wahrscheinlichkeitsrestriktionen sehr viel leichter ist, da die Verteilung der unsicheren Größen in erheblich elementarer Weise in die Auswertung der Wahrscheinlichkeiten eingeht (Li, 2007). Die Erweiterung und Anwendung der Methode für simultane Wahrscheinlichkeiten sind in Wendt (2005), Arellano-Garcia (2006), Li (2007) und Flemming et al. (2007) zu finden. Ein Lösungsansatz für die Behandlung von Problemen mit nicht-monotoner Beziehung zwischen unsicheren Ein- und Ausgangsvariablen wird in Arellano-Garcia (2006) präsentiert.

Beispielrechnung eines stochastischen NLP Problems

Die in dieser Arbeit verwendeten Algorithmen werden nochmals auf das Problem Gl. (3.32) angewendet. Zusätzlich wird hier der Parameter ξ als unsicherer Parameter mit bekannter Standardnormalverteilung berücksichtigt. Dieser hat einen stark nichtlinearen Einfluß auf die Beschränkungen $\mathbf{c}_1$ und $\mathbf{c}_2$. Das Optimierungsproblem wird mit Wahrscheinlichkeitsrestriktionen formuliert:

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2} \quad & J(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2) \\ \text{mit} \quad & 0,7 \leq \mathbf{u}_1 \leq 2; \quad 0,8 \leq \mathbf{u}_2 \leq 4; \quad \xi \sim \mathcal{N}(\mu = 0, \sigma = 2/7) \\ & \mathbf{P}\mathbf{c}_1 : \quad \Pr\{\mathbf{c}_1(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \xi) \leq 0\} \geq \alpha_1 \\ & \mathbf{P}\mathbf{c}_2 : \quad \Pr\{\mathbf{c}_2(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \xi) \leq 0\} \geq \alpha_2 \end{aligned} \tag{3.38}$$

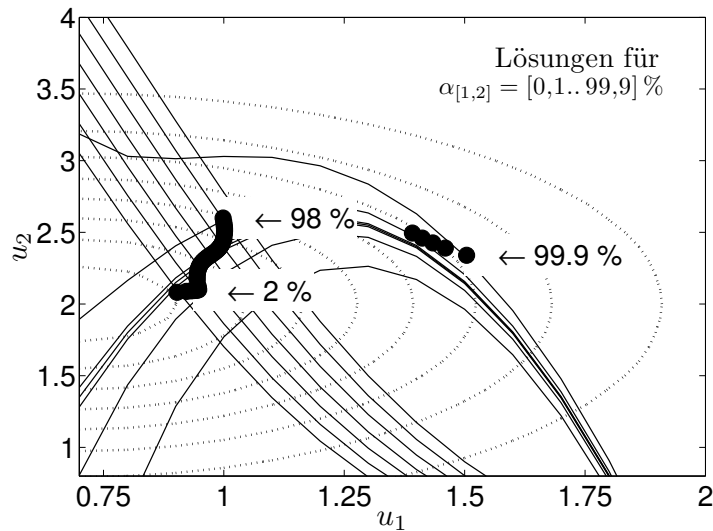
Das Wahrscheinlichkeitslevel α für die Einhaltung der NB wird separat definiert (Vgl. (3.10)). Während der unsichere Parameter ξ die exponentielle Charakteristik der UNB $\mathbf{c}_2$ ändert, wird für die quadratische Beschränkung $\mathbf{c}_1$ ein Term dritten Grades aktiv und das Problem kann auch im zulässigen Bereich nicht-konvex werden. Abbildung 3.7 zeigt den Verlauf von $\mathbf{P}\mathbf{c}_1$ und $\mathbf{P}\mathbf{c}_2$ für $\xi = [-3 : 1 : 3] \cdot \sigma_\xi^7$. Für beide UNB liegt die positive Monotonie vor (nur im zulässigen Bereich), mit $\xi \uparrow \Rightarrow c_1 \uparrow$ und $\xi \uparrow \Rightarrow c_2 \uparrow$, so dass die oben beschriebene Methode angewandt werden kann. In Tabelle 3.5 sind die Ergebnisse für die Wahrscheinlichkeitslevel $\alpha_1 = \alpha_2 = 95\%$ im Vergleich zu den deterministischen Ergebnissen (Tab. 3.2) dargestellt. Die Startwerte sind für alle Optimierungsläufe gleich. An der Lösung sind weiterhin beide Beschränkungen $\mathbf{P}\mathbf{c}_1$ und $\mathbf{P}\mathbf{c}_2$ aktiv. Die Iterationen für das *line-search* weisen die deutlichsten Unterschiede für die deterministische und stochastische Lösung auf. Hier konvergiert der Algorithmus für eine gegebene Suchrichtung zu einem Punkt, der die nichtlinearen NB erfüllt. Das schlechtere Konvergenzverhalten kann einerseits mit den zusätzlichen nichtlinearen Termen in $\mathbf{c}_1$ und $\mathbf{c}_2$, aber vor allem mit dem stark nichtlinearen Effekt durch die Integration der Verteilungsfunktionen zur Berechnung der Wahrscheinlichkeiten begründet werden. In Abbildung 3.7 sind die Realisierungen von $\mathbf{c}_1$ und $\mathbf{c}_2$ für $\xi = [-3 : 1 : 3] \cdot \sigma_\xi$ geplottet. Zusätzlich sind in Abbildung 3.7 die Lösungen für die Variation der Wahrscheinlichkeitslevel

⁷Die Schreibweise $[-3 : 1 : 3]$ wird hier für $[-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3]^T$ verwendet.

Tabelle 3.5: Anzahl der Iterationen und Funktionsaufrufe für die stochastische und deterministische Optimierung mit analytischen Sensitivitäten

	stochastisches Problem				deterministisches Problem			
	SQP It.	QP Sub-It.	<i>line</i> <i>search</i>	Fkt. Eval.	SQP It.	QP Sub-It.	<i>line</i> <i>search</i>	Fkt. Eval.
NLPQL (conSolve)	14	17	46	196	12	16	14	68
NPSOL 5.0	23	30	49	197	21	22	27	109
SNOPT 7.1-1	32	48	139	558	11	9	17	70

$\alpha_{[1,2]} = [0.1, 99.9]\%$ dargestellt. Für $\alpha_{[1,2]} \lesssim 2\%$ ist die Beschränkung $\mathbf{Pc}_1$ nicht mehr aktiv. Für $\alpha_{[1,2]} \approx 98\%$ springt die Lösung aufgrund des nicht-konvexen Lösungsraumes. Die Abbildung 3.8 zeigt die Iterationsschritte (Haupt-, Nebeniterationen und *line-search*) für die verwendeten Algorithmen. Allgemein lässt sich sagen, dass die Performanz aller Löser sehr

Abbildung 3.7: Lösungen des Optimierungsproblems mit Wahrscheinlichkeitsrestriktionen für verschiedene Wahrscheinlichkeitslevel $\alpha_{[1,2]} = [0,1..99,9]\%$

viel stärker vom Startwert abhängt als beim deterministischen Verfahren. Um den Rechenaufwand zu minimieren, hat es sich als sinnvoll erwiesen, die deterministischen Ergebnisse als Startwerte für die stochastische Optimierung zu verwenden. Damit wird durch die Berücksichtigung der Unsicherheiten lediglich der optimale *back-off* vom deterministischen Optimum bestimmt (Kap. 3.2.4). Die erzielten Genauigkeiten bei der verwendeten Wahrscheinlichkeitsintegration (Radau, $NK = 11$ Stützpunkte) haben sich für die in dieser Arbeit verwendeten Beispiele mit $\alpha \gtrsim 30\%$ als ausreichend erwiesen.

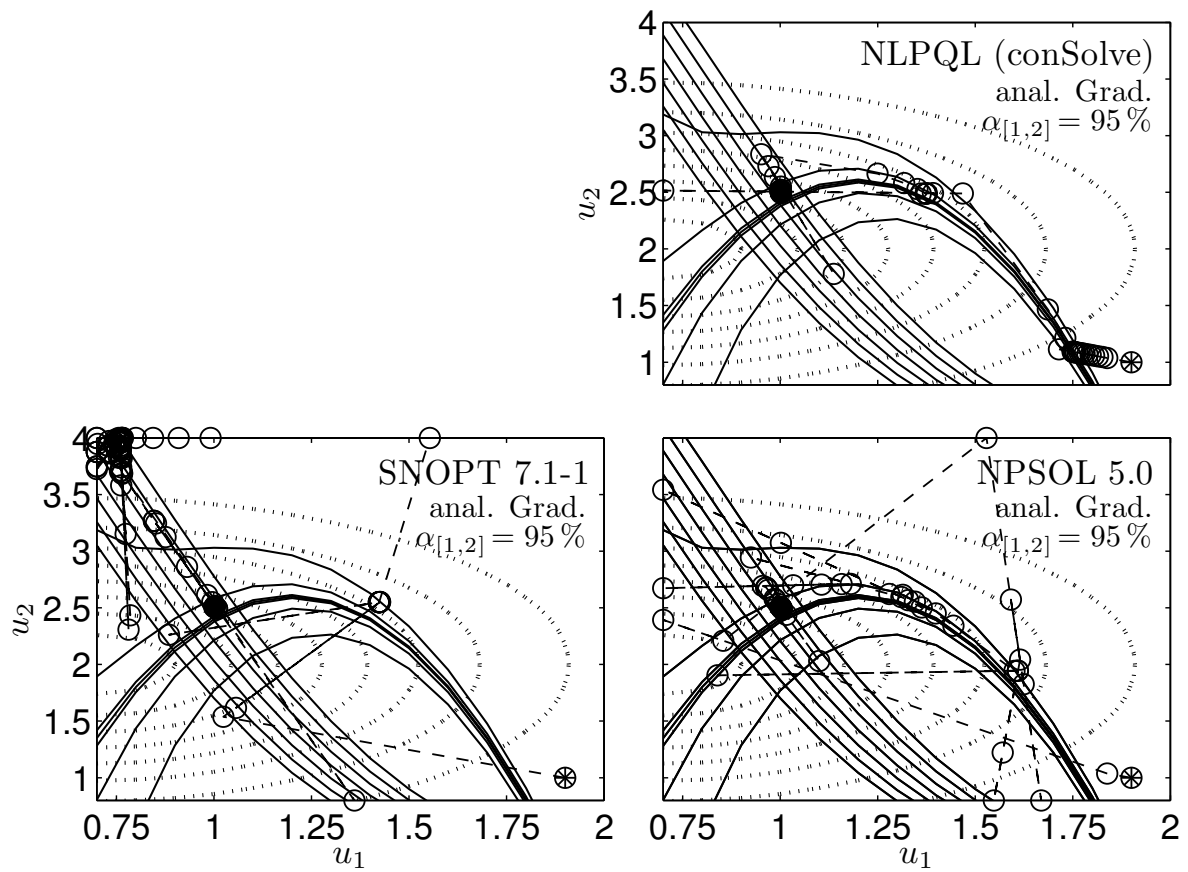


Abbildung 3.8: Iterationen zur Lösung des Optimierungsproblems mit Wahrscheinlichkeitsrestriktionen für verschiedene Lösungsalgorithmen, mit analytischen Gradienten (* - Startwert, ○ - Iterationen, ● - Lösung)

3.3.7 Allgemeine Verfahren der Zustands- und Parameterschätzung

Optimierungsbasierte Zustands- und Parameterschätzverfahren sind die Grundlage für die Anpassung von Modellparametern, die Ermittlung nicht-messbarer sowie für die Korrektur schlecht gemessener Prozessgrößen (Kapitel 3.2.3). Diese sind in der einschlägigen Literatur bereits ausführlich beschrieben (Bard, 1974; Bates und Watts, 1988; Narasimhan und Jordache, 2000). Werden die Verfahren auf nichtlineare DAE-Systeme (Gl. 3.13) angewandt, kann das SQP-Verfahren zur Lösung genutzt werden.

Das Schätzverfahren basiert auf dem Vergleich gemessener $\mathbf{y}^{mess}$ und vom Modell berechneter Daten $\mathbf{y}^{[M]} = \mathbf{g}[\mathbf{x}, \mathbf{u}, \boldsymbol{\theta}]$:

$$\mathbf{y}^{mess} = \mathbf{g}[\mathbf{x}, \mathbf{u}, \boldsymbol{\theta}] + \boldsymbol{\varepsilon} \quad (3.39)$$

Dabei wird das Gleichungssystem des Modells so formuliert, dass die Messgleichungen mit $\dim(\mathbf{g}) = n$ den gemessenen Variablen mit $\dim(\mathbf{y}) = n$ entsprechen. Ziel ist die optimale Anpassung von $\mathbf{y}^{mess}$ an $\mathbf{g}[\mathbf{x}, \mathbf{u}, \boldsymbol{\theta}]$. Die Optimierungsvariablen sind hier die Parameter $\boldsymbol{\theta}$. Die Entscheidungsgrößen $\mathbf{u}$ stellen bekannte Betriebsvariablen dar. Die Unsicherheiten der Messdaten $\boldsymbol{\varphi}$ und des Modells $\boldsymbol{\xi}$ sind im Fehlervektor $\boldsymbol{\varepsilon}$ zusammengefasst. Dieser beschreibt den Fehler zwischen den gemessenen $\mathbf{y}^{mess}$ und den berechneten Messwerten $\mathbf{g}(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \boldsymbol{\theta})$ und ist eine Funktion der zu ermittelnden Parameter $\boldsymbol{\theta}$.

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\theta}) = \mathbf{y}^{mess} - \mathbf{g}[\mathbf{x}, \mathbf{u}, \boldsymbol{\theta}] \quad (3.40)$$

Entspricht das ermittelte $\boldsymbol{\theta}$ dem wahren $\hat{\boldsymbol{\theta}}$, so entspricht $\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\theta})$ den echten Fehlern. In der Praxis wird $\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\theta}) \sim \mathcal{N}(0, \mathbf{M}\mathbf{V})$ als normalverteilt und mittelwertfrei angenommen, mit der Kovarianzmatrix der Messdaten $\mathbf{M}\mathbf{V}$. Werden Messdaten aus m Experimenten (bzw. Messungen) genutzt und sind diese nicht korreliert, lässt sich ihre Verteilungsfunktion aus dem Produkt der Einzelverteilungen bilden:

$$\rho(\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\theta}) | \mathbf{M}\mathbf{V}_1, \dots, \mathbf{M}\mathbf{V}_m) = \prod_{i=1}^m \rho_i(\boldsymbol{\varepsilon}_i(\boldsymbol{\theta}_i) | \mathbf{M}\mathbf{V}_i) \quad (3.41)$$

Es ergibt sich die multivariate Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (analog zu Gl. (3.2)):

$$\rho(\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\theta}) | \mathbf{M}\mathbf{V}_1, \dots, \mathbf{M}\mathbf{V}_m) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^{n \cdot m}}} \prod_{i=1}^m \frac{1}{\sqrt{\det \mathbf{M}\mathbf{V}_i}} \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^m \boldsymbol{\varepsilon}_i^T \mathbf{M}\mathbf{V}_i^{-1} \boldsymbol{\varepsilon}_i \right] \quad (3.42)$$

Die *Maximum-Likelihood-Estimation* (MLE) ermittelt die Parameter $\boldsymbol{\theta}$ so, dass die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (Gl. 3.42) ihr Maximum einnimmt. Es ergibt sich ein Optimierungsproblem mit den Messgleichungen $\mathbf{g}[\mathbf{x}, \mathbf{u}, \boldsymbol{\theta}]$ als GNB. Logarithmieren von 3.42, die Vernachlässigung konstanter Terme und Einsetzen von Gl. 3.40 ergibt die zu maximierende Ziel-

funktion:

$$J_{MLE}(\boldsymbol{\theta}) = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^m (\mathbf{y}^{mess} - \mathbf{g}[\mathbf{x}, \mathbf{u}, \boldsymbol{\theta}])^T \mathbf{M}\mathbf{V}_i^{-1} (\mathbf{y}^{mess} - \mathbf{g}[\mathbf{x}, \mathbf{u}, \boldsymbol{\theta}]) \quad (3.43)$$

Durch die unausweichlichen Messfehler und Modellunsicherheiten entsprechen die geschätzten Parameter $\boldsymbol{\theta}^*$ nicht den exakten Parametern. Die quantitative Bewertung der Güte der Schätzungen erfolgt unter der Annahme, dass die ermittelten Parameter normalverteilt sind $\mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{\theta}} = \boldsymbol{\theta}^*, \boldsymbol{\Theta}\mathbf{V} := \boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{\theta}})$. Für eine zuverlässige Parameterschätzung sind die Varianzen in $\boldsymbol{\Theta}\mathbf{V}$ gering. Mit anderen Worten: Die Lösung des MLE-Problems $\boldsymbol{\theta}^*$ wird wenig durch zufällige Messfehler beeinflusst. Liegt $\boldsymbol{\theta}^*$ am unbeschränkten Optimum, lässt sich eine asymptotische untere Grenze für $\boldsymbol{\Theta}\mathbf{V} = \mathbf{E}\{(\boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\theta}^*)^2\}$ durch die Berechnung der Inversen der Fischer'schen Informationsmatrix abschätzen.

$$\boldsymbol{\Theta}\mathbf{V} \approx \mathbf{F}^{-1}[\boldsymbol{\theta}^*] = \left(\sum_{i=1}^m \left(\frac{d\mathbf{g}}{d\boldsymbol{\theta}^*} \right)^T \mathbf{M}\mathbf{V}_i^{-1} \left(\frac{d\mathbf{g}}{d\boldsymbol{\theta}^*} \right) \right)^{-1} \quad (3.44)$$

Die Berechnung der Sensitivitäten der Messgleichungen erfolgt analog zu den Berechnungen in Kapitel 3.3.4. Die Fischer'sche Informationsmatrix entspricht der Krümmung des Erwartungswertes der Zielfunktion am Optimum $\mathbf{F} = d^2(E\{J_{MLE}\})/d\boldsymbol{\theta}^{*2}$ (Heine, 2004). Je stärker die Krümmung, desto stärker wirken sich Veränderungen der Parameter aus. Der Einfluss zufälliger Meßfehler nimmt ab, die Parameter sind gut identifizierbar. Die Kovarianzmatrix gibt also ein Maß für den Konfidenzbereich der identifizierten Parameter an (Faber et al., 2006). Ist das Modell nicht eindeutig identifizierbar, so sind die Spalten von $\mathbf{F}^{-1}[\boldsymbol{\theta}^*]$ linear abhängig und die Matrix wird singulär. Die Korrelation der Parameter ist Teil der Kovarianzmatrix und beinhaltet eine quantitatives Maß für die Korrelation zwischen den Parametern. Wichtig im Rahmen dieser Arbeit ist, dass der Konfidenzbereich der Parameter auch als Maß für die Modellgüte interpretiert werden kann (Valappil und Georgakis, 1999, 2000). Sind die Messinformationen ausreichend und treten dennoch große Werte der Matrixelemente von $\boldsymbol{\Theta}\mathbf{V}$ auf, so gibt das Modell das Prozessverhalten im gemessenen Bereich nur mit geringer Genauigkeit wieder.

3.3.8 Das Extended Kalman Filter

Das Extended Kalman Filter (EKF) ist ein dynamisches Schätzverfahren, welches als Erweiterung des linearen Kalman Filters auch für nichtlineare Systeme geeignet ist. In seiner kontinuierlichen Form (kontinuierliches Modell, diskrete Messzeitpunkte) eignet es sich daher für verfahrenstechnische Problemstellungen. Weiterhin kann es neben der Zustands- auch für die Parameterschätzung eingesetzt werden. Seine Herleitung ist bereits ausführlich in der einschlägigen Literatur beschrieben (Gelb, 1974; Maybeck, 1979). Vergleiche mit weiteren dynamischen Schätzverfahren bzw. mit dem beschränkten Kalman Filter (CEKF) finden sich

bspw. in Gesthuisen und Kraemer (2002), Haseltine und Rawlings (2005) und Heine (2004). Das Prozessmodell ist als stochastisches Zustandsraummodell zu formulieren:

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{x}}(t) &= \mathbf{f}[\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t), \boldsymbol{\theta}, t] + \boldsymbol{\xi}(t) \\ \mathbf{x}(t=0) &= \mathbf{x}_0 + \boldsymbol{\xi}_0 \\ \mathbf{y}(t) &= \mathbf{h}[\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t), \boldsymbol{\theta}] + \boldsymbol{\varphi}(t) \\ \text{mit } \mathbf{x}(t) &\in \mathbb{R}^n\end{aligned}\tag{3.45}$$

Im Gegensatz zur Parameterschätzung (Kap. 3.3.7) wird hier explizit zwischen Mess- und Modellunsicherheiten $\boldsymbol{\varphi}(t)$ und $\boldsymbol{\xi}(t)$ unterschieden. Es werden Unsicherheiten bezüglich der Anfangswerte $\boldsymbol{\xi}_0$, der Modellgleichungen $\boldsymbol{\xi}$ sowie der Messdaten $\boldsymbol{\varphi}$ berücksichtigt. Die Unsicherheiten der Modellgleichungen werden auch als Systemrauschen bezeichnet und repräsentieren nicht modellierte dynamische Effekte. Alle Unsicherheiten werden als mittelwertfreie normalverteilte Störgrößen betrachtet und lassen sich durch die entsprechenden Kovarianzen charakterisieren.

$$\boldsymbol{\xi} \sim \mathcal{N}(0, \mathbf{QV}); \quad \boldsymbol{\xi}_0 \sim \mathcal{N}(0, \mathbf{PV}_0); \quad \boldsymbol{\varphi} \sim \mathcal{N}(0, \mathbf{MV})\tag{3.46}$$

Zusätzlich gilt die Annahme, dass $\boldsymbol{\xi}$ und $\boldsymbol{\varphi}$ unkorreliert sind $E\{\boldsymbol{\xi} \boldsymbol{\varphi}^T\} = 0$. Der Algorithmus stellt eine rekursive Verbesserung der Schätzgrößen für jeden neuen Messwert zum Zeitpunkt k dar.

$$\mathbf{x}_k^{(+)} = \mathbf{x}_k^{(-)} + \boldsymbol{\xi}_k\tag{3.47}$$

Dieser Schritt wird auch als *measurement update* bezeichnet ($^{(+)}$ kennzeichnet die Aktualisierung der Schätzgrößen). Die Korrektur der Schätzgrößen $\boldsymbol{\xi}_k$ resultiert aus der Lösung des Optimierungsproblems (Heine, 2004):

$$\begin{aligned}\min_{\boldsymbol{\xi}_k} J(\boldsymbol{\xi}_k) &= \frac{1}{2} \boldsymbol{\xi}_k^T \cdot \mathbf{PV}_k^{(-)-1} \cdot \boldsymbol{\xi}_k \\ &+ \frac{1}{2} \left(\mathbf{y}_k^{mess} - \mathbf{h} \left[(\mathbf{x}_k^{(-)} + \boldsymbol{\xi}_k), \mathbf{u}_k, \boldsymbol{\theta} \right] \right)^T \\ &\cdot \mathbf{MV}_k^{-1} \cdot \left(\mathbf{y}_k^{mess} - \mathbf{h} \left[(\mathbf{x}_k^{(-)} + \boldsymbol{\xi}_k), \mathbf{u}_k, \boldsymbol{\theta} \right] \right)\end{aligned}\tag{3.48}$$

Hier werden jeweils vom Modell vorhergesagte Größen $\mathbf{h}[\mathbf{x}_k^{(-)}, \mathbf{u}_k, \boldsymbol{\theta}]$ (durch Simulation von t_{k-1} bis t_k) und Messwerte $\mathbf{y}_k^{mess}$ berücksichtigt. $\boldsymbol{\xi}_k$ wird von der Genauigkeit des neuen Messwertes $\mathbf{MV}_k$ bzw. der Genauigkeit der vom Modell vorhergesagten Größen $\mathbf{PV}_k^{(-)}$ zum aktuellen Zeitpunkt k bestimmt. Werden die Messgleichungen $\mathbf{h}$ um $\mathbf{x}_k^{(-)}$ linearisiert, ergibt Gl. (3.48) ein QP-Problem welches durch Auswerten der Newton-Gleichungen explizit gelöst

werden kann.

$$\xi_k = \left[\mathbf{P}\mathbf{V}_k^{(-)-1} \mathbf{H}_k^{(-)T} \mathbf{M}\mathbf{V}_k^{-1} \mathbf{H}_k^{(-)} \right]^{-1} \mathbf{H}_k^{(-)T} \mathbf{M}\mathbf{V}_k^{-1} \Delta \mathbf{y}_k^{(-)} \quad (3.49)$$

mit $\Delta \mathbf{y}_k^{(-)} = \mathbf{y}_k^{mess} - \mathbf{y}_k^{(-)}$ und $\mathbf{H}_k^{(-)} = \left. \frac{\partial \mathbf{h}}{\partial \mathbf{x}} \right|_{\mathbf{x}_k^{(-)}}$

Als Ergebnis werden die unsicheren Informationen der Messdaten und der vom Modell vorhergesagten Größen zur neuen Schätzgröße $\mathbf{x}_k^{(+)}$ zusammengeführt (Gl. (3.47)). Diese besitzt nun eine verbesserte Genauigkeit im Vergleich sowohl zur Messgröße, mit $\mathbf{M}\mathbf{V}_k^{(-)}$, als auch zur Modellgröße, mit $\mathbf{P}\mathbf{V}_k^{(-)}$. Die Vorschrift zur Berechnung der entsprechenden Kovarianzmatrix des Schätzfehlers resultiert auf der Auswertung der Inversen der zweiten Ableitung von $J(\xi_k^*)$ (Heine, 2004):

$$\mathbf{P}\mathbf{V}_k^{(+)} = \left[\mathbf{I} - \left(\left[\mathbf{P}\mathbf{V}_k^{(-)-1} + \mathbf{H}_k^{(-)T} \mathbf{M}\mathbf{V}_k^{-1} \mathbf{H}_k^{(-)} \right]^{-1} \mathbf{H}_k^{(-)T} \mathbf{M}\mathbf{V}_k^{-1} \right) \mathbf{H}_k^{(-)} \right] \mathbf{P}\mathbf{V}_k^{(-)} \quad (3.50)$$

Die Genauigkeiten der Messgrößen sind bekannt und hier konstant über die Messzeitpunkte ($\mathbf{M}\mathbf{V}_k = \mathbf{M}\mathbf{V}$). Für die Berechnung der Modellgrößen $\mathbf{y}_k^{(-)}$ sowie der zeitlichen Entwicklung der Genauigkeiten der Zustandsgrößen $\mathbf{P}\mathbf{V}_k^{(-)}$ sind die Modellgleichungen ausgehend von der letzten Schätzung von t_{k-1} bis t_k zu lösen (*time update*). Hier wird die Annahme getroffen, dass das System linear ist und die Verteilung der Schätzgrößen durch eine Gauß'sche Normalverteilung beschrieben werden kann. Die Integration des deterministischen Teils der Modellgleichungen (Gl. (3.45)) liefert den Erwartungswert $\mathbf{x}_k^{(-)}$ mit dem letzten geschätzten Zustand $\mathbf{x}_{k-1}^{(+)}$ als Anfangswert. Die Entwicklung der Kovarianzmatrix der Schätzfehler $\mathbf{P}\mathbf{V}_k^{(-)}$ erfolgt durch Lösen der linearen Matrix-Riccati-Gleichung (Gl. (3.51)), für den Anfangswert $\mathbf{P}\mathbf{V}_{k-1}^{(+)}$:

$$\dot{\mathbf{P}}\mathbf{V}(t) = \mathbf{A}(\mathbf{x}(t)) \cdot \mathbf{P}\mathbf{V}(t) + \mathbf{P}\mathbf{V}(t) \cdot \mathbf{A}^T(\mathbf{x}(t)) + \mathbf{Q}\mathbf{V} \quad (3.51)$$

mit $\mathbf{A}(\mathbf{x}(t)) = \left. \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{x}} \right|_{\mathbf{x}(t)}$

Die Lösungen der Gl. (3.47), (3.49), (3.50), (3.51) und des deterministischen Teils von Gl. (3.45) sind aufgrund der wiederholten Linearisierung der Modellgleichungen mit geringem und konstantem Rechenaufwand verbunden. Der Algorithmus ist daher sehr gut für den *online*-Einsatz geeignet. Die Rechenzeit wird von der Wahl der Länge eines Abtastintervalls bestimmt. Um eine höhere Genauigkeit zu erreichen, können die nichtlinearen Modellgleichungen für die deterministische Vorhersage verwendet werden (in dieser Arbeit). Weiterhin wird, basierend auf der Entwicklung der Modellgleichungen mit einem Verfahren höherer Ordnung, eine exaktere Schätzung der beschreibenden Momente der approximierten Gaußverteilung $\mathbf{x}_k^{(-)}$ und $\mathbf{P}\mathbf{V}_k^{(-)}$ erreicht (Julier und Uhlmann, 1997).

Anwendungsvoraussetzung für die Zustandsschätzung ist die Beobachtbarkeit der nicht gemessenen Zustandsgrößen. Allgemein besitzt auch das EKF nur lokale Gültigkeit und bietet keine Konvergenz- oder Stabilitätsgarantie. Die Beobachtbarkeit hängt von den Modellgleichungen und den verfügbaren Messgrößen ab. Sie wird für die nichtlinearen Modellgleichungen hier nur lokal nach Hautus überprüft (Allgöwer et al., 1999):

$$\text{rang} \begin{pmatrix} \lambda_i \mathbf{I} - \mathbf{A} \\ \mathbf{H} \end{pmatrix} = \text{maximal}; \quad \forall i \in \{1, \dots, n\} \quad (3.52)$$

λ_i stellen dabei die n Eigenwerte der Matrix $\mathbf{A}$ dar. Heine (2004) weist darauf hin, dass die praktische Beobachtbarkeit zusätzlich von der Qualität der Messungen und der Sensitivität der Beobachtbarkeitsmatrix abhängt und daher nicht zwangsläufig erfüllt ist.

Die Werte der Kovarianzmatrizen $\mathbf{M}\mathbf{V}$ und $\mathbf{P}\mathbf{V}_0$ lassen sich anhand der Messgenauigkeiten analysieren (Kawohl et al., 2007). Als Alternative zur iterativen Einstellung der Diagonalmatrixelemente von $\mathbf{Q}\mathbf{V}$ ermittelt Heine (2004) die Matrixelemente durch Lösen eines Parameteroptimierungsproblems. Ein weiterer von Valappil und Georgakis (1999), Valappil und Georgakis (2000) vorgeschlagener Ansatz basiert auf der Kenntnis der Parameterkovarianzmatrix $\mathbf{\Theta}\mathbf{V}$ ausgewählter Modellparameter $\boldsymbol{\theta}$. Ausgehend von der Annahme, dass $\mathbf{Q}\mathbf{V}$ vor allem parametrische Unsicherheiten präsentiert, wird $\mathbf{Q}\mathbf{V}$ für jeden Zeitpunkt k wie folgt abgeschätzt:

$$\mathbf{Q}\mathbf{V} = \frac{\partial \mathbf{f}[\mathbf{x}_k, \mathbf{u}_k, \boldsymbol{\theta}_k]}{\partial \boldsymbol{\theta}_k} \cdot \mathbf{\Theta}\mathbf{V} \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{f}[\mathbf{x}_k, \mathbf{u}_k, \boldsymbol{\theta}_k]}{\partial \boldsymbol{\theta}_k} \right)^T \quad (3.53)$$

$\mathbf{\Theta}\mathbf{V}$ ist im Rahmen einer Parameterschätzung (Kap. 3.3.7) auf Basis dynamischer Versuche im relevanten Betriebsbereich zu ermitteln⁸.

⁸Der Index k für die Parameter $\boldsymbol{\theta}_k$ wird hier nur benötigt, wenn das Kalman-Filter auch für die Parameterschätzung verwendet wird (Kap. 5.3).

4 Theoretische und experimentelle Voruntersuchungen zum Betrieb der Destillationskolonne

Die praktische Erprobung modellbasierter Prozessführungskonzepte wurde an einer Destillationskolonne im Pilotmaßstab, im Technikum des Fachgebiets Dynamik und Betrieb technischer Anlagen an der TU-Berlin, realisiert. Die Kolonne ist Teil eines gekoppelten Kolonnensystems, welches aus einer Hoch- und Niederdruck-Kolonne besteht. Untersuchungen zum energetisch und stofflich gekoppelten Betrieb zur Trennung von Methanol/Wasser finden sich in Bamberg (2001) und Wendt (2005). Darauf folgende Arbeiten sind der Analyse der Trennung des homogen azeotropen Gemisches Acetonitril/Wasser mit dem Zweidruckverfahren gewidmet ((Forner, 2003; Repke et al., 2005)). Die im Rahmen dieser Arbeit dazu teilweise parallel durchgeführten Untersuchungen fanden an der Hochdruckkolonne statt.

Im Folgenden werden der Aufbau, die Kolonnenmodellierung sowie theoretische Untersuchungen zu den Gemischeigenschaften und zum optimalen stationären Betrieb beschrieben (Kap. 4.1-4.3). Praktische Aspekte des Kolonnenbetriebs, wie das konventionelle Automatisierungskonzept und die verwendete Druckregelungsstrategie, das Anfahren und die Stabilisierung des stationären Betriebs werden im Kapitel 4.4 diskutiert. Weiterhin wird die Güte des stationären Prozessmodells anhand experimenteller Daten und mit Hilfe optimierungsbasierter Methoden untersucht (Kap. 4.5). Damit sind Aussagen zur Ergebnisunsicherheit modellbasierter Daten möglich 4.5.2.

4.1 Aufbau der Rektifikationskolonne

Ausführliche Beschreibungen zum Aufbau der Zweidruck-Destillationsanlage sind in Bamberg (2001) zu finden. Daher werden hier nur die wichtigsten Details wiedergegeben. In Abbildung 4.1 ist das Rohre- und Instrumenten-Fließbild dargestellt. Die Hochdruckkolonne verfügt über einen eigenen elektrisch beheizten Naturumlaufverdampfer (WE101). Es handelt sich um eine Bodenkolonne mit 28 Böden, die mit jeweils einer geschlitzten Flachglocke ausgestattet sind. Der Kolonnendurchmesser beträgt $\varnothing_{innen} = 0,107m$, der Bodenabstand $h^{Boden} = 0,15m$. Das Zulauf- und Ablaufwehr sind zentral positioniert. Der Kolonnenmantel ist mit einer dicken Isoliermatte aus Mineralfaserwolle gedämmt. Beim Kondensator (WK101) handelt es

sich um einen Totalkondensator in stehender gefluteter Ausführung mit einem Rohrbündelwärmetauscher mit 15 Rohren. Abbildung 4.2 zeigt eine schematische Darstellung der Bauteile. Die Kolonne ist aufwendig instrumentiert und verfügt auf allen Böden über PT-100 Widerstandsthermometer (T101-T128). Weiterhin werden die Füllstände im Sumpf (LIR101) und Kondensator (LIR102) durch schwimmergesteuerte Kontaktketten gemessen¹. Alle Ein- und Ausgangstemperaturen sowie die Volumenströme von Feed- (F002), Produkt- (F101/5) und Rücklaufstrom (F104) sowie der Kondensatkühlwasserstrom (F103) werden mit Hilfe magnetisch-induktiver Durchflußmeßgeräte gemessen und über motorgetriebene Stellventile eingestellt. Der Druck wird im Kopf (P103) und Sumpf (P104) gemessen. Der Feed wurde aus zwei Tanks (Tank 2 und 6) bei Nutzung einer Feedheizung zugeführt. Die Feedzugabe ist auf den Böden 2-10 und 16-24, auf jedem zweiten Boden möglich². Die Produktströme wurden in den Feedtank zurückgeführt. Es sind Probennahmen auf den Böden 3, 7, 13, 26 sowie von Feed- und Produktströmen möglich. Die Konzentrationen der Flüssigphasen wurden mit Hilfe eines *offline*-Gas-Chromatographen analysiert.

4.2 Rigorose Kolonnenmodellierung

Bamberg (2001) zeigt, dass das Anlagenverhalten der Zweidruck-Destillationsanlage mit guter Genauigkeit durch ein von Rix (1998) entwickeltes Modell, eingebunden in das kommerzielle Simulationsprogramm SPEEDUP, abgebildet werden kann. In Wendt (2005) wurde das für den Koppelwärmetauscher vereinfachte Modell in Fortran implementiert und stationär sowie dynamisch für das Stoffgemisch Methanol/Wasser validiert. Das in SPEEDUP implementierte Modell wurde im Rahmen der Arbeit von Forner (2003) weitestgehend nach gProms übernommen und die Stoffdaten für Acetonitril-Wasser angepasst. Erste Vergleiche mit experimentellen Daten finden sich in (Forner, 2003; Repke et al., 2005). Alle verwendeten Prozessmodelle lassen sich den rigorosen Kolonnenmodellen zuordnen, da jede Trennstufe sowie der Kondensator und Sumpf einen eigenen dynamisch bilanzierten Bilanzraum darstellen (Rix, 1998). Die Nutzung eines Gleichgewichtsmodells ist für die Modellierung einer Bodenkolonne mit einem Zwei-Komponenten-Gemisch ausreichend (Rix, 1998). Gegenüber den detaillierteren Stofftransportmodellen zeichnen sich Gleichgewichtsmodelle durch einen geringeren Programmier- und Rechenaufwand aus.

Die Modellierungstiefe dieser Arbeit orientiert sich an den Arbeiten von Wendt (2005) und Forner (2003). Es ist zu beachten, dass hier unterschiedliche Gleichungen und Bezugsgrößen für die Beschreibung des Druckverlusts und der Wehrhydraulik genutzt wurden, so daß Abweichungen in den entsprechenden angepassten Parametern auftreten können. Für die Modellierung des Kondensators der Hochdruckkolonne wurde eine eigene Beschreibung gewählt.

¹Die Schwimmerketten zeigen den Füllstand nur verzögert für diskrete Werte an, so daß die exakte Füllstandsregelung nur durch stark schwankende Volumenströme realisierbar ist.

²Im Folgenden [2 : 2 : 10, 16 : 2 : 24].

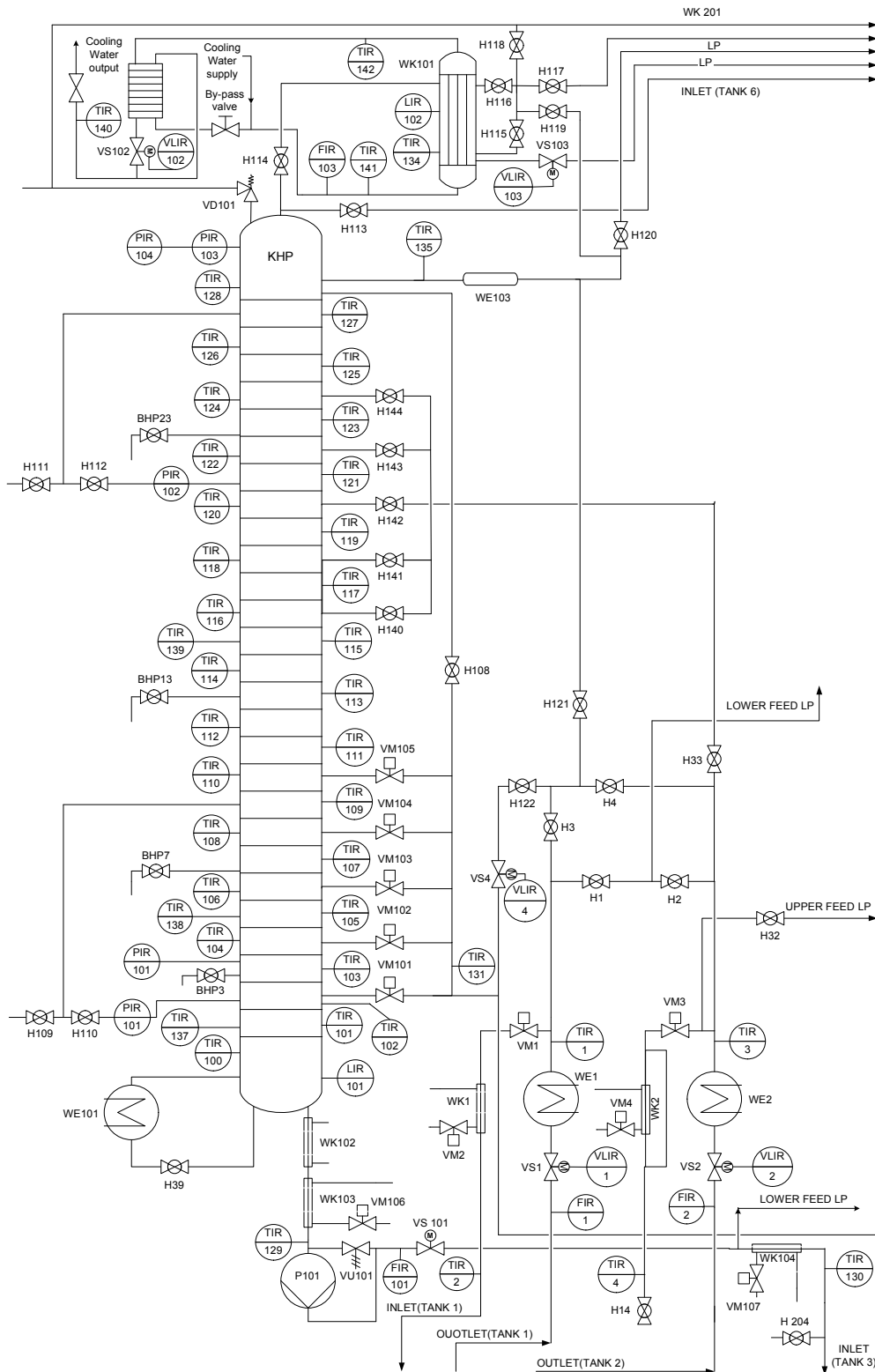


Abbildung 4.1: Rohre- und Instrumenten-Fließbild der Hochdruckkolonne

Alle Regler werden als ideale Regler angenommen, so daß keine Dynamiken, verursacht durch zusätzliche Stellgesetze, berücksichtigt werden. Die Simulation und alle darauf aufbauenden Algorithmen wurden in Matlab implementiert. Rechenintensive Funktionen wurden aufgrund der Geschwindigkeitsvorteile von kompilierten Funktionen in Fortran als mex-Datei angebunden. Im Folgenden wird das verwendete Kolonnenmodell (Tab. 4.1 und 4.2) erläutert.

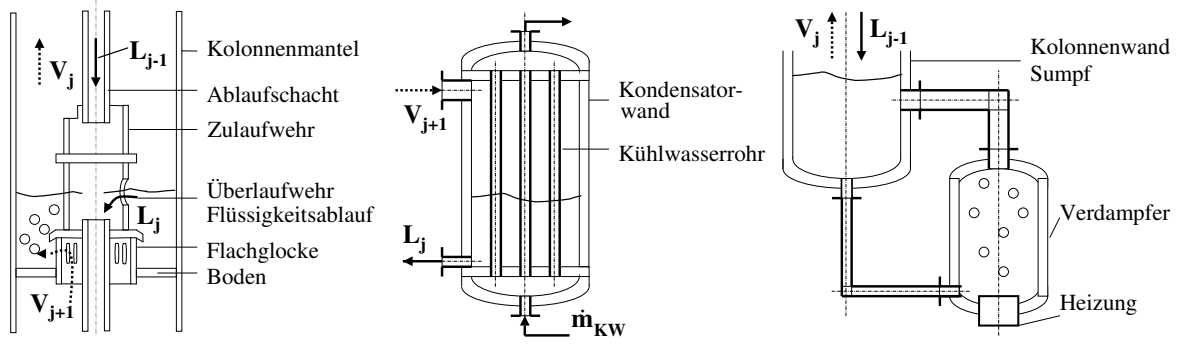


Abbildung 4.2: Schematische Darstellung des Glockensbodens, des Kondensators und des Sumpfes sowie bilanzierte Ströme

Kondensatormodell: Für den gefluteten Totkondensator (Abb. 4.2, Mitte) ergeben sich die Konzentrationen aus dem aufsteigenden Dampfstrom des obersten Bodens $y_{i,j+1}$. Der Destillatstrom $D = L/R$ und seine Flüssigkonzentrationen $x_{i,j}$ werden mit den Komponentenbilanzen und der Summenbeziehung des Flüssigstroms bilanziert. $R = L/D$ ist das Rücklaufverhältnis. Der Füllstand $l_{\%}^{Kond}$ wird als ideal geregelt angenommen. Es ergibt sich der molare Flüssig-Holdup $\tilde{H}_j$. Der Kopfdruck der Kolonne wird vereinfacht über die Temperatur des kondensierenden Dampfes T_j^V bilanziert, mit $k_{i,j} = f(T_j^V, x_{i,j}, p)$. Für die in Tab. 4.1 dargestellte Beziehung wurden die Gleichgewichtsbeziehungen (GGW-Beziehungen) der Komponenten $y_{i,j} = x_{i,j} K_{i,j}$ in die Summenbeziehung der Dampfphase $y_1 + y_2 = 1$ eingesetzt. Die Dampftemperatur T_j^V stellt sich in Abhängigkeit des Wärmeübergangs bei der Filmkondensation $\dot{Q}_{WU}^V$ ein. Alle Wärmeübergänge werden mit Punktmodellen modelliert, es werden keine Temperaturverteilungen berücksichtigt. Die mittlere Kühlwassertemperatur T_{MW}^{KW} (lineares Profil angenommen) ist eine Funktion des gewählten Kühlmengenstroms F^{KW} sowie der übergehenden Wärme bei der Kondensation $\dot{Q}_{WU}^V$ (nur Kondensationswärme $\tilde{h}_j^{LV}(T^V)$) und der Kondensatunterkühlung $\dot{Q}_{WU}^L$. Der Kondensatfüllstand $l_{\%}^{Kond}$ beeinflusst die zu Verfügung stehende Wärmeübertragungsfläche von A_{WU}^{Kond} .

Stufenmodell: Die molaren Flüssig- und Dampfströme L_j und V_j ergeben sich aus den Komponentenbilanzen. Die Feedstromzugabe F_j ist auf jedem Boden möglich, mit $j = [2 : 1 : 28]$. Die mittlere Bodentemperatur T_j wird in der Enthalpiebilanz berechnet. Da der Kolonnenschuss isoliert ist, werden Wärmeverluste vernachlässigt. Ebenso wird die Wärmekapazität des

Tabelle 4.1: Modellgleichungen der gewählten Bilanzräume der Hochdruckkolonne

Kondensatormodell, $j = 1$:

Komponentenbilanz:	$\frac{\partial(\tilde{H}U_j \cdot \mathbf{x}_{i,j})}{\partial t} = \mathbf{V}_{j+1} \mathbf{y}_{i,j+1} - \mathbf{L}_j (1 + \frac{1}{R}) \mathbf{x}_{i,j} ; \text{ für } i \in \{1, 2\}$
Energiebilanz:	$\dot{Q}^{LV} = \mathbf{V}_{j+1} \tilde{\mathbf{h}}_{j+1}^{LV}(\mathbf{T}_j^V)$
(Kondensation)	$\dot{Q}_{WU}^V = k_{WU}^V (1 - l_{\%}^{Kond}) A_{WU}^{Kond} (\mathbf{T}_j^V - T_{MW}^{KW})$
Energiebilanz:	$(mc_p^{Wand} + mc_p^{KW}) \frac{\partial T_{MW}^{KW}}{\partial t} =$
(Kühlwasser)	$\dot{Q}_{WU}^L + \dot{Q}_{WU}^V + 2F^{KW} c_p^{KW} (T_{ein}^{KW} - T_{MW}^{KW})$
Molarer Holdup:	$\tilde{H}U_j = A_{quer}^{Kond} l_{\%}^{Kond} \tilde{\rho}_j^L$
Kopfdruck:	$1 = \mathbf{x}_{1,j} \mathbf{K}_{1,j} + \mathbf{x}_{2,j} \mathbf{K}_{2,j}$
Summenbeziehung:	$\sum_i \mathbf{x}_{i,j} = 1 ; \text{ für } i \in \{1, 2\}$
Energiebilanz:	$\frac{\partial(\tilde{H}U_j \cdot \tilde{\mathbf{u}}_j^L)}{\partial t} = \mathbf{L}_j (1 + \frac{1}{R}) (\tilde{\mathbf{h}}_j^L(\mathbf{T}_j^V) - \tilde{\mathbf{h}}_j^L(\mathbf{T}_j^L)) - \dot{Q}_{WU}^L$
(Kondensat)	$\dot{Q}_{WU}^L = k_{WU}^L \frac{l_{\%}^{Kond}}{l_{\%}^{Kond,max}} A_{WU}^{Kond} (\mathbf{T}_j^{LV} - T_{MW}^{KW})$

Stufenmodell, $j \in \{2, \dots, 29\}$:

Komponentenbilanz:	$\frac{\partial(\tilde{H}U_j \cdot \mathbf{x}_{i,j})}{\partial t} = \mathbf{V}_{j+1} \mathbf{y}_{i,j+1} + \mathbf{L}_{j-1} \mathbf{x}_{i,j-1}$ $- \mathbf{V}_j \mathbf{y}_{i,j} - \mathbf{L}_j \mathbf{x}_{i,j} + \mathbf{F}_j^{Feed} \mathbf{x}_{i,j}^{Feed} ; \text{ für } i \in \{1, 2\}$
GGW-Beziehung:	$\mathbf{y}_{i,j} - (1 - \eta_j) \mathbf{y}_{i,j+1} = \eta_j \mathbf{x}_{i,j} \mathbf{K}_{i,j} ; \text{ für } i \in \{1, 2\}$
Molarer Holdup:	$\tilde{H}U_j = \varepsilon^L (V_{stat}^{Boden} + A_{quer}^{Boden} \mathbf{L}_j^+) \tilde{\rho}_j^L ; \quad \mathbf{L}_j^+ = 750 \left(\frac{\mathbf{L}_j / 3600}{\tilde{\rho}_j^L l_{Wehr}^L} \right)^{2/3}$
Druckverlust:	$p_j - p_{j-1} = 10^{-5} (\Delta p_j^{trock} + \Delta p_j^{stat})$ $\Delta p_j^{trock} = \frac{1}{2} \rho_j^L \xi_w (\mathbf{w}_j^{V,Glocke})^2 ; \quad \mathbf{w}_j^{V,Glocke} = \frac{\mathbf{V}_j / 3600}{A_{quer}^{Glocke} \tilde{\rho}_j^V} ;$ $\Delta p_j^{stat} = \varepsilon^L (h^{Wehr} + \mathbf{L}_j^+) g \rho_j^L$
Summenbeziehungen:	$\sum_i \mathbf{x}_{i,j} = 1, \quad \sum_i \mathbf{y}_{i,j} = 1 ; \text{ für } i \in \{1, 2\}$
Energiebilanz:	$\frac{\partial(\tilde{H}U_j \cdot \tilde{\mathbf{u}}_j^L(T^L))}{\partial t} =$ $\mathbf{V}_{j+1} \tilde{\mathbf{h}}_{j+1}^V + \mathbf{L}_{j-1} \tilde{\mathbf{h}}_{j-1}^L - \mathbf{V}_j \tilde{\mathbf{h}}_j^V - \mathbf{L}_j \tilde{\mathbf{h}}_j^L + \mathbf{F}_j^{Feed} \tilde{\mathbf{h}}_j^{L,Feed}$

Tabelle 4.2: Modellgleichungen der gewählten Bilanzräume der Hochdruckkolonne

Sumpfmmodell, $j = 30$:

Komponentenbilanz:	$\frac{\partial(\tilde{H}U_j \cdot \mathbf{x}_{i,j})}{\partial t} = \mathbf{L}_{j-1} \mathbf{x}_{i,j-1} - \mathbf{V}_j \mathbf{y}_{i,j} - \mathbf{L}_j \mathbf{x}_{i,j} ; \text{ für } i \in \{1, 2\}$
GGW-Beziehung:	$\mathbf{y}_{i,j} = \mathbf{x}_{i,j} \mathbf{K}_{i,j}; \text{ für } i \in \{1, 2\}$
Holdup:	$\tilde{H}U_j = (V_{stat}^{Sumpf} + l_{\%}^{Sumpf} V_{var}^{Sumpf}) \tilde{\rho}_j^L$
Druckverlust:	$\mathbf{p}_j - \mathbf{p}_{j-1} = 10^{-5} \Delta \mathbf{p}_j^{trock}$ $\Delta \mathbf{p}_j^{trock} = \frac{1}{2} \rho_j^L \xi_w (\mathbf{w}_j^{V,Glocke})^2 ; \quad \mathbf{w}_j^{V,Glocke} = \frac{\mathbf{V}_j / 3600}{A_{Glocke}^{quer} \tilde{\rho}_j^V};$
Summenbeziehungen:	$\sum_i \mathbf{x}_{i,j} = 1, \quad \sum_i \mathbf{y}_{i,j} = 1; \text{ für } i \in \{1, 2\}$
Energiebilanz:	$\frac{\partial(\tilde{H}U_j \cdot \tilde{\mathbf{u}}_j^L)}{\partial t} = \mathbf{L}_{j-1} \tilde{\mathbf{h}}_{j-1}^L - \mathbf{V}_j \tilde{\mathbf{h}}_j^V - \mathbf{L}_j \tilde{\mathbf{h}}_j^L + \dot{Q}^{Sumpf}$

Kolonnenmantels vernachlässigt. Der molare Flüssig-Holdup $\tilde{H}U_j$ ergibt sich als Funktion des konstanten statischen (volumetrischen) Holdups V_{stat}^{Boden} und der Wehrüberhöhung $\mathbf{L}_j^+$, die über die Francis-Wehr Formel berechnet wird. Der von der Flüssigkeitsbelastung abhängige Holdup beeinflusst neben dem Druckverlust auch das dynamische Kolonnenverhalten bei Laständerungen (Wendt, 2005). Der Flüssiganteil der Sprudelschicht ε^L korrigiert den Flüssig-Holdup. Der Dampf-Holdup wird für alle Bilanzräume $j \in \{1, \dots, 30\}$ aufgrund seiner verhältnismäßig geringen Dichte vernachlässigt. Der Druckverlust über einen Boden ergibt sich aus dem trockenen $\Delta \mathbf{p}_j^{trock}$ und dem hydrostatischen Anteil $\Delta \mathbf{p}_j^{stat}$. Der trockene Druckverlust ist eine Funktion der Dampfgeschwindigkeit beim Durchtritt durch die geschlitzten Glockböden $\mathbf{w}_j^{V,Glocke}$. Er kann durch Anpassen des Widerstandsbeiwertes ξ_w beeinflusst werden. Der hydrostatische Druckverlust ist eine Funktion der Flüssigkeitshöhe und des Blasenanteils ε^L . Für die Phasengleichgewichtsberechnung $\mathbf{K}_{i,j} = \mathbf{y}_{i,j} / \mathbf{x}_{i,j}$ wird die Dampfphase als ideales Gas betrachtet, während die Flüssigphase mit Aktivitätskoeffizienten modelliert wird (siehe Anhang 9.3). Für die Berücksichtigung nichtidealer Zustände auf den Böden wird die Gleichgewichtsbeziehung um den Bodenwirkungsgrad nach Murphrey $\eta_j = (\mathbf{y}_{i,j} - \mathbf{y}_{i,j+1}) / (\mathbf{y}_{i,j}^* - \mathbf{y}_{i,j+1})$ erweitert. Schliesslich gelten die Summenbeziehungen für die Konzentrationen der Flüssig- und Dampfphase³.

Sumpfmmodell: Der Sumpf wird analog zu den Stufen modelliert. Durch die Definition des Bodenwirkungsgrades ist hier keine Verwendung von η möglich. Der Naturumlaufverdampfer ist aus Sicherheitsgründen immer befüllt, mit $V_{stat}^{Sumpf} = 12 \text{ ltr}$ (siehe auch Abb. 4.2 rechts). Der Füllstand $l_{\%}^{Sumpf}$ des darüberliegenden restlichen Volumens des Kolonnensumpfes, mit $V_{var}^{Sumpf} = 6 \text{ ltr}$, wird als ideal geregelt angenommen. Der Sumpfdruck p_{30} wird an der Ober-

³Gleichgewichtsbedingungen und Summenbeziehungen beider Phasen bilden das Siede-/Taupunktmodell, welches für die Berechnung der Siede- und Taulinien verwendet werden kann.

fläche des Flüssig-Holdups definiert. Die elektrische Heizleistung $\dot{Q}^{Sumpf}$ wird direkt und ohne Wärmeverluste berücksichtigt.

Für das in 4.1 und 4.2 beschriebene Kolonnenmodell resultiert ein DAE-System mit 270 Zustandsgrößen und folgenden zu definierenden Entscheidungsgrößen, Randbedingungen und Parametern:

- **Entscheidungsgrößen:** Heizleistung $\dot{Q}^{Sumpf}$, Rücklaufverhältnis R^4 , Feedboden $j = [2 : 1 : 29]$, Kondensatorfüllstand $l_{\%}^{Kond}$, Kühlwassermengenstrom F^{KW} , Füllstand Sumpf $l_{\%}^{Sumpf5}$
- **Randbedingungen:** Feedmengenstrom F_j^{Feed} , Feedkonzentration $x_{i,j}^{Feed}$ und Feedtemperatur T^{Feed} mit $j = [2 : 1 : 29]$, Temperatur Kühlwassereintritt T_{ein}^{KW}
- **Modellparameter:** Bodewirkungsgrad η , Wärmedurchgangskoeffizienten im Kondensator k_{WU}^L und k_{WU}^V , Wärmekapazität des Kondensators mc_p^{Wand} , Kühlwassereintrittstemperatur T_{ein}^{KW} , Widerstandsbeiwert ξ_w und der Blasenanteil ε^L der Stufen

Die verwendeten geometrischen Daten und die Stoffdatenberechnungen befinden sich im Anhang 9.3.

4.3 Theoretische Voruntersuchungen

4.3.1 Thermodynamische Eigenschaften von Acetonitril/Wasser

Das Dampf-Flüssig-Gleichgewicht $y_i = f(p, T, x_i)$ von Acetonitril/Wasser zeigt ein homogenes azeotropes (zwei-phasiges) Verhalten mit minimalem Siedepunkt (Abb. 4.3). Durch die Gleichheit der Konzentrationen in Flüssig- und Dampfphase am azeotropen Punkt ist die Trennung des Gemisches in Abhängigkeit der Feedkonzentration auf eine Siedelinse beschränkt. (Für den Betrieb links vom azeotropen Punkt wird im Sumpf das Wasser, rechts vom azeotropen Punkt Acetonitril, als Schwersieder, abgezogen.)

Im Bereich der Rektifikation werden für die vollständige Trennung azeotroper Gemische Maßnahmen ergriffen, die die Gemischeigenschaften, speziell die Lage des azeotropen Punktes, in positiver Weise beeinflussen. Die am Zweidruckkolonnensystem untersuchte Rektifikation auf wechselnden Druckniveaus (Forner, 2003; Repke et al., 2005) und der Einsatz von Hilfsstoffen zählen hier neben der Kombination von Kolonnen und Membrananlagen zu den am häufigsten eingesetzten Verfahren. Ausführliche Untersuchungen zur Trennung homoazeotroper Gemische finden sich in Hilmen (2000).

⁴Die installierte Rücklaufheizung (Rücklauftemperatur) wird nicht verwendet.

⁵Der Füllstand im Sumpf ist nur für den dynamischen Betrieb relevant.

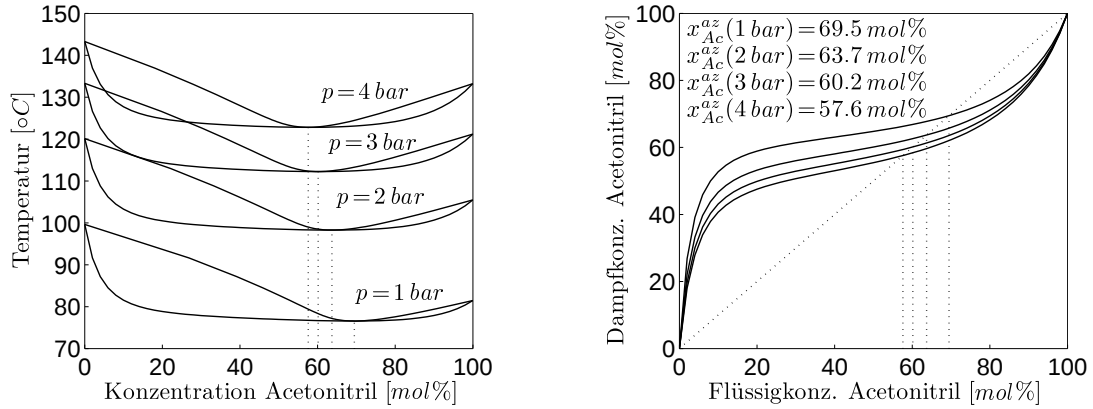


Abbildung 4.3: Dampf-Flüssig-Gleichgewichtsdaten für Acetonitril/Wasser

4.3.2 Der Betrieb mit minimalem Energieeinsatz

Der Betrieb von Destillationskolonnen ist mit einem hohen Energieeinsatz verbunden. Für den stationären Betrieb der Hochdruckkolonne bei gegebenem Feedboden und Feedbedingungen wird die Reinheit über das Rücklaufverhältnis und die Heizleistung eingestellt. Zusätzlich wird durch Vorgabe des Kühlwasserstroms und des Kondensatorfüllstandes Einfluss auf den Kopfdruck genommen. Der energie-minimale Betrieb in der rechten Siedelinse (Vgl. Abb. 4.3) wurde in Barz et al. (2006a) anhand des rigorosen Prozessmodells (Tab. 4.1 und 4.2) theoretisch untersucht. Dazu wurde der Feed, mit $F^{Feed} = 25 \text{ ltr/h}$ und $x^{Feed} = 76 \text{ mol\%}$ auf den 14. Boden festgelegt. Es wird folgendes Optimierungsproblem formuliert:

$$\begin{aligned} \min_{\dot{Q}^{Sumpf}, R, F^{KW}, I_{\%}^{Kond}} \quad & J = \dot{Q}^{Sumpf} \\ \text{so daß} \quad & \text{stationäre Modellgleichungen} \\ & x_{Ac}^{Kopf} \leq 62,5 \text{ mol\%} \\ & x_{Ac}^{Sumpf} \geq 99,5 \text{ mol\%} \\ & p^{Kopf} \leq 4 \text{ bar} \\ & T_{aus}^{KW} \leq 70^\circ \text{C} \end{aligned} \quad (4.1)$$

Die Produktspezifikationen und die sicherheitsrelevanten Grenzen des Kopfdruckes und der Kühlwasseraustrittstemperatur werden in den UNB berücksichtigt. Neben der Reinheitsforderung für das Sumpfprodukt ist auch die Kopfreinheit für die vollständige Trennung des azeotropen Gemisches entscheidend. Hier erleichtert die minimale Acetonitrilkonzentration im Kopf die Trennaufgabe in der Niederdruckkolonne. Am optimalen Betriebspunkt bzw. an der Lösung des Optimierungsproblems sind sowohl die Reinheitsanforderungen als auch die

maximalen Sicherheitsbeschränkungen aktiv (Barz et al., 2006a).

$$\left. \begin{array}{lcl} x_{Ac}^{Kopf} & \stackrel{!}{=} & 62,5 \text{ mol}\% \\ x_{Ac}^{Sumpf} & \stackrel{!}{=} & 99,5 \text{ mol}\% \\ p^{Kopf} & \stackrel{!}{=} & 4 \text{ bar} \\ T_{aus}^{KW} & \stackrel{!}{=} & 70^\circ C \end{array} \right\} \text{ optimaler Betriebspunkt} \quad (4.2)$$

Der Betrieb an den Grenzen der Produktspezifikationen entspricht dem minimalen Einsatz von Rücklauf und Heizleistung und damit der minimal notwendigen Trennleistung. Diese Strategie ist für alle Destillationsprozesse gültig. Der maximale Kopfdruck widerspricht zunächst der allgemeinen Tatsache, dass die Verringerung der relativen Flüchtigkeit $\alpha = [y_{Ac}/x_{Ac}]/[y_{Wa}/x_{Wa}]$, hervorgerufen durch eine Druckerhöhung, die Trennbarkeit eines Gemisches negativ beeinflusst (Halvorsen und Skogestad, 2000). Da rechts vom azeotropen Punkt $\alpha \leq 1$ ist, entspricht die Minimierung von α in diesem Fall einer Verbesserung der Trennaufgabe und damit einem geringeren Energieeinsatz. Für die Druckregelung wurde der Kühlwasserstrom F^{KW} und der Kondensatorfüllstand $l_{\%}^{Kond}$ minimiert. Damit werden hohe Kühlwasseraustrittstemperaturen T_{aus}^{KW} und minimale Aufenthaltszeiten des Kondensats im gefluteten Kondensator realisiert. Dies führt zur Minimierung der Kondensatunterkühlung und damit zu einem geringeren Energiebedarf durch eine höhere Rücklauftemperatur.

Für die robuste Betriebsführung unter Unsicherheiten ist eine Korrektur der optimalen nominalen Entscheidungen notwendig (Skogestad, 2004). Diese ist mit einem erhöhten Energieeinsatz verbunden, sichert aber die Einhaltung der Beschränkungen auch für Unsicherheiten im Prozessmodell. In Barz et al. (2007) wurden verlässliche Entscheidungen berechnet, die für einen minimalen zusätzlichen Energieeinsatz die Einhaltung der Beschränkungen für bekannte Modellunsicherheiten garantieren.

4.4 Praktische Aspekte des Kolonnenbetriebs

In der Standardarbeitsanweisung SOP der Zweidruckkolonne (2006) sowie (Sharma, 2007) finden sich Erläuterungen zur Stromführung, zum Inertisieren und dem An- und Abfahren der Kolonne. Die Hochdruckkolonne ist für den Betrieb von 1–5 bar, bei maximalen Temperaturen von 150°C ausgelegt. Im Rahmen dieser Arbeit wurde der Sollwert für den Kopfdruck zwischen 1–4 bar gewählt. (Bei 4,5 bar sprechen erste Sicherheitseinrichtungen an.) Der Feed wurde elektrisch vorgeheizt ($T^{Feed} = 70^\circ C$). Die maximale Heizleistung im Sumpf der Kolonne (WE 101) beträgt $\dot{Q}_{KW} = 28,37 \text{ KW}$. Für die Ansteuerung in % ist die lineare Beziehung in Gl. (4.3) gegeben (Wendt, 2005).

$$\dot{Q}_{Sumpf} = (\dot{Q}_{\%}^{Sumpf} \cdot 0,8435 + 8,05403) \frac{30,7}{100} \quad (4.3)$$

4.4.1 Automatisierung und Regelung

Die Anlage ist mit dem kommerziellen PLS Freelance 2000 ausgestattet. Als Simulations- und Optimierumgebung wird Matlab über die OPC Schnittstelle an das Leitsystem angebunden. Es werden folgende Größen geregelt (Abb. 4.4): Feedtemperatur durch separate Feedvorheizung, Feedmengenstrom, Füllstandsregelung im Sumpf mit Sumpfproduktstrom, Füllstandsregelung im Kondensator mit Destillatstrom, Rücklaufverhältnis in Abhängigkeit des Destillatstromes mit dem Rücklaufstrom, Kopfdruck mit dem Kühlwasserstrom. Die verwendeten Reglerparameter sind in Satriadarma (2007) aufgeführt. Da keine *online*-Analytik

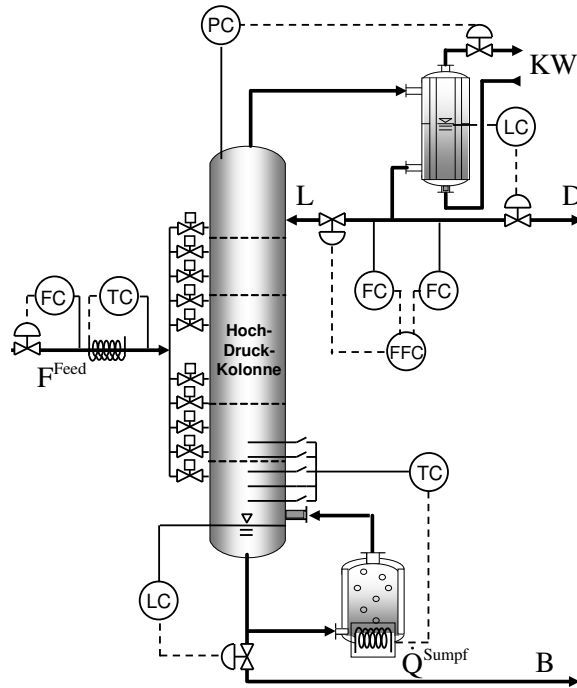


Abbildung 4.4: Basisautomatisierung der Hochdruckkolonne

für die Messung der Produktkonzentrationen vorhanden ist, wird auf Alternativen zur direkten Konzentrationsregelung zurückgegriffen. Das Temperaturprofil über die Böden repräsentiert den Konzentrationsverlauf in Abhängigkeit der Betriebsbedingungen und damit die Produktreinheiten (Wozny et al., 1989). Anhand von Simulationsstudien und experimentellen Untersuchungen lässt sich zeigen, dass das Temperaturprofil im Abtriebsteil relativ große Änderung durchläuft. Dies gilt sowohl für den Betrieb links als auch rechts vom azeotropen Punkt. Der Bereich größter Änderungen ist durch die maximale relative Flüchtigkeit $\alpha = [y_{Ac}/x_{Ac}]/[y_{Wa}/x_{Wa}]$ (siehe auch Abb. 4.3) und den maximalen Stoffaustausch gekennzeichnet. Er weist die höchste Temperaturänderung $|T_j^L - T_{j+1}^L|$ von Stufe zu Stufe auf und ist damit besonders sensitiv gegenüber Störungen. Es resultiert eine Temperaturfront, im Folgenden T^{sens} . Für die Stabilisierung des Sumpfproduktes bietet sich daher eine indirekte

Konzentrationsregelung durch die Regelung des Temperaturprofils (bzw. der vertikalen Höhe des sensitiven Temperaturbereiches) an. Abbildung 4.5 links zeigt die dynamische Entwicklung des Temperaturprofils für eine Verminderung des Feedmengenstroms⁶.

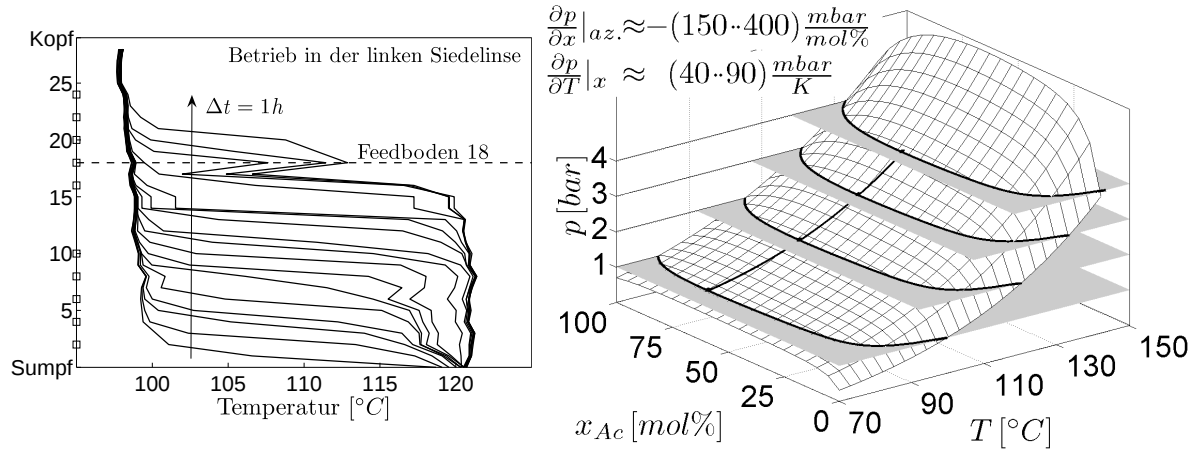


Abbildung 4.5: **links:** experimentelle Ergebnisse für die dynamische Entwicklung des Temperaturprofils aus dem stationären Zustand bei einer Halbierung des Feedstromes $F^{Feed} = 20 \rightarrow 10 \text{ ltr/h}$ sowie mit konstanter Heizleistung $\dot{Q}_{\%}^{Sumpf} = 19,3\%$ und konstantem Rücklaufverhältnis $R=1$ im Laufe von $t=1 \text{ h}$ (der stationäre Zustand wird noch nicht erreicht); **rechts:** Lage der Siedelinien und des Azeotrops in Abhängigkeit des Druckes

Der Sollwert der Temperatur ist druckabhängig und wird auf $T_{soll}^{sens}(2 \text{ bar}) = 110^\circ\text{C}$ festgelegt. Die Stellgröße ist die Heizleistung $\dot{Q}_{\%}^{Sumpf}$. Die maximalen Schwankungen um den Sollwert sollten $\pm 7 \text{ K}$ nicht überschreiten, da die Regelgröße Temperatur für größere Abweichungen die thermodynamischen Grenzwerte von 99°C und 121°C (für den Betrieb bei 2 bar) annimmt (siehe Abb. 4.5 links). Damit wird die Verstärkung des Streckenmodells stark nichtlinear. Für die hochreine Trennung ist eine Regelung von T_{soll}^{sens} auf dem 3.-ten Boden ausreichend (siehe auch Kap. 6). Für die Stabilisierung der Kopfkonzentration sind die Sensitivitäten für eine indirekte Regelung zu gering. Diese wird durch die Vorgabe des Rücklaufverhältnisses als *feed-forward*-Regelung eingestellt.

Die Güte der Druckregelung hat einen entscheidenden Einfluss auf die Regelung des Temperaturprofils (Soley, 2001). In dieser Arbeit hat die maximale Schwankungsbreite des Druckes $\pm 40 \text{ mbar}$ nicht überstiegen. Abbildung 4.5 zeigt, dass die resultierende Auswirkung auf die Lage des Temperaturprofils gering und daher keine Druckkompensation von T_{soll}^{sens} notwendig ist. Ebenso ist der Einfluss des Druckes auf die Konzentration am azeotropen Punkt und damit die maximal mögliche Trennleistung zu berücksichtigen. Auch hier sind die Druckschwankungen im stationären Betrieb von geringer Relevanz.

⁶Im Rahmen dieser Arbeit wurden die experimentellen Untersuchungen zur Konzentrationsregelung für den Betrieb links vom azeotropen Punkt durchgeführt.

4.4.2 Druckregelung

Der Kopfdruck ist eine wichtige Regelgröße, da Druckschwankungen sich praktisch verzögerungsfrei bis in den Sumpf fortsetzen und spontanes Verdampfen und Kondensieren verursachen. Druckschwankungen verursachen schwankende Flüssig- und Dampfströme, haben daher einen negativen Einfluss auf alle weiteren Regelkreise (Füllstand, Temperaturregelung) und können das Fluten der Kolonne verursachen. Eine Klassifikation industriell angewandter Druckregelungsstrategien findet sich in Sloley (2001). Allgemein wird der Druck im Kondensator geregelt. Für Kolonnen mit Teilkondensator (Dephlegmator) wird die Druckregelung durch die direkte Beeinflussung des Dampfmassenstroms realisiert. Hierzu zählt das Drosseln des Dampfstromes, die direkte Manipulation von Apparaten, die den Dampf evakuieren (Vakuumkolonnen) bzw. die Zugabe von Inertgasen. Für Totalkondensatoren erfolgt die Druckregelung durch Beeinflussung des Wärmestroms auf der Prozess- bzw. Kühlwasserseite des Kondensators.

Bereits zu Beginn der Arbeiten im praktischen Betrieb zeigte sich, dass der Kondensator der Hochdruckkolonne für die gewählte Trennaufgabe überdimensioniert war. Hohe Drucke wurden nur während des Anfahrvorganges erreicht und konnten stationär nicht gehalten werden. Daher musste eine Lösung für die Reduktion der Kühlleistung gefunden werden mit dem Ziel, die Kondensation des Dampfes bei höheren Temperaturen und damit höheren Drucken zu realisieren. Im stationären Fall stellt sich die Kondensationstemperatur so ein, dass der abgegebene Wärmestrom der Kondensationswärme entspricht. Dies geben die in Kapitel 4.2 hergeleiteten Modellgleichungen wieder.

$$\dot{Q}_{WU}^V = k_{WU}^V \cdot \left(1 - l_{\%}^{Kond}\right) A_{WU}^{Kond} \cdot (T_j^V - T_{MW}^{KW}) = V_{j+1} \cdot \tilde{h}_{j+1}^{LV}(T_j^V) \quad (4.4)$$

Modifikation des Kondensatorbetriebs: Es ergeben sich zwei Varianten. Die Änderung der Wärmeübertragungsfläche und die Beeinflussung des Temperaturgefälles. Die Verringerung der Wärmeübertragungsfläche durch Verschließen einzelner Rohre des Kondensators oder gar seinen Austausch wurde wegen des hohen technischen Aufwandes nicht weiter verfolgt. Weiterhin sollte die Versuchsanlage vielfältig einsetzbar bleiben. Da es sich um einen gefluteten Kondensator mit regelbarem Kondensatfüllstand handelt (Abb. 4.2), wird durch die Wahl des Füllstandes die prozesseitig zur Verfügung stehende Wärmeübertragungsfläche eingestellt. Hier konnte auch für den nahezu vollständig gefluteten Kondensator kein zufriedenstellendes Ergebnis erreicht werden. Grundsätzlich kann die mittlere treibende Temperaturdifferenz durch die Stromführung im Kondensator (Gleich-/Gegenstrom), die Eintrittstemperatur des Kühlwassers und den Kühlwassermengenstrom beeinflusst werden. Der Wechsel zum Gleichstrombetrieb hat hier den unerwünschten Nebeneffekt, dass das Kühlwasser vor dem Eintritt in die Kondensationszone nicht mehr durch die sensible Wärme des Kondensats vorgewärmt wird. Daher ist der Effekt eines Wechsels schwer abzuschätzen.

Folgende in Abbildung 4.6 aufgeführten Varianten zur Verringerung des Temperaturgefälles wurden näher betrachtet. Durch die stoffliche bzw. energetische Rückführung der vom Kühl-

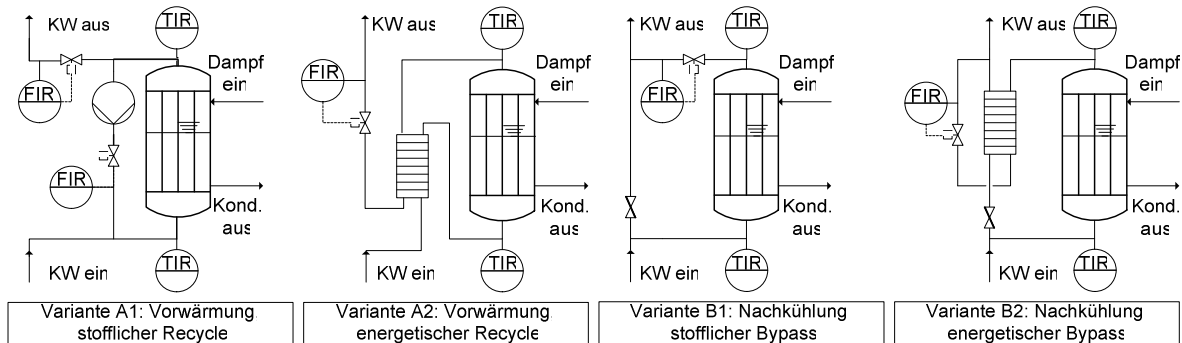


Abbildung 4.6: Varianten für die Modifikation des Totalkondensators, B2 wurde umgesetzt

wasser aufgenommenen Wärme (A-Varianten) wird das Kühlwasser vorgewärmt. Variante A2 (Anschaffung eines Wärmetauschers) ist kostengünstiger als die Variante A1 (zusätzliche Pumpe und Durchflussregelung für die Rückführung).

Die B-Varianten basieren auf der Reduktion des Kühlwassermengenstromes mit dem Ziel, hohe Austrittstemperaturen ($T_{aus}^{KW} \geq 100^\circ C$) zu realisieren. Vor dem Kühlwasserablauf ist das Kühlwasser auf seine maximal zulässige Temperatur herunterzukühlen⁷. Dafür ist in den B-Varianten ein stofflicher bzw. energetischer Bypass vorgesehen. Variante B1 hat zwei entscheidende Nachteile. Erstens besteht die Gefahr der Kavitation hinter dem Stellventil am Kondensatorausgang. Zweitens ist das bestehende Stellventil nicht für hohe Temperaturen ausgelegt. Die Anschaffung eines Wärmetauschers (Variante B2) ist kostengünstiger und erlaubt die Nutzung des vorhandenen Stellventils. Im Anhang 9.4.1 wird gezeigt, dass für Variante A2 die Wahl der Leistung des Wärmetauschers eine entscheidende Rolle spielt. Für den zu klein ausgelegten Wärmetauscher wird das Kühlwasser zu gering, für den zu groß ausgelegten Wärmetauscher zu stark vorgewärmt. Für die korrekte Auslegung ist sowohl die abzuführende Kondensationswärme als auch der minimale und maximale Kühlmengenstrom zu berücksichtigen. Es resultiert ein eingeschränkter Betriebsbereich. Weiterhin hat die Rückführung in Variante A2 einen negativen Einfluss auf die Dynamik der Regelstrecke $F^{KW} \rightarrow p^{Kond}$.

Realisierung von Variante B2: Aus den obengenannten Gründen wurde Variante B2 umgesetzt. Die notwendigen Umbaumaßnahmen wurden im Rahmen der Masterarbeit Sygnarowicz (2006) durchgeführt. Die wichtigsten Ergebnisse finden sich im Anhang 9.4.2. Der Bypass-Strom wird optimalerweise so eingestellt, dass das Kühlwasser mit maximaler Temperatur in den Ablauf eintritt. Dies ist positiv hinsichtlich des minimalen Kühlwasserverbrauchs zu bewerten. Negativ fällt das schnellere *fouling* des Wärmetauschers bei hohen Temperaturen

⁷Die maximale Kühlwassertemperatur (für den bekannten Kühlwasservordruck!) wurde auf $T_{aus}^{KW} = 120^\circ C$ festgelegt (siehe Anhang 9.4.2)

ins Gewicht (Sloley, 2001). Der Betrieb mit Variante B2 ist in Abbildung 4.7 dargestellt. Der Druck p^{Kond} wird mit dem Kühlwasserstrom F^{KW} auf den Sollwert 2 bar geregelt. Die

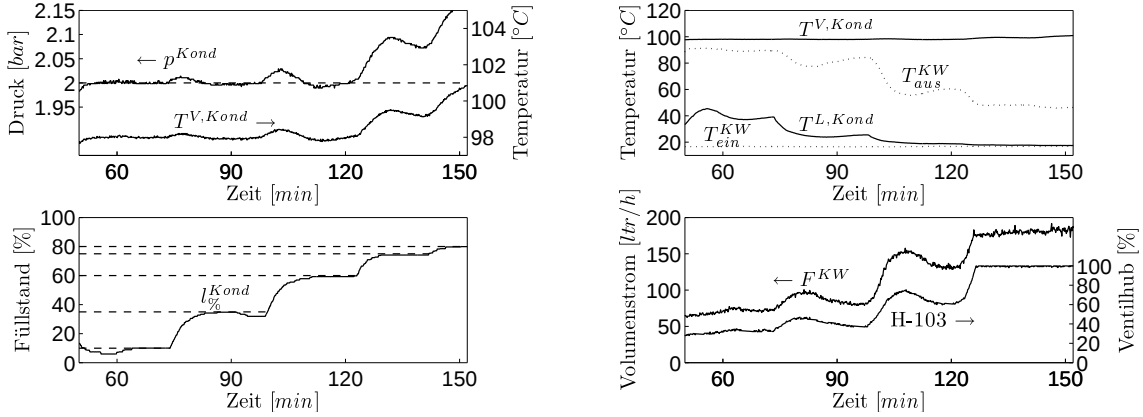


Abbildung 4.7: Druckregelung mit dem Kühlwasserstrom F^{KW} für verschiedene Füllstände $l_{\%}^{Kond}$

Stellgröße ist der Ventilhub H103.

- Allgemein verhalten sich der Druck p^{Kond} und die gemessene Dampftemperatur $T^{V,Kond}$ analog. Daher kann die Dampftemperatur der druckbestimmenden Kondensationstemperatur gleichgesetzt werden.
- Der Druck lässt sich sowohl über den Kühlwasserstrom F^{KW} als auch über den Kondensatfüllstand $l_{\%}^{Kond}$ beeinflussen (Mehrgrößensystem). Niedrige Füllstände lassen sich durch geringe Kühlwasserströme F^{KW} mit hohen Austrittstemperaturen T_{aus}^{KW} kompensieren (Abb. 4.7). Der Einfluss heftiger Füllstandsänderungen auf den Kopfdruck macht sich auch im geregelten Fall bemerkbar (bei 70 und 100 min). Die Druckregelung mit Hilfe des Füllstandes ist jedoch nicht wünschenswert, da dafür der abgezogene Kondensatstrom (Summe aus Destillat- und Rücklaufstrom) manipuliert werden muss.
- Für die Regelung sind die minimalen und maximalen Beschränkungen des Füllstands und des Kühlwasserstroms zu berücksichtigen. Abbildung 4.7 zeigt ein Szenario, in dem für einen Füllstand $l_{\%}^{Kond} \geq 75\%$ der Druck auch mit dem maximalen Kühlwasserstrom nicht mehr gehalten werden kann⁸.
- Schließlich verlängern hohe Füllstände die mittlere Aufenthaltszeit des Kondensats und erhöhen damit dessen Unterkühlung. Die Kondensattemperatur T_L^{Kond} kann dabei bis auf die Kühlwassereintrittstemperatur absinken (Abb. 4.7).

⁸Der Grenzwert $l_{\%}^{Kond} = 75\%$ ist keine konstante Größe. Er hängt von der jeweiligen Heizleistung bzw. der abzuführenden Wärmemenge ab.

4.4.3 Anfahren

Anfahrstrategien von Kolonnen haben die Verkürzung der Zeit zum Erreichen der Produktspezifikationen in Kopf und Sumpf zum Ziel. Sie basieren auf der Wahl von Heizleistung und Rücklauf. Allgemein wird zwischen der konventionellen Strategie (mit konstanten stationären Stellgrößen), dem Anfahren mit totalem Rücklauf und der modifizierten Anfahrstrategie (mit vollständiger Destillatabnahme zu Beginn) unterschieden (Löwe et al., 2000). Die Strategie des totalen Rücklaufs weist für Boden- und Packungskolonnen den geringsten Vorteil auf. Für das Anfahren der in dieser Arbeit genutzten Kolonne ermittelt Löwe et al. (2000) die besten Ergebnisse mit dem modifizierten Ansatz bzw. einem durch numerische Optimierung ermittelten Ansatz, der auf dem „Anfahren mit maximalen Stellgrößen“ basiert. Für beide Strategien sind Umschaltzeitpunkte für den Wechsel zu den stationären Betriebsparametern zu wählen.

Für die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Versuche lag die Feedkonzentration nahe dem azeotropen Punkt, so dass der Hauptanteil der Produktströme über den Kopf abgeführt wird. (Die Kolonne wird als Abtriebskolonne betrieben.)⁹ Das Aufkonzentrieren des Sumpfes ist damit der geschwindigkeitsbestimmende Schritt beim Anfahren. Nachteilig ist die Tatsache, dass der Sumpfteil im Naturumlaufverdampfer $V_{stat}^{Sumpf} = 12 \text{ ltr}$ immer befüllt sein muss. Zusammen mit dem regelbaren Kolonnensumpf $(l_{\%}^{Sumpf} V_{var}^{Sumpf})|_{max} = 6 \text{ ltr}$ ist der Sumpf-*Holdup* relativ groß im Verhältnis zur Flüssiglast der Kolonne.

Der Naturumlauf bzw. seine Strömungsverhältnisse, reagieren sehr sensibel auf Änderungen der Heizleistung, was zu Instabilitäten führt und sich in starkem Aufwallen bzw. Schwankungen bemerkbar macht. Wird der sicherheitsrelevante Mindestfüllstand von $l_{\%}^{Sumpf} = 20\%$ unterschritten, wird die Sumpfheizung automatisch abgeschaltet, um das Leerkochen zu verhindern. Neben der Beschränkung der Änderungen der Heizleistung ergibt sich ihr Maximalwert aus dem maximalen Kondensatstrom, der über den Rücklauf bzw. das Destillat, abgeführt werden kann. Der maximal einstellbare Volumenstrom liegt für beide Regelstrecken bei 80 ltr/h . Kann der kondensierende Dampf nicht abgeführt werden, läuft der Kondensator voll und der Druck der Kolonne steigt unkontrolliert.

In Abbildung 4.8 ist das Anfahren bis zur Stabilisierung des gewünschten Betriebspunktes dargestellt und in zeitliche Abschnitte (a-f) gegliedert. Die Füllstände und der Kopfdruck werden geregelt, während die Heizleistung, das Rücklaufverhältnis und der Feedmengenstrom manuell vorgegeben werden. Abschnitt a zeigt das Aufsteigen des Dampfgemisches aus dem Sumpf bis in den Kolonnenkopf. Am Ende von Abschnitt b wird der Solldruck von 2 bar am Kolonnenkopf erreicht. Abschnitt c ist die Zeit zum Aufkonzentrieren des Sumpfes bis etwa $99 \text{ mol}\%$. Hier besitzen die Sumpfheizung, das Rücklaufverhältnis und der Feedstrom ihren Maximalwert. Ziel ist es durch eine Maximierung der Ströme den maximalen Stoffaus-

⁹Das gilt sowohl für den Betrieb in der linken und rechten Siedelinse, da die Azeotropenkonzentration für beide Fälle den Leichtsieder darstellt.

tausch im Sumpf zu realisieren. In Abschnitt d ist der Sumpf aufkonzentriert. Der Regler zur Stabilisierung des Temperaturprofils im Abtriebsteil wird in Betrieb genommen. Die Kolonne wird im überlasteten Bereich betrieben. Es erfolgt eine Verringerung des Feedstroms von $20 \rightarrow 11 \rightarrow 8 \text{ ltr/h}$ im Abschnitt e und f. Während im Abschnitt e der Druckverlust nur gering sinkt, wird im Abschnitt f der überschüssige Flüssigkeitsinhalt über den Zeitraum von 2 h mit dem Destillatstrom ausgetrieben. Als Folge sinken der Druckverlust und die Heizleistung und die Kolonne erreicht einen Betriebspunkt innerhalb der Belastungsgrenzen (weitere Untersuchungen zum Belastungsbereich siehe unten).

Es wird deutlich, dass für das zeitoptimale Erreichen des Betriebspunktes f sowohl das Aufkonzentrieren des Sumpfes als auch die Vermeidung des Betriebs im überlasteten Bereich entscheidend sind. Beide Aspekte lassen sich (in entgegengesetzter Weise) über die Flüssigbelastung der Kolonne beeinflussen. Minimale Anfahrzeiten (bis Abschnitt f) mit $6 - 7 \text{ h}$ wurden für konstante Feedmengenströme von 17 ltr/h , Heizleistungen von $16 - 18 \%$ und einem Rücklaufverhältnis von $0.7 - 1$ realisiert. Die Beschleunigung des Anfahrens durch eine Produktvorlage im Sumpf ist hier nicht praktikabel, da die maximale Betriebszeit von 14 h (entsprechend der Technikumsvorschriften) für die Produktion der Vorlage nicht ausreicht.

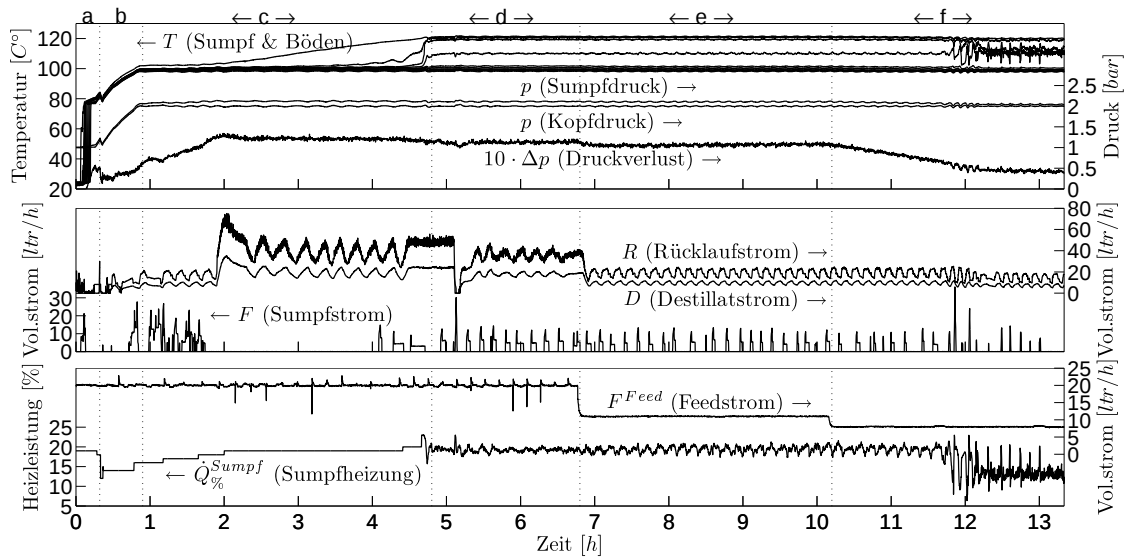


Abbildung 4.8: Anfahren der Hochdruckkolonne und Einstellen des Betriebspunktes (dargestellte Bodentemperaturen T_j , mit $j = [1 : 1 : 5, 8 : 4 : 28]$ vom Sumpf gezählt), Rücklaufverhältnis $R = 2$

4.4.4 Stabilisierung des dynamischen Betriebs, Stabilisierung des Rücklaufstroms

Der Einfluss eines schwankenden Rücklaufstroms auf die Regelgüte des Temperaturprofils gewinnt mit geringer werdender Belastung der Kolonne ($\Delta p \leq 90 \text{ mbar}$) zunehmend an Bedeutung (Abb. 4.8). Dies ist darauf zurückzuführen, dass sich die schwankende Flüssigbelastung

nur für geringe Turbulenzen bis in den Abtriebsteil fortsetzen können. Als grober Anhaltswert kann für die Verzögerungszeit, die zwischen der Erhöhung des Rücklaufstroms und der resultierenden Störung im Kolonnensumpf liegt, 6 min angenommen werden (Satriadarma, 2007). Im Bereich der sensitiven Temperatur existieren große Temperaturunterschiede auf benachbarten Böden (Abb. 4.5 links). Kurzschlußströme, hervorgerufen durch schwankende Flüssig- bzw. Dampflasten, verursachen daher starke Temperatureinbrüche bzw. -anstiege. Wird die Temperaturfront im Abtriebsteil geregelt, entsteht so ein schwingendes Verhalten (siehe Abb. 4.9, links).

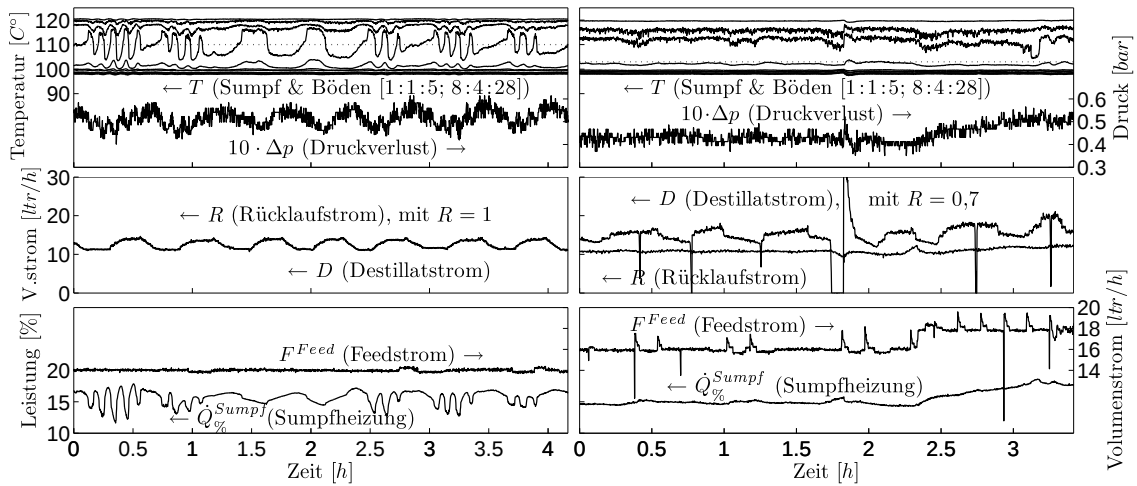


Abbildung 4.9: Regelung des Temperaturprofils im Abtriebsteil im mäßig belasteten Betriebsbereich: **links**: Temperatureinbrüche, hervorgerufen durch schwankenden Rücklaufstrom, ($T^{soll} = 110^\circ\text{C}$); **rechts**: verbesserter Betrieb mit gefiltertem Rücklaufstrom sowie korrigiertem Sollwert ($T^{soll} = 103^\circ\text{C}$) und Feedsprung 16 $\rightarrow$ 18 ltr/h

Die Verhältnisregelung des Rücklaufs sowie die Füllstandsregelung im gefluteten Kondensator lassen sich als Kaskadenregelung interpretieren (siehe auch Abb. 4.4). Der innere Regelkreis dient der Einstellung des Rücklaufstromes in Abhängigkeit des Destillatstromes, $L \rightarrow D$. Mit der Summe aus Destillat- und Rücklaufstrom wird der Kondensatorfüllstand geregelt, $(L + D) \rightarrow l_{\%}^{Kond}$. Um die Füllstandsregelung vom Rücklaufstrom zu entkoppeln, wurde der Sollwert des Rücklaufstrom stark gefiltert. Damit wird die Temperaturregelung auf dem sensitiven Boden von Störungen befreit (Siehe Abbildung 4.9, rechts). Zusätzlich wurde hier der Sollwert auf $T^{soll} = 103^\circ\text{C}$ gesetzt, um das plötzliche Absinken der Temperaturen abzuschwächen.

Problematisch ist hier die Tatsache, dass die Güte der Füllstandsregelung die Druckregelung beeinflusst (Sloley, 2001). Damit sind Schwankungen der Summe von Destillat- und Rücklaufstrom nicht zu vermeiden. Eine optimale Lösung, im Sinne der Minimierung der Schwankungen des Drucks sowie der Summe von Destillat- und Kondensatstrom kann durch die Berücksichtigung des Mehrgrößencharakters des Systems unter Einbeziehung aller Stell- und Regelgrößen erreicht werden.

4.5 Experimentelle Untersuchungen zum stationären Betrieb und Modellvalidierung

Für den stationären Betrieb sind vor allem die Belastungsgrenzen der Kolonne, in denen die Trennaufgabe noch bewältigt werden kann, die Einhaltung der Produktkonzentrationen und der dafür notwendige Energieeinsatz relevant. Durch den Einsatz von Parameterschätzmethoden können Zustandsgrößen und Modellparameter ermittelt werden, welche die Beurteilung des Betriebs unterstützen und Aussagen zur Ergebnisunsicherheit modellbasierter Prozessdaten ermöglichen (Kap. 3.2.3). Im Folgenden wird die Methode der *Maximum-Likelihood-Estimation* (MLE) für den stationären Kolonnenbetrieb eingesetzt (Kap. 3.3.7).

4.5.1 Modellanpassung und Parameterschätzung

Im Rahmen der experimentellen Untersuchungen wurden verschiedene stationäre Punkte für einen Kopfdruck von $p^{Kopf} = 2 \text{ bar}$ und Feedbedingungen von ca. $x_{Ac}^{Feed} = 45 \text{ mol \%}$ mit $T^{Feed} = 70^\circ \text{C}$ eingestellt. Der Feed wurde im oberen Teil der Kolonne zugeführt ($n^{Feed} = 18$), da seine Konzentration näher an der Kopfkonzentration lag. Die Sumpfreinheit wurde durch die Temperaturregelung auf dem dritten Boden $T_{soll}^{sens}(n^{soll} = 3)$ konstant gehalten. Die Analyse von Probenahmen des Sumpfproduktes bestätigt dies mit $x_{Ac}^{Sumpf} = 0.1 - 0.21 \text{ mol \%}$. Das Rücklaufverhältnis R und der Feedmengenstrom F^{Feed} wurden variiert. Die experimentell ermittelten Belastungsgrenzen wurden auf die direkt messbare Flüssigbelastung bezogen:

$$B_{fl}^{F+R} = F^{Feed} + R \quad (4.5)$$

Zusätzlich wurden die Parameter θ auf Basis des rigorosen Prozessmodells (Tab. 4.1 und 4.2) an die Messdaten angepasst. Das Kondensatormodell war nicht Teil des Parameterschätzproblems. Hier wurde ein vereinfachtes stationäres Prozessmodell genutzt (Tab. 4.3), welches die direkte Vorgabe des Kopfdruckes und der Kondensatunterkühlung erlaubt¹⁰.

Tabelle 4.3: Vereinfachtes stationäres Kondensatormodell der Hochdruckkolonne

Kondensatormodell, $j = [1]$:	
Komponentenbilanz:	$0 = V_{j+1} y_{i,j+1} - L_j(1 + \frac{1}{R})x_{i,j} ; \text{ für } i \in \{1\}$
Kopfdruck:	$p_j = p^{Kopf}$
Summenbeziehung:	$\sum_i x_{i,j} = 1 ; \text{ für } i \in \{1, 2\}$
Kondensatunterkühlung:	$T_j = T_{j+1} - \Delta T^{UK}$

¹⁰Zusammen mit der manipulierbaren Heizleistung und dem Rücklaufverhältnis ergibt sich der stationäre Freiheitsgrad wieder zu vier.

Das separat für jeden stationären Punkt zu lösende Optimierungsproblem ist in Gl. (4.6) formuliert. Betriebsdaten $\mathbf{u}$, die mit guter Genauigkeit implementiert bzw. gemessen werden können oder von geringerer Bedeutung für die Parameterschätzung sind, werden direkt im Optimierungsproblem berücksichtigt (Bsp.: Kopfdruck, Rücklaufverhältnis, Feedbedingungen und Kondensatunterkühlung). Dagegen werden die Volumenströme von Feed, Destillat und Sumpf bzw. die Sumpf- und Bodentemperaturen als Messgrößen $\mathbf{y}^{mess}$ mit der Genauigkeit $\mathbf{M}\mathbf{V}$ in die Zielfunktion Φ_{MLE} aufgenommen.

$$\begin{aligned}
 \min_{\boldsymbol{\theta}} \quad & \Phi_{MLE}(\boldsymbol{\theta}) = \frac{1}{2}(\mathbf{y}^{mess} - \mathbf{g}[\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}])^T \mathbf{M}\mathbf{V}^{-1}(\mathbf{y}^{mess} - \mathbf{g}[\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}]) \\
 \text{so dass} \quad & 0 = \mathbf{g}[\mathbf{x}, \mathbf{u}, \boldsymbol{\theta}] \\
 & \boldsymbol{\theta}_{min} \leq \boldsymbol{\theta} \leq \boldsymbol{\theta}_{max} \\
 & \mathbf{y}^{mess} = [\mathbf{T}_j, \mathbf{F}^{Feed}, \mathbf{F}^D, \mathbf{F}^{Sumpf}]^T, \quad \text{mit } j \in \{2, \dots, 30\} \\
 & \mathbf{M}\mathbf{V} = f(\sigma_T, \sigma_F), \quad \text{mit } \sigma_T = 0,25 \text{ K}, \sigma_F = 1 \text{ ltr/h} \\
 & \boldsymbol{\theta} = [\dot{Q}^{Sumpf}, \zeta_w, \eta^V, \eta^A, \mathbf{F}^{Feed}]^T \\
 & \mathbf{u} = [p^{Kopf}, R, T^{Feed}, x^{Feed}, \Delta T^{UK}]^T
 \end{aligned} \tag{4.6}$$

Nur aufwendig zu messende oder nur sehr ungenau gemessene Größen wie die Konzentrationen und der Sumpfdruck¹¹ ergeben sich als Ergebnis der Parameterschätzung aus den Modellgleichungen. Die stationären verrauschten Messdaten $\mathbf{y}^{mess}$ wurden durch Mittelwertbildung vorverarbeitet. Damit wird lediglich ein Messpunkt jedes Sensors für jeden stationären Zustand berücksichtigt und das Optimierungsproblem reduziert. Die Diagonal-Matrix der (unkorrelierten) Messgenauigkeiten $\mathbf{M}\mathbf{V}$ beschreibt daher Ungenauigkeiten in der Kalibrierung der Sensoren, nicht das Messrauschen. Anzupassende Betriebsgrößen und Parameter werden in $\boldsymbol{\theta}$ zusammengefasst.

Abbildung 4.10 zeigt den Vergleich von gemessenen Daten und durch die MLE geschätzten Größen. Die größten relativen Abweichungen ergeben sich für den Sumpfstrom im Bereich 0–7 ltr mit Abweichungen von bis zu 50%. Dies ist auf die absolute Angabe der Messunsicherheiten in (4.6) zurückzuführen. Auffallend ist, dass alle Abweichungen gerichtet sind (Feed und Destillat kleiner, Sumpf größer), was auf tatsächlich falsche Messwerte hinweist. Dies lässt sich durch eine falsche Parametrisierung der magnetisch-induktiven Durchflußmessgeräte im Bereich geringer Acetonitril-Konzentration begründen. Für die Temperaturen ergeben sich wesentlich geringere Abweichungen ohne klare Tendenzen.

In Abbildung 4.11 werden experimentelle und modellbasierte Ergebnisse (MLE) für den Druckverlust und die Sumpfheizung dargestellt. Für Betriebsbereiche $B_{fl}^{F+R} \geq 30 \text{ ltr/h}$ wird die Kolonne im überlasteten Bereich betrieben. Der Druckverlust steigt nur noch leicht mit

¹¹Wie sich im Laufe der Versuche herausstellte, war dieser schlecht kalibriert.

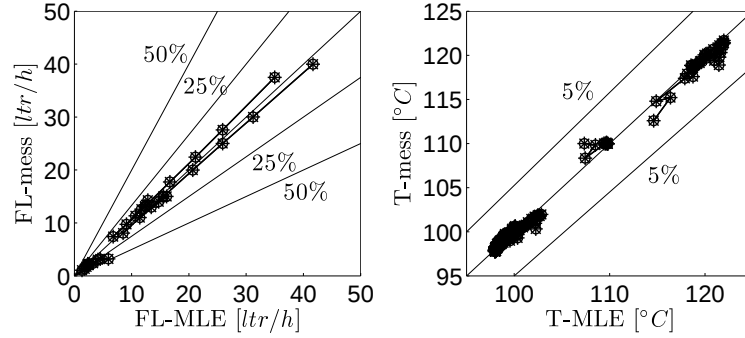


Abbildung 4.10: Vergleich der gemessenen Daten mit den durch die MLE ermittelten Daten (aller stationären Zustände)

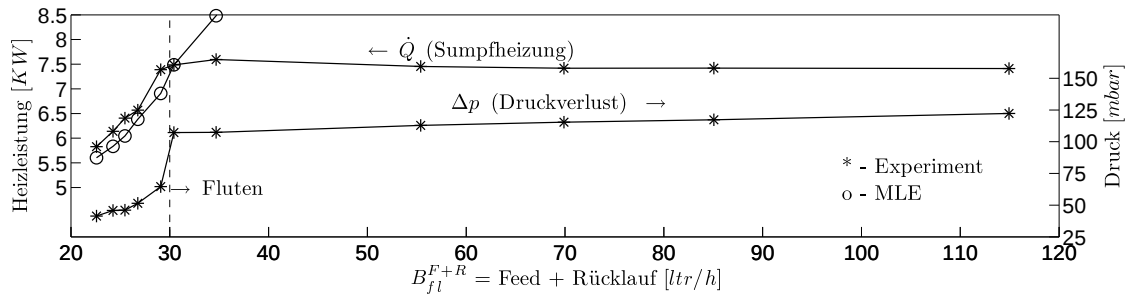


Abbildung 4.11: Aufzuwendende Heizleistung und Druckverlust für verschiedene Flüssig-Belastungen im stationären Fall, $p^{Kopf} = 2\text{bar}$, $T_{soll}^{sens}(n^{soll} = 3) = 110^\circ\text{C}$ (Die Temperaturfront im Abtriebsteil ist unveränderlich.)

der Belastung. Der Dampfstrom beginnt Flüssigkeit mitzureißen (Fluten). Als Folge wird ein Teil der Flüssigmenge ohne Verdampfung direkt zum Kondensator ausgetrieben. Die Heizleistung steigt daher nicht weiter an, sie sinkt sogar leicht ab, was sich durch die verminderte Trennleistung im Verstärkungsteil der Kolonne erklären lässt. Die Verringerung der Trennleistung wurde durch Analysen der Kopfkonzentration bestätigt. Diese fielen für den Bereich von $B = 30 \rightarrow 150 \text{ ltr/h}$ von $x_{Ac}^{Kopf} = 61 \rightarrow 54 \text{ mol\%}$ kontinuierlich ab. Die Temperaturfront im Abtriebsteil und damit auch die Sumpfreinheit bleiben stabil.

Unterhalb der Belastungsgrenze ($B_{fl}^{F+R} \leq 30 \text{ ltr/h}$) entspricht der lineare Verlauf der Heizleistung bzw. der quadratische Verlauf des Druckverlustes den Erwartungen. Aus der Differenz von gemessener und geschätzter Heizleistung kann der mittlere Wärmeverlust der Hochdruckkolonne abgeschätzt werden¹².

$$\Delta \dot{Q}^V = \dot{Q}^{\text{Exp}} - \dot{Q}^{\text{MLE}} \approx 0,31 \text{ KW} \quad (4.7)$$

In Abbildung 4.12 wird der Vergleich der experimentellen und modell-basierten Daten für die Temperaturen, Flüssigkonzentrationen sowie Dampf und Flüssigströme an der Belastungsgrenze $B_{fl}^{F+R} = 30 \text{ ltr/h}$ gezeigt. Die angepassten Temperaturen stimmen sehr gut mit den

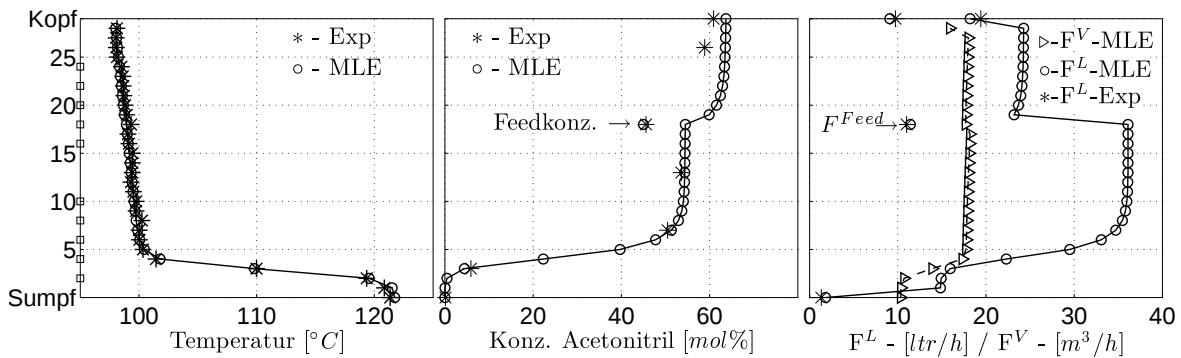


Abbildung 4.12: Ergebnisse der MLE im Vergleich zu den experimentellen Daten, Experiment bei $B_{fl}^{F+R} = 30 \text{ ltr/h}$, $R = 2$; Unsicherheiten exp. Daten entsprechend Gl. 4.6, bzw. für die Konzentrationen $\pm 0,5 \text{ mol\%}$

Messdaten überein (Vgl. Abb. 4.10). Für den Abtriebsteil mit einem stark ausgeprägten Temperaturprofil werden die Konzentrationen (Sumpf, Boden 3, 7 und 13) sehr gut vom Modell geschätzt. Im Verstärkungsteil (Boden 26 und Kopf) resultiert generell eine schlechte Übereinstimmung, da hier die Temperaturänderung fast ausschließlich vom Druckverlust über die Kolonne abhängt und keine Sensitivität gegenüber der Konzentration aufweist (Abb. 4.12).

Das Modell zeigt ebenfalls eine starke Änderung des Dampfstromes im Abtriebsteil, was auf die sehr unterschiedlichen Dampfdichten der Reinstoffe zurückzuführen ist ($\rho_{Ac}^V(110^\circ\text{C}) = 3,09 \text{ kg/m}^3$ und $\rho_{Wa}^V(110^\circ\text{C}) = 0,82 \text{ kg/m}^3$). Für die durchgeführten Experimente mit reinem

¹²Zum Vergleich: Wendt (2005) bestimmt für die Niederdruckkolonne $\Delta \dot{Q}^V$ zu $0,6 \text{ KW}$.

Wasser als Sumpfprodukt liegt daher die maximale Belastung im Bereich höherer Acetonitril-Konzentrationen. Für den Grenzfall lassen sich folgende Werte angeben (siehe auch Abb. 4.13 rechts):

$$\begin{aligned} B_{fl}^{F+R} &\approx 30 \text{ ltr/h} \\ \Delta p &\approx 100 \text{ mbar} \\ F_{max} = w_{max}^V \cdot \rho^V &\approx 0,65 \sqrt{N/m^2} \end{aligned} \quad (4.8)$$

Die Werte für B_{fl}^{F+R} und F^{Feed} liegen leicht unter denen für Methanol/Wasser ermittelten Werten. Hier wurden optimale Feedmengenströme für die hochreine Trennung mit $F^{Feed} = 14 - 30 \text{ ltr/h}$ (Bamberg, 2001) bzw. mit $F^{Feed} = 15 - 20 \text{ ltr/h}$ (Wendt, 2005) angegeben. Der ermittelte maximale F-Faktor liegt etwas unterhalb des allgemeingültigen Wertes für Bodenkolonnen, mit $F_{max} = 1 - 1,3$ (Wozny, 2007). Dies ist auf die Tatsache zurückzuführen, dass die am Zweidruck-Kolonnsystem installierten Flachglocken für den Laborbetrieb modifiziert wurden. Hier sind die schlitzförmigen Dampfdurchtrittsöffnungen teilweise verschlossen (Wendt, 2005). Damit wird der Betrieb zu geringeren Dampfbelastungen verschoben. Der sowohl in Wendt (2005) als auch in Bamberg (2001) angegebene maximale F-Faktor der Hochdruckkolonne von $F_{max} = 7,8 \sqrt{N/m^2}$ ist nicht wie in dieser Arbeit auf die Dampfleerrohrgeschwindigkeit sondern auf die Dampfgeschwindigkeit beim Durchtritt durch den freien Kolonnenquerschnitt eines Bodens bezogen und daher nicht vergleichbar.

Im Rahmen der gemachten Untersuchungen konnten gute Trennleistungen mit Feedströmen von $F^{Feed} \approx 14 - 17 \text{ ltr/h}$, einem Rücklaufverhältniss von $r \approx 0,5 - 1$ und Druckverlusten von $\Delta p \approx 50 - 80 \text{ mbar}$ erzielt werden. Wichtig ist, dass die Grenzen stark von den Gemischeigenschaften und damit von den Konzentrationen abhängen. Zusätzlich zum maximalen F-Faktor sind in Abbildung 4.13 auch die geschätzten Parameter η^A, η^V, ζ_w für alle stationären Zustände dargestellt.

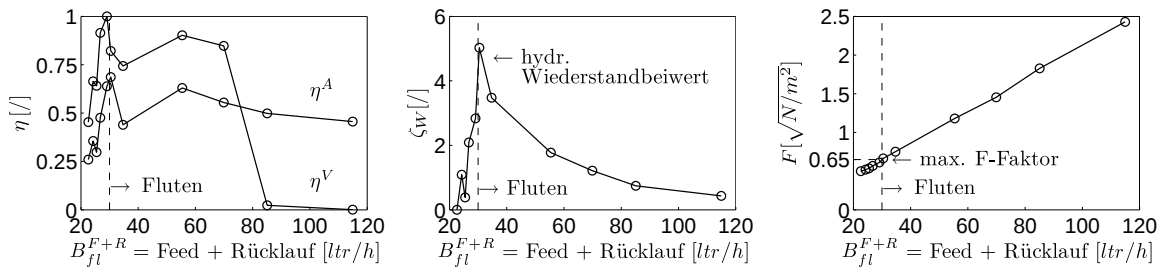


Abbildung 4.13: Geschätzte Modellparameter für alle stationären Zustände

Für die Bodenwirkungsgrade gilt auch hier, dass sie für den Abtriebsteil η^A wesentlich verlässlicher ermittelt werden können als im Verstärkungsteil η^V , wo die Sensitivitäten der Konzentrationen gegenüber dem Temperaturprofil zu gering ausfallen. Die übrigen Messinfor-

mationen können hier keinen wesentlichen Beitrag für die Verbesserung der Identifizierbarkeit von η^V liefern. Zusätzlich ist η^V aufgrund des linearen Abfalls des Temperaturprofils stark mit dem ζ_w -Wert korreliert. Für den Abtriebsteil werden Werte von $\eta^A = 0.26 - 0.69$ berechnet, während im optimalen Belastungsbereich der Wirkungsgrad $\eta^A \approx 0.5$ ist, was den Angaben von Bamberg (2001) mit $\eta^A = 0.45$ für Methanol/Wasser in der Hochdruckkolonne entspricht. Der Bereich bis zur Belastungsgrenze ist durch den Anstieg beider Wirkungsgrade gekennzeichnet, was auf die intensivere Mischung der Phasen zurückzuführen ist. Für steigende Belastungen bleibt η^A annähernd konstant. Wie schon erwähnt, ändert sich hier die Trennleistung wenig, während sich die Flüssigkeit im Verstärkungsteil aufgrund der höheren Dampfdichte zu stauen beginnt. Für sehr hohe Belastungen wird hier die Trennung verschlechtert und η^V sinkt bis auf seinen Grenzwert $\theta_{min}(\eta^V) = 0$ ab. Der ζ_w -Wert zeigt ein ähnliches Verhalten. Dieser sollte jedoch im Bereich bis $B_{fl}^{F+R} \leq 30 \text{ ltr/h}$ konstant sein, da die quadratische Zunahme des Druckverlustes für steigende Dampfströme im Modell (Tab. 4.1) explizit berücksichtigt wird. Folglich liegt hier eine strukturelle Unsicherheit (ungenügende Beschreibung des physikalischen Zusammenhanges durch die Modellgleichungen) vor, welche durch die starke Variation von ζ_w kompensiert wird.

An dieser Stelle soll darauf hingewiesen werden, dass der Bodenwirkungsgrad auch für die dynamische Anpassung des rigorosen Prozessmodells eine wichtige Rolle spielt. Durch den direkten Einfluss auf den Verlauf des Konzentrations- und Temperaturprofils beeinflusst er das Verstärkungsverhältnis für das Ein-/Ausgangssystem $\Delta\dot{Q}_{\%}^{Sumpf} / \Delta T^{sens}$. Dies äussert sich auch in unterschiedlichen Werten für die vertikale Verschiebung der Temperaturfront (über die Kolonnenhöhe), für konstante Sprunghöhen in $\dot{Q}_{\%}^{Sumpf}$ und variable η . In Satriadarma (2007) wurden im Rahmen erster Modellanpassungen an dynamische Sprungversuche wesentlich geringere Werte, mit $\eta^A \approx 0.2 - 0.3$ ermittelt. Der Blasenanteil ε^L war im Rahmen der statischen Modellanpassung aufgrund der hohen Korrelation mit dem ζ_w Wert nicht identifizierbar. Er tritt in der Berechnung des statischen Druckverlustes sowie des Flüssig-Holdups auf. Im dynamischen Fall weist die Zeitkonstante der oben erwähnten Sprungversuche eine hohe Sensitivität bezüglich des effektiven Holdups auf, so dass der Blasenanteil zu $\varepsilon^L = 0,25$ bestimmt werden konnte (Satriadarma, 2007). Tabelle 4.4 fasst die Ergebnisse zusammen.

Tabelle 4.4: Stationär und dynamisch ermittelte Modellparameter für den untersuchten Betriebsbereich

Parameter		stationär ermittelt	dynamisch ermittelt
η^V	[/]	0,45-1,0	/
η^A	[/]	0,26-0,69	0,2-0,3
ζ_w	[/]	0-5,0	/
ε	[/]	/	0,25
$\Delta\dot{Q}^V$	[KW]	0,31	/

4.5.2 Modellgüte und Ergebnisunsicherheiten modellbasierter Daten

Die Parameterkovarianzmatrix $\mathbf{PV}$ der geschätzten Größen für den stationären Zustand (Experiment bei $B_{fl}^{F+R} = 30 \text{ ltr/h}$, Abb. 4.12) ist in Gleichung (4.9) angegeben. Die Standardabweichung $\sigma(\theta)$ ergibt sich aus den Elementen auf der Hauptdiagonalen. Die Güte des Bodewirkungsgrades im Verstärkungsteil ist erwartungsgemäß sehr gering ($\sigma(\eta^V)$ ist relativ groß).

$$\mathbf{PV} = \begin{bmatrix} 0,075 & -0,090 & -0,863 & -0,000 & 0,097 \\ -0,090 & 0,132 & 0,226 & 0,001 & -0,133 \\ -0,863 & 0,226 & 73,972 & 0,039 & 0,183 \\ -0,000 & 0,001 & 0,039 & 0,001 & 0,000 \\ 0,097 & -0,133 & 0,183 & 0,000 & 0,151 \end{bmatrix}; \quad \begin{aligned} \sigma(\dot{Q}^{Sumpf}) &= 0,273 \text{ KW} \\ \sigma(\zeta_w) &= 0,364 \\ \sigma(\eta^V) &= 8,601 \\ \sigma(\eta^A) &= 0,027 \\ \sigma(F^{Feed}) &= 0,389 \text{ ltr/h} \end{aligned} \quad (4.9)$$

Der Einfluss auf die geschätzten Prozessgrößen lässt sich durch die Linearisierung der Modellgleichungen abschätzen. Die Varianz der approximierten Gaussverteilung der Ausgangsgrößen wird mit $\partial \mathbf{x} / \partial \boldsymbol{\theta} \cdot \mathbf{PV} \cdot (\partial \mathbf{x} / \partial \boldsymbol{\theta})^T$ berechnet. Abbildung 4.14 links zeigt die Ergebnisse für die Konzentrationen x_{Ac} für ausgewählte Böden. Die Güte des jeweiligen Ermittlungsergebnisses ist durch eine Punktwolke dargestellt. Diese wurde mit 150 Monte-Carlo-Samples erzeugt und zeigt die approximierte Gaussverteilung der Ausgangsgrößen. Rechts im Bild sind die ermit-

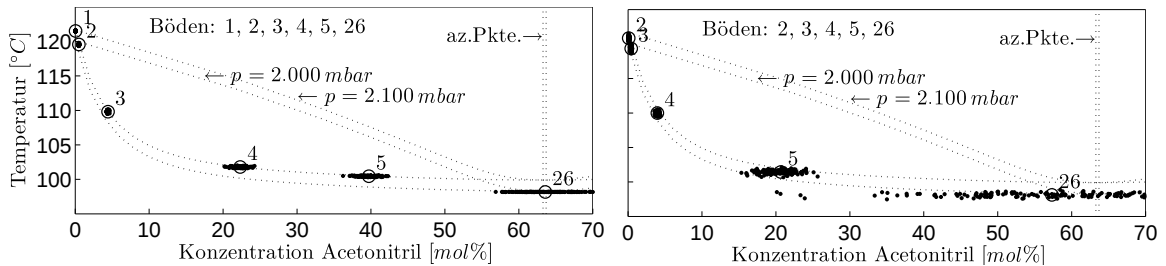


Abbildung 4.14: Ermittelte x_{Ac} Konzentrationen und Güte des Ermittlungsergebnisses dargestellt als Punktwolke, links: rigoroses Prozessmodell; rechts: Siede-/Taupunktsberechnung; die azeotropen Punkte gelten für Kopf- und Sumpfdruk

telten Konzentrationen und ihre Güte für eine Siede-/Taupunktsberechnung dargestellt. Hier ergeben sich die Konzentrationen durch die Simulation für gemessene Temperaturen und Drücke auf jedem Boden. Erfüllen die $\mathbf{T}_j$, $\mathbf{p}_j$ Wertepaare nicht die Modellgleichungen, können keine Konzentrationen ermittelt werden, da Meßungenauigkeiten nicht explizit berücksichtigt werden. Dies gilt vor allem für hohe Reinheiten und im Bereich des azeotropen Punktes. Für Abb. 4.14 rechts wurde daher der gemessene Druck manuell leicht angepasst. Er stellt hier im Gegensatz zum Schätzverfahren mit dem rigorosen Modell eine, wenn auch sehr geringe, Unsicherheit dar ($\sigma(\mathbf{p}_j) = 0,002 \text{ bar}$).

Die Ergebnissenauigkeit für alle Böden ist in Abbildung 4.15 als boxplot dargestellt. Die dargestellte Box vereint minimales und maximales Quartil, umfasst also das 50 % Konfiden-

zintervall. Aufgrund der Annahme einer Gauß'schen Verteilung bzw. der Linearisierung des Prozessmodells sind die Quartile symmetrisch um den Median angeordnet. Der Vergleich mit Abbildung 3.1 und 6.4 zeigt, dass unter Berücksichtigung der Nichtlinearitäten in den Modellgleichungen eine logarithmische Verteilung als Approximation besser geeignet ist, um die Ergebnisunsicherheit zu kennzeichnen. Erwartungsgemäß zeigt die Siede-/Taupunktsberechnung eine relativ höhere Ergebnisgenauigkeit. Es wird weiterhin deutlich, dass die Schätzung basierend auf dem rigorosen Modell stark von der Information über die Feedbedingungen profitiert, welche hier als bekannt vorausgesetzt wurden. Der relativ hohe Anteil flüssigen Feeds auf und unterhalb des Feedbodens hat einen positiven Effekt auf die Ergebnisgenauigkeit der Konzentration. Auffallend ist auch, dass für das rigorose Modell die Vorhersagegenauigkeit der Konzentrationen ausgehend vom Feed in Richtung Kopf ansteigt. Im Gegensatz zum einfachen Siede-/Taupunktsmodell sind hier die Abhängigkeiten der Konzentrationen auf den Böden explizit formuliert. Mit steigender Kolonnenhöhe steigt die Reinheit und damit die Wahrscheinlichkeit einer Konzentration in der Nähe des azeotropen Punktes.

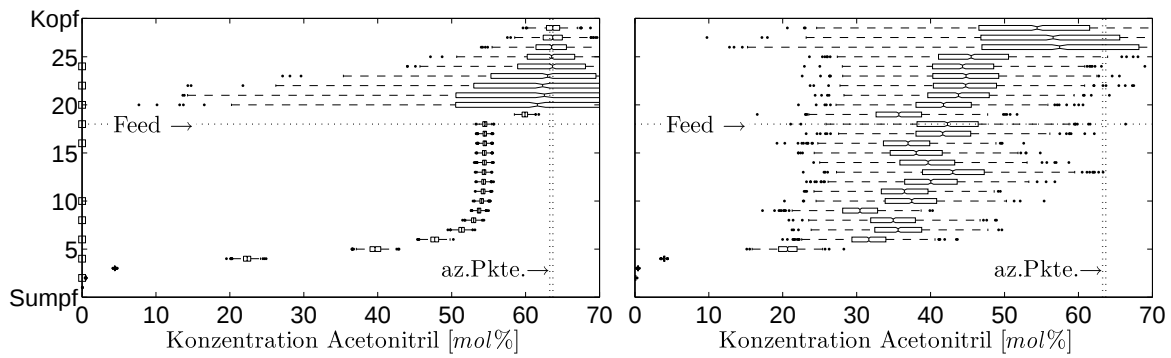


Abbildung 4.15: Ergebnisgenauigkeit der Konzentrationen x_{Ac} über die Böden, dargestellt als boxplot; **links**: rigoroses Prozessmodell; **rechts**: Siede-, Taupunktsberechnung; die azeotropen Punkte gelten für Kopf- und Sumpfdruck

5 Modellbasierte Regelung

Im Kapitel 4.4 wird die Modifikation des Kondensators der Hochdruckkolonne für die Druckregelung beschrieben. Der stabile Betrieb der Hochdruckkolonne ist damit für den Einsatz eines konventionellen PID-Reglers (Abb. 4.4) realisierbar. Dennoch unterliegt der Betrieb Einschränkungen hinsichtlich der minimalen und maximalen Kühlleistung im Kondensator, hervorgerufen durch den nicht berücksichtigten Kondensatfüllstand (Abb. 4.7). Weiterhin haben sowohl die Reglergüte des Drucks als auch des Füllstands entscheidenden Einfluß auf die Performanz des gesamten Automatisierungssystems (Abb. 4.9). Als Ergebnis ist die Prozessführung im Hinblick auf die sicherheitsrelevanten Aspekte sowie die starke Kopplung der Prozessgrößen weder zufriedenstellend noch trivial.

Aus den genannten Gründen wird eine modellgestützte Mehrgrößenregelung am Kondensator eingesetzt mit dem Ziel, den Betrieb zu optimieren. Grundlage ist die Modellierung der Wirkzusammenhänge der Prozessgrößen des Kondensators. Das bereits in Tabelle 4.1 beschriebene Kondensatormodell wird als Zustandsraummodell formuliert und stationär angepasst (Kap. 5.1-5.2). Im Rahmen der dynamischen Zustandsschätzung *online* werden die Voraussetzungen für die Ermittlung der Ergebnisunsicherheit modellbasierter Größen geschaffen und das Modell an den aktuellen Betriebspunkt angepasst (Kap. 5.3). In Kapitel 5.4 wird der Einsatz des Modells für die Regelung präsentiert.

5.1 Separate Modellierung des Kondensators für die modellbasierte Regelung

Durch die Formulierung der Modellgleichungen als Zustandsraummodell ist der in Kapitel 3.3.8 diskutierte Ansatz zur dynamischen Zustandsschätzung mit dem EKF direkt anwendbar. Die Bilanzräume sind in Abbildung 5.1 dargestellt. Analog zu Rix (1998) und wie bereits in Tabelle 4.1 dargestellt, wird hier auf die aufwendige Beschreibung des Kondensators durch ein ortsdiskretes Modell verzichtet. Der Vorgang der indirekten Kondensation an der gekühlten Rohroberfläche sowie die Kondensatunterkühlung sind damit stark vereinfacht. Als Folge gibt das Modell das Anlagenverhalten nicht über den gesamten Betriebsbereich wieder. Parameteranpassungen sind erforderlich (siehe unten).

Massenbilanz Prozessseite: Der Beitrag des Dampf-Holdups im Bilanzraum ① wird vernachlässigt. Der kondensierende Dampfmengenstrom F^V stellt eine nicht-messbare Störgröße

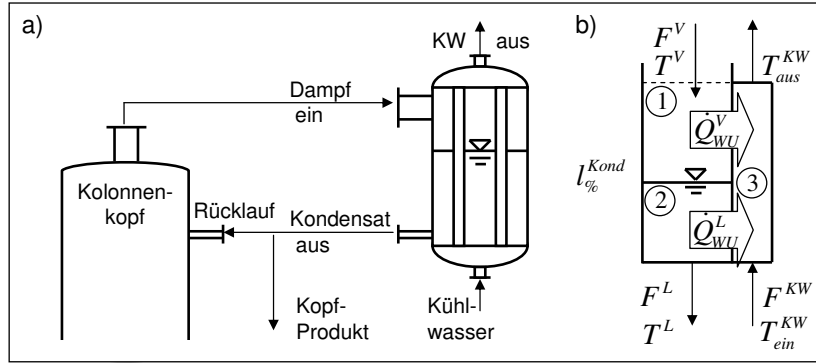


Abbildung 5.1: (a) Schematische Darstellung von Kolonnenkopf und Kondensator; (b) Bilanzräume

dar¹. Der flüssige Kondensat-Volumenstrom F^L ist die Summe aus Rücklauf und Destillat und stellt eine Entscheidungsgröße dar.

$$A_{quer}^{Kond} \cdot l_{max} \cdot \frac{dl_{\%}^{Kond}}{dt} = 10^{-3} \cdot (F^V - F^L) \quad (5.1)$$

Energiebilanz Dampf: Im Bilanzraum ① wird keine Kondensatunterkühlung berücksichtigt. Die Änderung der Dampftemperatur im Kolonnenkopf (und Kondensator) T^V wird als Funktion der Kondensationswärme $\dot{Q}^{LV}$ und der an das Kühlwasser abgeführten Wärme $\dot{Q}_{WU}^V$ beschrieben (Gl. (5.2)). Die Dynamik der Temperaturänderung wird dabei vom volumetrischen Holdup der Kolonne $V^{L,Kol}$ bestimmt (siehe Kap. 5.3.2).

$$\begin{aligned} c_p^L \rho^L V^{L,Kol} \cdot \frac{dT^V}{dt} &= \dot{Q}^{LV} - \dot{Q}_{WU}^V \\ \text{mit } \dot{Q}^{LV} &= r^L(x_{Ac}) \cdot F^V = 10^{-3} \rho^L h^{LV}(x_{Ac}) \cdot F^V \\ \dot{Q}_{WU}^V &= k_{WU}^V (1 - l_{\%}^{Kond}) \cdot A_{WU}^{Kond} \cdot (\Delta T)^V \\ (\Delta T)^V &= f(T_{aus}^{KW}, T_{ein}^{KW}, T^V, \theta_{\Delta T}^V) \end{aligned} \quad (5.2)$$

Die spezifische Verdampfungswärme wird zusammengefasst zu $r^L(x_{Ac})$ und ist damit auf den kondensierenden Dampfmengenstrom F^V bezogen. Der große Einfluss der Gemischkonzentration auf die Verdampfungsenthalpie wird hier explizit berücksichtigt. Änderungen in $r^L(x_{Ac})$ bzw. F^V erzwingen eine Änderung der Dampftemperatur T^V . Direkt und indirekt manipulierbare Größen sind die für den Wärmeübergang zur Verfügung stehende Fläche $(1 - l_{\%}^{Kond}) \cdot A_{WU}^{Kond}$ und die treibende Temperaturdifferenz $(\Delta T)^V$.

Energiebilanz Kondensat: Die Kondensattemperatur ergibt sich aus der Energie der ein- und austretenden Ströme F^L , F^V sowie der Wärmeabgabe $\dot{Q}_{WU}^L$. Die manipulierbaren Größen

¹Er wird hier als kondensierende Flüssigkeit in [ltr/h] gemessen.

ben sind analog zur Dampfbilanz, $l_{\%}^{Kond} \cdot A_{WU}^{Kond}$ und $(\Delta T)^L$. Zusätzlich ist hier die mittlere Aufenthaltszeit des Kondensats relevant.

$$\begin{aligned} & c_p^L \rho^L A_{quer}^{Kond} l_{max}^{Kond} \cdot \frac{d(l_{\%}^{Kond} \cdot T^L)}{dt} \\ & = 10^{-3} \cdot (F^V c_p^L \rho^L T^V - F^L c_p^L \rho^L T^L) - \dot{Q}_{WU}^L \\ \text{mit } & \dot{Q}_{WU}^L = k_{WU}^L \cdot l_{\%}^{Kond} A_{WU}^{Kond} \cdot (\Delta T)^L; \\ & (\Delta T)^L = T^L - T_{ein}^{KW} \end{aligned} \quad (5.3)$$

Auflösen des totalen Differentials und einsetzen von Gl. (5.1) liefert:

$$\begin{aligned} & A_{quer}^{Kond} \cdot l_{max}^{Kond} \cdot l_{\%}^{Kond} \cdot \frac{dT^L}{dt} \\ & = 10^{-3} \cdot F^V (T^V - T^L) - \dot{Q}_{WU}^L / (c_p^L \rho^L) \end{aligned} \quad (5.4)$$

Energiebilanz Kühlwasser: Es wird lediglich die Austrittstemperatur bilanziert (Bilanzraum ③).

$$(m c_p)^{KW+Wand} \cdot \frac{dT_{aus}^{KW}}{dt} = \dot{Q}_{WU}^L + \dot{Q}_{WU}^V + 10^{-3} \cdot F^{KW} c_p^{KW} \rho^{KW} (T_{ein}^{KW} - T_{aus}^{KW}) \quad (5.5)$$

Druck-Temperaturbeziehung: Der Dampfdruck wird aus den VLE-Daten und der Summenbeziehung berechnet (siehe auch Abb. 4.5). Mit $p = p_{Ac}^{LV} + p_{Wa}^{LV}$ ergibt sich die algebraische Beziehung:

$$\begin{aligned} p &= f(T^V, x_{Ac}) \\ &= (1 - x_{Ac}) \cdot \gamma_2(T^V, x_{Ac}) \cdot p_{0,Wa}^{LV}(T^V) + x_{Ac} \cdot \gamma_1(T^V, x_{Ac}) \cdot p_{0,Ac}^{LV}(T^V) \end{aligned} \quad (5.6)$$

Abgesehen von $\gamma_i(T^V, x_{Ac})$ und $r^L(x_{Ac})$, wurden alle Stoffdaten als konstant mit Mittelwerten für T und x_{Ac} angenommen.

Modellierung der treibenden Temperaturdifferenz für den Wärmeübergang bei der Filmkondensation: Die druckbestimmende Dampftemperatur ändert sich in Abhängigkeit des Wärmeüberganges bei der Filmkondensation. In einfachen Worten: Die Dampftemperatur steigt/fällt so lange, bis das treibende Temperaturgefälle $(\Delta T)^V$ einen Wert erreicht, für den die Kondensationswärme abgeführt werden kann. Ziel ist es, eine Beziehung $(\Delta T)^V = f(T^V, T_{ein}^{KW}, T_{aus}^{KW})$ zu finden, die das gemessene Verhalten möglichst gut wiedergibt. Wie in Abbildung 4.7 und 5.2 links zu sehen, ändert sich die Dampftemperatur T^V im Vergleich zur Kühlwasseraustrittstemperatur T_{aus}^{KW} nur wenig. Weiterhin ist die durch den Kühlmengenstrom beeinflusste Kühlwasseraustrittstemperatur relativ hoch. In Abbildung 5.2 (rechts) sind verschiedene Modelle für die Berechnung der treibenden Temperaturdifferenz für eine

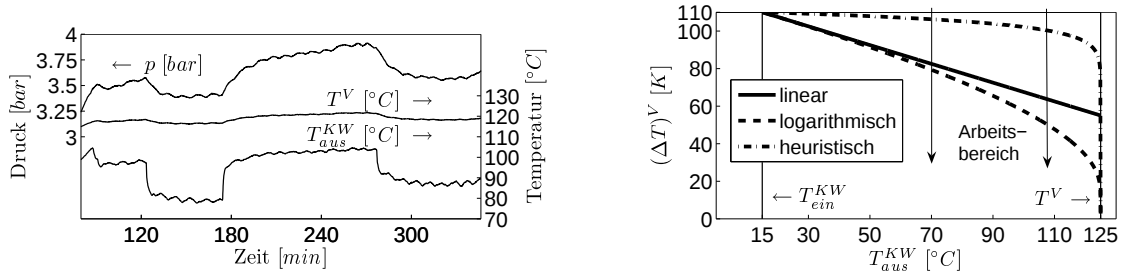


Abbildung 5.2: **links:** Dampftemperatur und Druck für Änderungen der Kühlwasseraustrittstemperatur bei sprunghaften Änderungen des Kühlmengenstroms; **rechts:** lineare, logarithmische und heuristische treibende Temperaturdifferenz für Änderungen der Kühlwasseraustrittstemperatur und eine feste Kondensationstemperatur $T^V = 125^\circ\text{C}$

festen Dampfdruck dargestellt. Für $F^{KW} \rightarrow \infty$ geht $T^{KW}_{aus} \rightarrow 15^\circ\text{C}$ und damit wird $(\Delta T)^V$ maximal. Für $F^{KW} \rightarrow 0$ geht $T^{KW}_{aus} \rightarrow 125^\circ\text{C}$ und $(\Delta T)^V$ wird minimal, es findet kein Wärmeübergang mehr statt. Dies wird durch die lineare Temperaturdifferenz nicht berücksichtigt. Ein Problem des logarithmischen Modells ist die relativ große Änderung von $(\Delta T)^V$ im Arbeitsbereich. Daher wurde eine heuristische Beziehung verwendet (Gl. (5.7)).

$$(\Delta T)^V = \left(1 - \frac{T^{KW}_{aus} - T^{KW}_{ein}}{T^V - T^{KW}_{ein}}\right)^{\theta_{\Delta T}^V} \cdot (T^V - T^{KW}_{ein}) \quad (5.7)$$

Der Parameter $\theta_{\Delta T}^V$ wurde zu 0,04 bestimmt. In Abbildung 5.3 sind die qualitativen Temperaturverläufe der einzelnen Modelle dargestellt. Die Verläufe 3 und 4 sind für den angegebenen Betriebsbereich relevant.

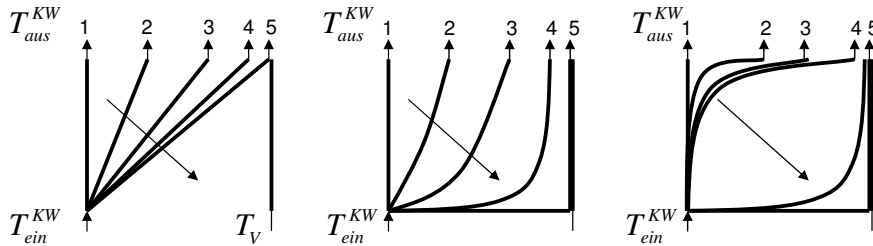


Abbildung 5.3: Qualitative Verläufe 1-5 der Kühlwassertemperatur (lineares, logarithmisches und heuristisches Modell)

5.2 Stationäre Modellvalidierung

Das Kondensatormodell Gl. (5.1) - (5.6) ist das Ergebnis der iterativen Anpassung der Modellgleichungen (strukturelle Modelladaptation) an das gemessene Prozessverhalten. Zur Be-

urteilung der Modellgüte wurden zunächst unterschiedliche stationäre Zustände betrachtet. Unbekannte Prozessparameter wurden dabei durch Parameterschätzung ermittelt. Stimmt das Modell mit dem Prozess überein, so unterscheiden sich die für verschiedene Arbeitspunkte ermittelten Parameter nicht. Damit kann die Größe ihrer Abweichung als Indikator für die Modellgüte interpretiert werden. Ein wichtiger Punkt ist die Identifizierbarkeit und die Wahl einer geeigneten Kombination von anzupassenden Parametern.

Es wurden zunächst für einen konstanten Feedstrom von $F^{Feed} = 50 \text{ ltr/h}$, unterschiedliche Heizleistungen² von $\dot{Q}^{Sumpf} = 17 - 22\%$ bzw. $6,2 - 7,3 \text{ KW}$, des Kondensatfüllstands $L^{Kond} = 25 - 75\%$ und des Kühlwasserstroms $F^{KW} = 40 - 60 \text{ ltr/h}$ stationäre Betriebspunkte aufgenommen (Sygnarowicz, 2006). Es stellten sich Kopfdrucke (open-loop) von $p = 3,16 - 4,1 \text{ bar}$ mit Kühlwasseraustrittstemperaturen zwischen $T_{aus}^{KW} = 89 - 117^\circ\text{C}$ ein. Die stationären Zustände wurden zunächst anhand des Verlaufs der messbaren Größen identifiziert. Zusätzlich wurde die Einhaltung des energetischen Gleichgewichts überprüft. In die Berechnung wurden die eintretenden Ströme: Feed, Heizleistung und Kühlwasser und die austretenden Ströme: Sumpf- Destillat- und Kühlwasserstrom einbezogen (Sygnarowicz 2006). Für die letztendlich ausgewählten Betriebspunkte ergeben sich minimale und maximale Wärmeverluste von $\dot{Q}_{loss} = 0,16 - 0,67 \text{ KW}$ mit einem Mittelwert von

$$\Delta\dot{Q}^V \approx 0,36 \text{ KW} \quad (5.8)$$

Dieser Wert zeigt eine gute Übereinstimmung mit dem in Kapitel 4.5.1 ermittelten mittleren Wert von $\Delta\dot{Q}^V \approx 0,31 \text{ KW}$ ³. Im Rahmen der stationären Modellvalidierung wurden Parameter geschätzt, welche die Energiebilanzen und die Gleichgewichtsbeziehung betreffen. Der Füllstand und die von den Durchflussreglern eingestellten Ströme wurden als bekannte Betriebsgrößen im Modell berücksichtigt. Für den nicht-messbaren kondensierenden Dampf-mengenstrom gilt $F^V = F^L$. Wie auch in Kapitel 4.5.1 wurden die stationären verrauschten Messdaten y^{mess} durch Mittelwertbildung vorverarbeitet. Für das Schätzproblem wurden 10

²Damit war die Kolonne teilweise geflutet. Es ergeben sich strukturelle Unsicherheiten, da für die Modellierung vorausgesetzt wurde, dass der gesamte in den Kondensator eintretende Strom auch kondensiert wird.

³Da hier nur externe Ströme berücksichtigt werden, können für die Ermittlung des Wärmeverlustes (im Gegensatz zu Kapitel 4.5.1) auch Ergebnisse oberhalb der Belastungsgrenze berücksichtigt werden.

stationäre Zustände SZ berücksichtigt:

$$\begin{aligned}
\min_{\boldsymbol{\theta}} \quad & \Phi_{MLE}(\boldsymbol{\theta}) = \sum_{i=1}^N \left(\frac{1}{2} (\mathbf{y}^{mess} - \mathbf{g}[\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}])^T \mathbf{M} \mathbf{V}^{-1} (\mathbf{y}^{mess} - \mathbf{g}[\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}]) \right) \quad (5.9) \\
& \left. \begin{array}{ll} N = 1; & \forall SZ \quad \text{separate} \\ N = 10 & \text{simultane} \end{array} \right\} \begin{array}{l} \text{Berücksichtigung der} \\ \text{stationären Zustände} \end{array} \\
\text{so dass} \quad & 0 = \mathbf{g}[\mathbf{x}, \mathbf{u}, \boldsymbol{\theta}] \\
& \boldsymbol{\theta}^{min} \leq \boldsymbol{\theta} \leq \boldsymbol{\theta}^{max} \\
\text{und} \quad & \boldsymbol{\theta} = [x_{Ac}, k_{WU}^V, k_{WU}^L, k_{WU}^{2ph}, r^L]^T \\
& \mathbf{y}^{mess} = [T^L, T^V, T_{aus}^{KW}, p]^T \\
& \mathbf{M} \mathbf{V} = f(\sigma_T, \sigma_p); \quad \text{mit } \sigma_T = 0,25 \text{ K}; \sigma_p = 0,03 \text{ bar}
\end{aligned}$$

Die Verdampfungswärme r^L hängt maßgeblich von der Gemischkonzentration x_{Ac} ab. Diese kann entweder als abhängige Variable $r^L(x_{Ac})$ oder als anzupassender Parameter $r^L \neq f(x_{Ac})$ berücksichtigt werden. Aufgrund der reduzierten Systembeschreibung und der geringen Information durch die verfügbaren Messdaten lassen sich nicht alle Parameter in $\boldsymbol{\theta}$ eindeutig identifizieren. Es musste daher eine Auswahl aus der Menge der Parameter $\boldsymbol{\theta}$ getroffen werden. Als Kriterium wurde die Invertierbarkeit der Parameterkovarianzmatrix $\mathbf{P} \mathbf{V}$ an der Lösung genutzt (siehe auch Kap. 3.3.7). Die Erweiterung des Parameterschätzproblems (Gl. (5.9)) für die simultane Berücksichtigung aller stationären Punkte ($N = 10$) stellte bezüglich der Identifizierbarkeit der Parameter keine Verbesserung dar⁴. Ein weiterer wichtiger Punkt ist, dass die geschätzten Parameter für die optimale Lösung im allgemeinen nicht an den für sie definierten Grenzen $\boldsymbol{\theta}^{min}$ und $\boldsymbol{\theta}^{max}$ liegen sollten, da diese hier physikalisch begründet sind.

Die Ergebnisse für die letztendlich gewählten Parameter sind in Tabelle 5.1 dargestellt. $k_{WU}^{2ph} = 0$ repräsentiert den Wärmeübergang für den direkten Kontakt des Dampfes mit dem Kondensat (Mischkondensation). Dieser energetische Beitrag konnte nicht eindeutig identifiziert werden und wurde daher vernachlässigt ($k_{WU}^{2ph} = 0$). (Die entsprechenden Terme $\dot{Q}_{WU}^{2ph} = k_{WU}^{2ph} A_{quer}^{Kond} \Delta T^{2ph}$ in Gl. (5.3) und (5.2) wurden der Übersichtlichkeit halber weggelassen.) Die geschätzte Acetonitril-Konzentration lag für die im Vorfeld durchgeführten Optimierungsläufe häufig an den Grenzwerten $0 \leq x_{Ac} \leq x_{Ac}|_{az.Pkt.}$. Sie wurde letztendlich ebensowenig berücksichtigt. Gründe für die mangelhafte Identifizierbarkeit der Kopfkonzentration wurden bereits in Kapitel 4.5.2 diskutiert. Es wurden vor allem durch die Anpassung der treibenden Temperaturdifferenz ΔT^V (Gl. (5.7)) Verbesserungen der Modellgüte im untersuchten Betriebsbereich erzielt. Die für die stationären Zustände geschätzten Parameter k_{WU}^V , k_{WU}^L sowie r^L variieren jedoch noch relativ stark. Die Werte für die spezifische Verdampfungs-

⁴Für die simultane Berücksichtigung aller stationären Zustände sind die Modellgleichungen NE -mal aufzustellen/zu lösen (Faber et al., 2003, 2004). Dies ist durch die Tatsache bedingt, dass jeder einzelne stationäre Zustand unterschiedliche Betriebsvariablen aufweist.

Tabelle 5.1: Ergebnisse der separat für jeden stationären Zustand durchgeführten Parameterschätzung (die unterstrichenen Werte wurden hier konstant gesetzt)

stat. Zust. SZ	Φ_{MLE}	Parameter θ				
		x_{Ac} [mol%]	k_{WU}^V [$\frac{W}{m^2 K}$]	k_{WU}^L [$\frac{W}{m^2 K}$]	k_{WU}^{2ph} [$\frac{W}{m^2 K}$]	r^L [$\frac{KJ}{ltr}$]
1	0,4	<u>60</u>	344	5140	<u>0</u>	317
2	0,8	<u>60</u>	219	778	<u>0</u>	290
3	0,1	<u>60</u>	311	478	<u>0</u>	238
4	0,1	<u>60</u>	269	583	<u>0</u>	287
5	0,1	<u>60</u>	289	597	<u>0</u>	258
6	0,1	<u>60</u>	439	517	<u>0</u>	266
7	0,1	<u>60</u>	350	450	<u>0</u>	263
8	0,1	<u>60</u>	317	458	<u>0</u>	253
9	0,1	<u>60</u>	319	450	<u>0</u>	256
10	0,1	<u>60</u>	406	428	<u>0</u>	253

wärme r^L liegen nicht zwischen den Verdampfungswärmen der Reinstoffe ($r_{Ac}^L \approx 480 KJ/ltr$ und $r_{Wa}^L \approx 2120 KJ/ltr$) und liegen damit nicht im physikalisch sinnvollen Bereich. Gleiches gilt für die geschätzten Wärmedurchgangskoeffizienten. Bezüglich r^L ist zu berücksichtigen, dass die Kolonne für die eingestellten Betriebspunkte teilweise oberhalb der Flutgrenze betrieben wurde und damit nur ein Teil des gemessenen Kondensatstroms die Kondensationswärme auch abgegeben hat (Vgl. Kap. 4.5). Für den Betrieb unterhalb der Flutgrenze liegt r^L dagegen im physikalisch sinnvollen Bereich (Kap. 5.3.2). Zusammenfassend lässt sich sagen, dass die Ergebnisse auf strukturelle Modellfehler (Vernachlässigung des Flutens, vereinfachte Modellierung der Filmkondensation im Kondensator) hinweisen, welche durch die angepassten Parameter stationär kompensiert werden können.

5.3 Dynamische Zustandsschätzung - online

Wie anhand der stationären Modellvalidierung gezeigt werden konnte, weist das Modell strukturelle Unsicherheiten auf. Wird das Modell für die Prozessführung eingesetzt, so ist seine Gültigkeit zu gewährleisten, das heisst die Modellparameter sind an den Betriebsbereich anzupassen. Weiterhin sind die Zustandsgrößen dem Prozess nachzuführen.

5.3.1 Formulierung des Schätzproblems

Für die *online*-Anwendung wird ein *Parameter Adaptive Extended Kalman Filter* (PAEKF) eingesetzt, welcher sowohl für die Zustands- als auch die Parameterschätzung eingesetzt werden kann (Nagy et al., 2007). Der Zustandsvektor der in Gleichung (5.1)-(5.5) bilanzierten

Zustandsgrößen wird dafür um die anzupassenden Parameter erweitert $\chi = [\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}]^T$.

$$\chi = [\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}]^T = [l_{\%}^{Kond}, T^L, T^V, T_{aus}^{KW}, F^V, k_{WU}^V, k_{WU}^L, r^L]^T \quad (5.10)$$

Zusätzlich zu den in Tabelle 5.1 berücksichtigten Parameter wird hier auch der kondensierende Dampfmengenstrom F^V als anzupassender Parameter berücksichtigt. Dieser stellt eine nicht-messbare dynamische Störgröße dar, welche maßgeblich von der Heizleistung $\dot{Q}^{Sumpf}$ beeinflusst wird. Während für die Variablen $\mathbf{x}$ die Gleichungen (5.1)-(5.5) gelten, werden die Parameter $\boldsymbol{\theta}$ als konstant im Zeitintervall angenommen:

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{x}} &= \mathbf{f}[\mathbf{x}, \mathbf{u}, \boldsymbol{\theta}, t] + \boldsymbol{\xi}_x \\ \dot{\boldsymbol{\theta}} &= \mathbf{0} + \boldsymbol{\xi}_\theta \end{aligned} \quad (5.11)$$

Mit der Konzentration als konstantem Parameter führt die simultane Berücksichtigung von T^V und p aufgrund von Messungenauigkeiten zu widersprüchlichen Ergebnissen (Kap. 4.5). Daher wird nur der Druck p als Messgröße berücksichtigt:

$$\mathbf{y}^{mess} = [l_{\%}^{Kond}, T^L, T_{aus}^{KW}, p]^T \quad (5.12)$$

Die Messgleichungen liefern die entsprechenden modellbasierten Daten:

$$\mathbf{y} = \mathbf{h}[\mathbf{x}, \mathbf{u}, \boldsymbol{\theta}, t] + \boldsymbol{\varphi} \quad (5.13)$$

Die für den EKF-Algorithmus relevanten Matrizen, die Jakobimatrix $\mathbf{A}$ und die Übertragungsmatrix der Messgleichungen $\mathbf{H}$ (siehe Kap. 3.3.8), ergeben sich zu:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}, t)}{\partial \mathbf{x}} & \frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}, t)}{\partial \boldsymbol{\theta}} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix}; \quad \mathbf{H} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial h_4(T^V)}{\partial T^V} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (5.14)$$

Die algebraische Beziehung in Gl. (5.6) wird durch $\mathbf{h}_4(T^V)$ repräsentiert.

5.3.2 Implementierung des Extended Kalman Filters

Für die von Hand angepassten dynamischen Parameter in Gleichung (5.1)-(5.5) ergeben sich folgende Werte:

$$\begin{aligned} c_p^L &= 2.1 \frac{KJ}{ltr K}; & V^{L, Kol} &= 15 ltr + 28 \cdot 0,33 ltr = 24 ltr \\ c_p^{KW} &= 4.1 \frac{KJ}{ltr K}; & (m \cdot c_p)^{Wand+KW} &= 22,0 \frac{KJ}{K} \end{aligned} \quad (5.15)$$

Da sich der Druck praktisch verzögerungsfrei über die gesamte Kolonnenhöhe ändert, stellt sich die Temperatur des gesamten Holdups der Kolonne als Funktion des Drucks ein. Druck und Temperatur verhalten sich dabei dynamisch verzögerungsfrei (siehe auch Abb.4.7). Die Dynamik von Druck und Temperatur im Kondensator lässt sich durch die Variation des Speichergliedes in Gl. (5.2) anpassen. Die Approximation von $V^{L,Kol}$ mit dem gesamten Flüssig-Holdup der Kolonne (Sumpf und Böden) liefert hier gute Ergebnisse.

Für die Einbeziehung der stochastischen Messfehler und Störungen sind die Kovarianzmatrizen des Messfehlers $\mathbf{MV}$, des Systemrauschens $\mathbf{QV}$ sowie des Fehleranteils des Anfangszustands $\mathbf{PV}_0$ zu definieren. Während $\mathbf{MV}$ direkt durch die Analyse der Messfehler bestimmt werden kann, wurden $\mathbf{QV}$ und $\mathbf{PV}_0$ im Rahmen von *offline*-Studien zum Verhalten des Zustandsschätzers iterativ und durch Nutzung aufgezeichneter Daten bestimmt (Tabelle 5.3). Hohe Werte des Fehleranteils des Anfangszustandes erlauben die schnelle Anpassung der ent-

Tabelle 5.2: Diagonalelemente der Kovarianzmatrizen des Startzustands $\mathbf{PV}_0$ und des Systemrauschens $\mathbf{QV}$

	Zustand	Diagonalelemente		Diagonalelemente	
		$\mathbf{PV}_0$	Einheit	$\mathbf{QV}$	Einheit
$\mathbf{x}$	$l_{\%}^{Kond}$	0,01	$(\%)^2$	$1,0 \cdot 10^{-4}$	$(\%)^2/hr$
	T^L	3,0	$(K)^2$	2,0	$(K)^2/hr$
	T^V	1,0	$(K)^2$	0,05	$(K)^2/hr$
	T_{aus}^{KW}	1,0	$(K)^2$	0,5	$(K)^2/hr$
$\boldsymbol{\theta}$	F^V	32,0	$(ltr)^2$	5,0	$(ltr)^2/hr$
	k_{WU}^V	5,0	$(W/m^2/K)^2$	0,25	$(W/m^2/K)^2/hr$
	k_{WU}^L	5,0	$(W/m^2/K)^2$	11,1	$(W/m^2/K)^2/hr$
	r^L	$1,1 \cdot 10^4$	$(KJ/Kmol)^2$	400,0	$(KJ/Kmol)^2/hr$

sprechenden Größen bei Aktivierung des Filters. Die Diagonalelemente von $\mathbf{MV}$ (unkorrelierte Messwerte) sind in Tabelle 5.3 dargestellt. Die Berechnungen sowie eine *online*-Visualisierung

Tabelle 5.3: Diagonalelemente der Kovarianzmatrix der Messfehler $\mathbf{MV}$

	Messwerte	Diagonalelemente	
		$\mathbf{PV}_0$	Einheit
$\mathbf{y}$	$l_{\%}^{Kond}$	$3 \cdot 10^{-6}$	$(\%)^2$
	T^L	0,25	$(K)^2$
	T_{aus}^{KW}	0,11	$(K)^2$
	p	$2,8 \cdot 10^{-8}$	$(bar)^2$

wurden in Matlab implementiert und der Datenaustausch über die OPC-Schnittstelle (OLE for Process Control) realisiert. Die Messwerte werden im 24 sec Takt verarbeitet. Da die Messungenauigkeiten der Entscheidungsgrößen (Volumenströme F^L , F^{KW}) nicht im Modell berücksichtigt werden, wurden hier die im Leitsystem verwendeten Sollwerte für die Berech-

nung genutzt. Abbildung 5.4 links zeigt eine schematische Darstellung der Implementierung des PAEKF. In der Praxis zeigte der Algorithmus für das auftretende Messrauschen eine gute

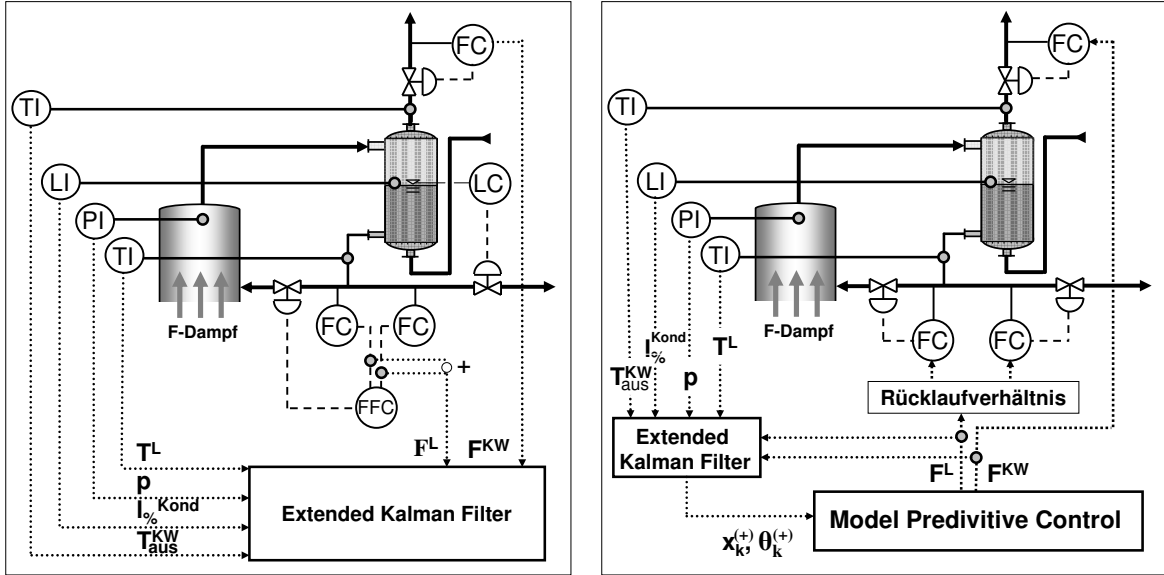


Abbildung 5.4: Schematische Darstellung der Anbindung von EKF (links) sowie von EKF und MPC (rechts)

Beobachtbarkeit der Zustandsgrößen. So erreichten die Parameter nach ca. 3 bis max 10 min nach dem Einschalten des Filters annähernd ihre stationären Werte. Für die messbaren Zustände können die Messwerte für die Initialisierung genutzt werden. Für die nicht-messbaren Zustände können Mittelwerte aus der stationären Parameterschätzung verwendet werden. Bezüglich des Konvergenzverhaltens des Filters traten keine Probleme auf, so konnte der Filter schon beim Anfahren der Kolonne in Betrieb genommen werden. Dies ist im Bezug auf die Lösung des nichtlinearen Gleichungssystems interessant und kann vor allem mit dem relativ kurzen Prädiktionshorizont und den resultierenden kleinen Änderungen der Zustandsgrößen begründet werden.

Abbildung 5.5 zeigt die Performanz des Filters im Betrieb. Nach der Einschwingphase (Aktivierung zum Zeitpunkt „Start EKF“) liegen die messbaren geschätzten Zustände $\hat{x}$ auf den Messwerten. Dies ist auf die höhere Verlässlichkeit der Messdaten im Vergleich zu den vom Modell vorhergesagten Daten zurückzuführen (Tab. 5.2, 5.3). Damit liegt die Aufgabe des Filters weniger in der Korrektur ungenauer Messwerte als in der Nachführung der Parameter und der Ermittlung des nichtmessbaren Dampfmengestromes. Wie bereits erwähnt, werden weder der Parameter Gemischkonzentration x_{Ac} noch die gemessene Dampftemperatur T^V im Filteralgorithmus berücksichtigt. Als Folge zeigt der prädizierte Wert T^V -EKF ein von der Messgröße abweichendes Verhalten. Die geschätzte Verdampfungswärme liegt hier zwischen den Werten der Reinstoffe ($r_{Ac}^L \approx 480 \text{ KJ/ltr}$ und $r_{Wa}^L \approx 2120 \text{ KJ/ltr}$), was als Indikation für

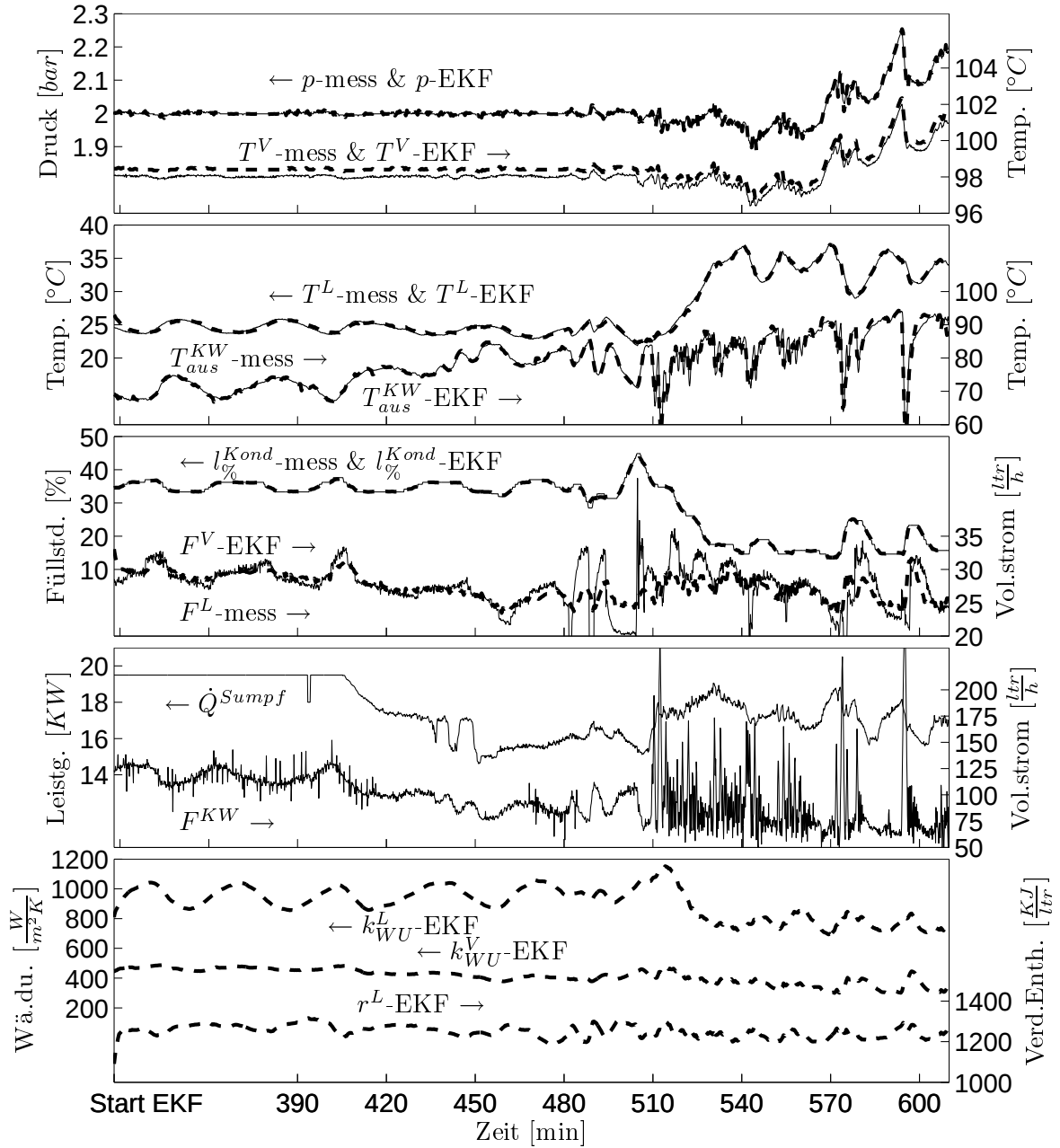


Abbildung 5.5: Messwerte (durchgezogene Linie „-mess“) und vom EKF geschätzte Zustände und Parameter (gestrichelte Linie „-EKF“) für zunehmende Störungen des Kolonnenbetriebs, Zeitpunkt „Start EKF“ kennzeichnet die Aktivierung des EKF

den Betrieb unterhalb der Flutgrenze interpretiert werden kann (Vgl. bspw. Tab. 5.1). Schwankungen des Dampfmengenstroms F^V und des Füllstands $l_{\%}^{Kond}$ besitzen einen großen Einfluß auf die geschätzten Parameter k_{WU}^L , k_{WU}^V , r^L . Es wird deutlich, dass teilweise starke Parameteranpassungen notwendig sind, um die modellbasierten Daten den Messdaten nachzuführen. Der Vergleich mit Verläufen von ermittelten Wärmeübergangskennzahlen an industriell eingesetzten Reaktorkühlsystemen (Schei und Singstad, 1998; Nagy et al., 2007) zeigt qualitativ ähnliche Ergebnisse.

5.3.3 Validierung des adaptiven dynamischen Modells

Der Einsatz des adaptiven Modells für die modellbasierte Regelung erfordert die ausreichende Genauigkeit des vom Modell vorhergesagten Verhaltens für einen definierten zeitlichen Horizont. Der Vergleich von vorhergesagtem und realem Verhalten für die sprunghafte Änderung des Kühlmengenstromes F^{KW} und des Füllstandes $l_{\%}^{Kond}$ wird in Abbildung 5.6 gezeigt. Die Vorhersage wird dabei basierend auf den zum Zeitpunkt $\text{sim-}\{1, 2, 3\}$ ermittelten Schätzgrößen (Anfangszustände, Modellparameter und Störungen) getroffen. Entscheidend ist der Vergleich des weiteren Verlaufs von Messdaten und Simulation für die geplanten Sprünge. Die Dynamik stimmt mit dem Prozess gut überein. Es wird jedoch deutlich, dass schon die Prädiktion der allgemeinen Trends (keine Änderungen der Entscheidungsgrößen F^L , F^{KW} , Zeit vor der Sprungaufgabe) aufgrund der Prozessschwankungen nicht exakt berechnet wird. Für die Variation des Kühlwassers (Abb. 5.6 oben) bei annähernd konstantem Kondensatstrom von $F^L = 20 \text{ ltr/h}$ liegt die geschätzte Verdampfungswärme im physikalisch sinnvollen Bereich. Sie wird dagegen für Abbildung 5.6 unten, bei einem Kondensatstrom von $F^L \approx 40 - 50 \text{ ltr/h}$, wieder stark unterschätzt. Dies weist auf den Betrieb oberhalb der Flutgrenze hin.

5.4 Modellbasierte Regelung auf Basis des adaptiven dynamischen Modells

Im Folgenden wird das entwickelte adaptive dynamische Modell für die Regelung eingesetzt. Aufgrund der nichtlinearen Modellgleichungen ist ein *Nonlinear* MPC-Problem (NMPC) zu lösen. Als einführende Literatur zur modellbasierten Regelung soll hier auf Camacho und Bordons (2004) und Dittmar und Pfeiffer (2004) verwiesen werden. In Schei und Singstad (1998), Santos et al. (2001), Diehl et al. (2003) und Nagy et al. (2007) finden sich experimentelle Umsetzungen von NMPC-Algorithmen.

5.4.1 Formulierung des Regelungsproblems

Für die optimale prädiktive Regelung wird zu jedem Zeitpunkt k eine Folge optimaler Entscheidungen für einen beschränkten zeitlichen Horizont berechnet. Grundlage ist der determi-

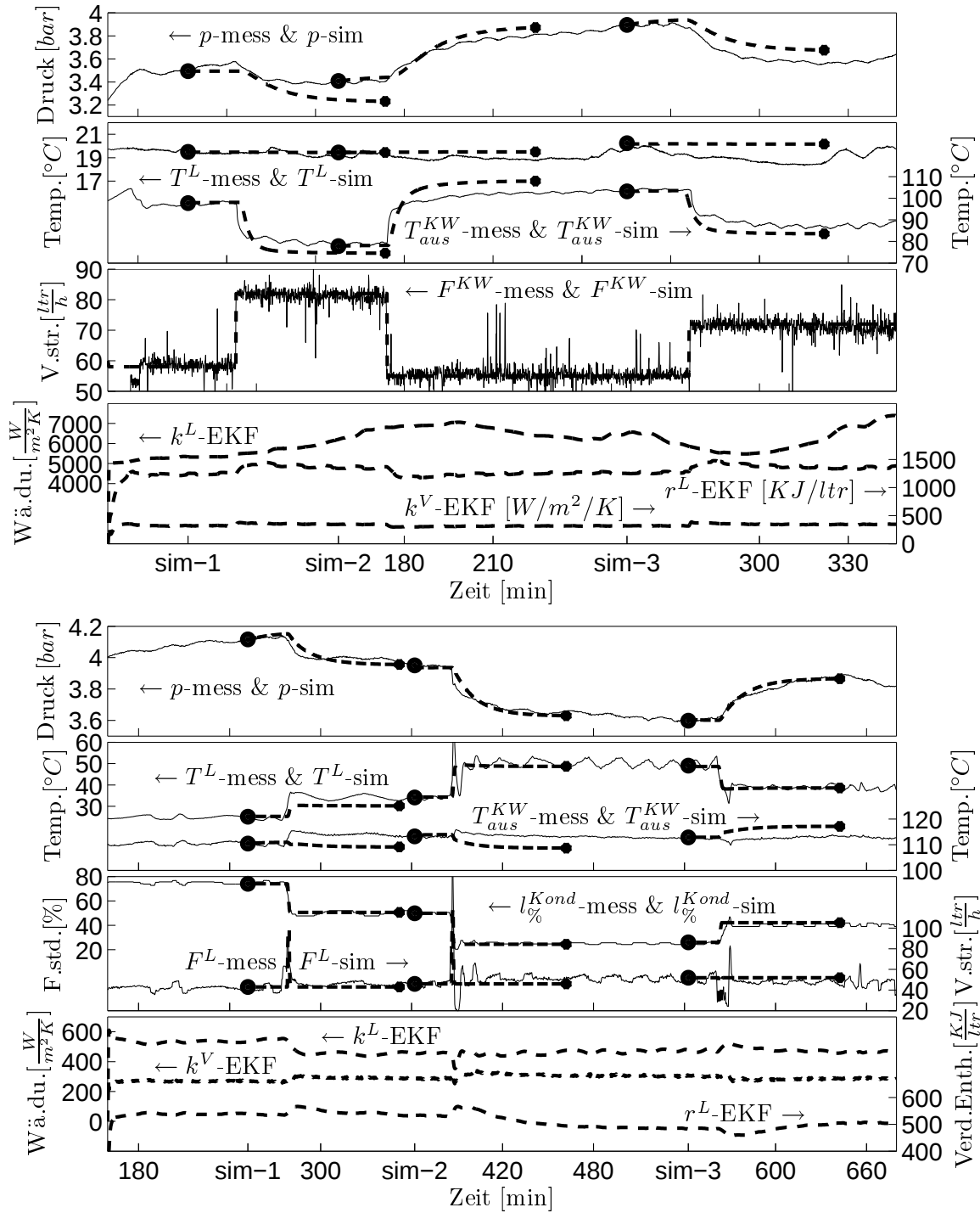


Abbildung 5.6: **Abbildung oben:** Dynamische Validierung für drei sprunghafte Änderungen des Kühlwasserstroms F^{KW} bei $l_{\%}^{Kond} = 50\%$ und $F^L = 20\text{ ltr/h}$; **Abbildung unten:** Dynamische Validierung für drei sprunghafte Änderungen des Füllstands $l_{\%}^{Kond}$ durch Beeinflussung des Kondensatstroms F^L bei $F^{KW} = 50\text{ ltr/h}$ (modellbasierte Daten (EKF/sim) sind gestrichelt dargestellt, die Vorhersage ist mit $\bullet - - - \bullet$ gekennzeichnet und startet jeweils zum Zeitpunkt sim-{1,2,3})

nistische Teil des Systemmodells (5.11) und (5.13):

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{x}}(t) &= \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \boldsymbol{\theta}, t) \\ \mathbf{y}(t) &= \mathbf{h}(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \boldsymbol{\theta}, t) \\ \text{für } \mathbf{x}_0 &= \mathbf{x}_k^{(+)}; \quad \boldsymbol{\theta} = \boldsymbol{\theta}_k^{(+)} \text{ und } t = [t_k, t_{n_p}]\end{aligned}\tag{5.16}$$

Die Zustandsgrößen und Parameter werden mit den zum Zeitpunkt k vom EKF geschätzten Größen initialisiert bzw. als konstant über den Horizont gesetzt. Die Anbindung des NMPC ist in Abbildung 5.4 rechts schematisch dargestellt. Die optimalen Entscheidungen für F^L und F^{KW} werden als Sollwerte an die Basisregler übergeben. Daher sind die Modellgleichungen des NMPC-Reglermodells (Gl. (5.1)-(5.6)) um die Dynamik der Basisregler zu erweitern. Die Nichtberücksichtigung der zusätzlichen Dynamik kann Oszillationen hervorrufen (Santos et al., 2001). Sie wird vereinfacht als Verzögerungsglied erster Ordnung modelliert.

$$\begin{aligned}\tau^L \cdot \frac{dF^L}{dt} &= (\mathbf{u}^L - F^L); \quad \text{mit } \tau^L = 12 \text{ sec} \\ \tau^{KW} \cdot \frac{dF^{KW}}{dt} &= (\mathbf{u}^{KW} - F^{KW}); \quad \text{mit } \tau^{KW} = 7 \text{ sec}\end{aligned}\tag{5.17}$$

Der NMPC-Algorithmus basiert auf der Lösung des dynamischen Optimierungsproblems zu jedem Zeitpunkt k (Dittmar und Pfeiffer, 2004):

$$\begin{aligned}\min_{\vec{\mathbf{u}}(k)} J &= \vec{\mathbf{e}}(k+1|k)^T \cdot \mathbf{Q} \cdot \vec{\mathbf{e}}(k+1|k) + \Delta \vec{\mathbf{u}}(k)^T \cdot \mathbf{R} \cdot \Delta \vec{\mathbf{u}}(k) \\ \text{so dass} \quad &\text{deterministische Modellgleichungen (5.16)} \\ &\mathbf{u}_{min}(k) \leq \mathbf{u}(k+j) \leq \mathbf{u}_{max}(k); \quad j = 0, 1, \dots, n_c - 1 \\ &\Delta \mathbf{u}_{min}(k) \leq \Delta \mathbf{u}(k+j) \leq \Delta \mathbf{u}_{max}(k); \quad j = 0, 1, \dots, n_c - 1 \\ &\mathbf{y}_{min}(k) \leq \mathbf{y}(k+j) \leq \mathbf{y}_{max}(k); \quad j = 1, 2, \dots, n_p \\ \text{und} \quad &\vec{\mathbf{e}}(k+1|k) = \vec{\mathbf{w}}(k+1|k) - \vec{\mathbf{y}}(k+1|k)\end{aligned}\tag{5.18}$$

Im zeitlichen Horizont mit $t = [t_k, t_{n_p}]$ wurden die Zustandsgrößen $\mathbf{x}$ mit dem Kollokationsverfahren diskretisiert und die Steuergrößen $\mathbf{u}$ im Intervall konstant gehalten. Die Anzahl der Intervalle von $\mathbf{x}$ und $\mathbf{u}$ lassen sich mit n_p und n_c unabhängig voneinander definieren. Es gilt: $n_c \leq n_p$. Die Lösung von (5.18) liefert die Folge der Entscheidungsgrößen:

$$\vec{\mathbf{u}}(k) = [\mathbf{u}(k) \quad \mathbf{u}(k+1) \cdots \mathbf{u}(k+n_c-1)]^T\tag{5.19}$$

Ziel ist die Minimierung der Abweichungen der Folge vorhergesagter Regelgrößen $\vec{\mathbf{y}}(k+1|k)$ von ihren Sollwerten $\vec{\mathbf{w}}(k+1|k)$. Zusätzlich werden die Stellgrößenaktivitäten bzw. die Änderungen der Entscheidungsgrößen von Intervall zu Intervall $\Delta \vec{\mathbf{u}}(k)$ als Strafterm in der Ziel-

funktion berücksichtigt. Die einzelnen Ziele werden mit den Diagonalelementen der Matrizen $\mathbf{Q}$ und $\mathbf{R}$ gewichtet. Entsprechend dem Prinzip des bewegten Horizonts werden jeweils die ersten Elemente der Steuergrößenfolgen implementiert und die Berechnungen für den folgenden Messzeitpunkt wiederholt.

5.4.2 Implementierung der modellbasierten Regelung

Die Zielfunktion setzt sich aus den konstanten Sollwerten für p und T^L und einem Strafterm für Änderungen des Kondensatstroms F^L zusammen, um Schwankungen im Rücklaufstrom zu minimieren.

$$\text{diag}(\mathbf{Q}) = [0, 100, 0, 10^6]^T; \quad \text{diag}(\mathbf{R}) = [0, 2 \cdot 10^{-2}]^T \quad (5.20)$$

Es hat sich als vorteilhaft erwiesen, einen Strafterm für die Änderungen des Füllstands $l_{\%}$ zu formulieren. Der zusätzliche Strafterm wurde mit dem Wichtungsfaktor $4 \cdot 10^4$ berücksichtigt. Für die Entscheidungsgrößen $\vec{u} = [\vec{u}^{KW}, \vec{u}^L]^T$ gelten die minimalen und maximalen Volumenströme:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_{min} &= [35, 0]^T \text{ ltr/h}; & \mathbf{u}_{max} &= [170, F_{max}^L]^T \text{ ltr/h} \\ \text{mit } F_{max}^L &\leq 80 \text{ ltr/h} \cdot (1+r)/r & \text{für } r > 1 \\ F_{max}^L &\leq 80 \text{ ltr/h} \cdot (1+r) & \text{für } r < 1 \end{aligned} \quad (5.21)$$

Der maximale Kondensatstrom F_{max}^L ergibt sich aus dem maximalen Rücklauf- bzw. Destillatstrom von 80 ltr/h sowie dem eingestellten Rücklaufverhältnis r . Die Änderungen der Entscheidungsgrößen $\Delta \mathbf{u}$ wurden nicht beschränkt. Weiterhin wurden für den Füllstand minimale und maximale Grenzen definiert:

$$\mathbf{y}_{min} = [15\%, -\infty, -\infty, -\infty]; \quad \mathbf{y}_{max} = [85\%, \infty, \infty, \infty] \quad (5.22)$$

Abbildung 5.7 zeigt die Funktionsweise des NMPC am konkreten Beispiel. Der EKF, NMPC und die Visualisierung wurden auf dem selben Rechner implementiert. Die notwendige Rechenzeit bestimmt die maximale Aktualisierungsrate von Messdaten und optimalen Entscheidungen. Die äquidistanten Messzeitpunkte wurden zu $\Delta t = t_k - t_{k-1} = 24 \text{ sec}$ gewählt. Die zeitliche Verzögerung zwischen der letzten Messung und der Implementierung der optimalen Entscheidungen wird durch einen zusätzlichen Simulationsschritt der Länge Δt überbrückt. Hier wird der weitere Prozessverlauf für die aktuell implementierten Entscheidungsgrößen vorhergesagt. Damit werden die Anfangswerte für den „realen“ zeitlichen Horizont $t = [t_k, t_{n_p}]$ des Optimierungsproblems bestimmt (Abb. 5.7).

Die Länge des zeitlichen Horizontes der Vorhersage richtet sich nach der Prozessdynamik und wurde zu 8 min gesetzt. Um die Anzahl der Optimierungsvariablen und damit die Kom-

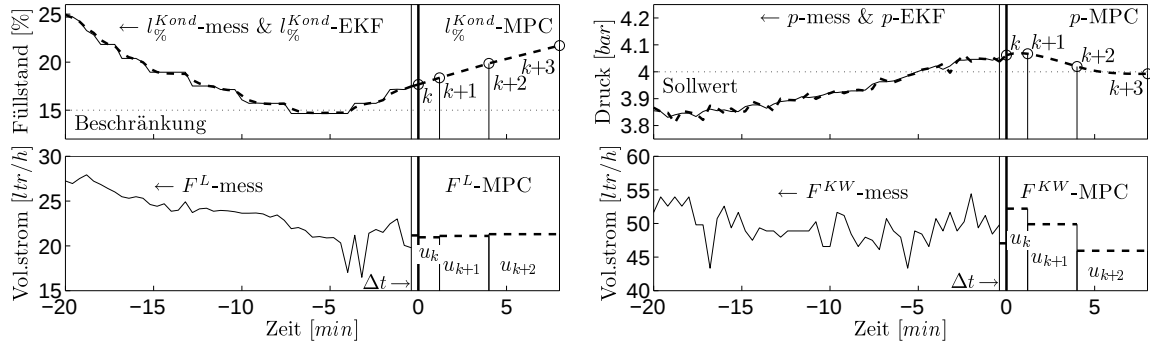


Abbildung 5.7: Wirkungsweise des NMPC; Zeitpunkt der Implementierung der optimalen Entscheidungen ist $t_k = 0$, die notwendigen Berechnungen wurden im vergangenen Intervall $\Delta t = t_k - t_{k-1}$ ausgeführt

plexität des Optimierungsproblems zu reduzieren, wurden Intervalle zusammengeführt und der Kontroll- und Prädiktionshorizont zu $n_c = n_p = 3$, mit $\Delta \vec{t}_k = [3, 7, 10] \cdot 24 \text{ sec}$ gesetzt (Abb. 5.7). Durch die kürzere Intervalllänge des ersten Intervalls können auftretende Regelabweichungen (bspw. aufgrund von Schwankungen des Dampfstromes) durch einen relativ großen und kurzen Eingriff schneller kompensiert werden.

Unter Berücksichtigung der nichtlinearen Modellgleichungen und der Nebenbedingungen ergibt sich ein nichtlineares beschränktes Optimierungsproblem (NLP). Für dessen effiziente Lösung wurden die Sensitivitäten analytisch bereitgestellt. Die Beschränkungen sind als *hard constraints* berücksichtigt, so dass aufgrund der Modellfehler eine zulässige Lösung nicht immer garantiert werden kann (Qin und Badgwell, 2003; Camacho und Bordons, 2004; Dittmar und Pfeiffer, 2004; Arellano-Garcia et al., 2007). Um die maximale Rechenzeit nicht zu überschreiten, wurden die SQP-Iterationen (SQP It., siehe auch Kap. 3.3.3) auf maximal 9 beschränkt. Als Startwert der Optimierung wurde die jeweils letzte Lösung verwendet.

5.4.3 Ergebnisse der modellbasierten Regelung

Abbildung 5.8 und 5.9 zeigen die Performanz des NMPC in Verbindung mit der Zustandschätzung. Während für den Druck verschiedene Sollwerte vorgegeben wurden, wurde für die Kondensattemperatur der konstante Sollwert von 70°C definiert.

Erwartungsgemäß wird für die Maximierung der Kondensattemperatur der Füllstand auf die untere Grenze von 15% abgesenkt und damit die Aufenthaltszeit des Kondensats reduziert. Dagegen wird für größere Sollwertabweichungen (bspw. Änderungen der Führungsgröße, Anfahren mit $p \ll p^{soll}$) der Füllstand angehoben, um die Druckerhöhung zu beschleunigen. Mit geringer werdender Abweichung des Drucks vom Sollwert gewinnt die Maximierung der Kondensattemperatur wieder an Bedeutung und der Füllstand wird abgesenkt (Abb. 5.8 und 5.9).

Im Gegensatz zur konventionellen Druckregelung (Vgl. Abb. 4.7) bleibt der Druck immer

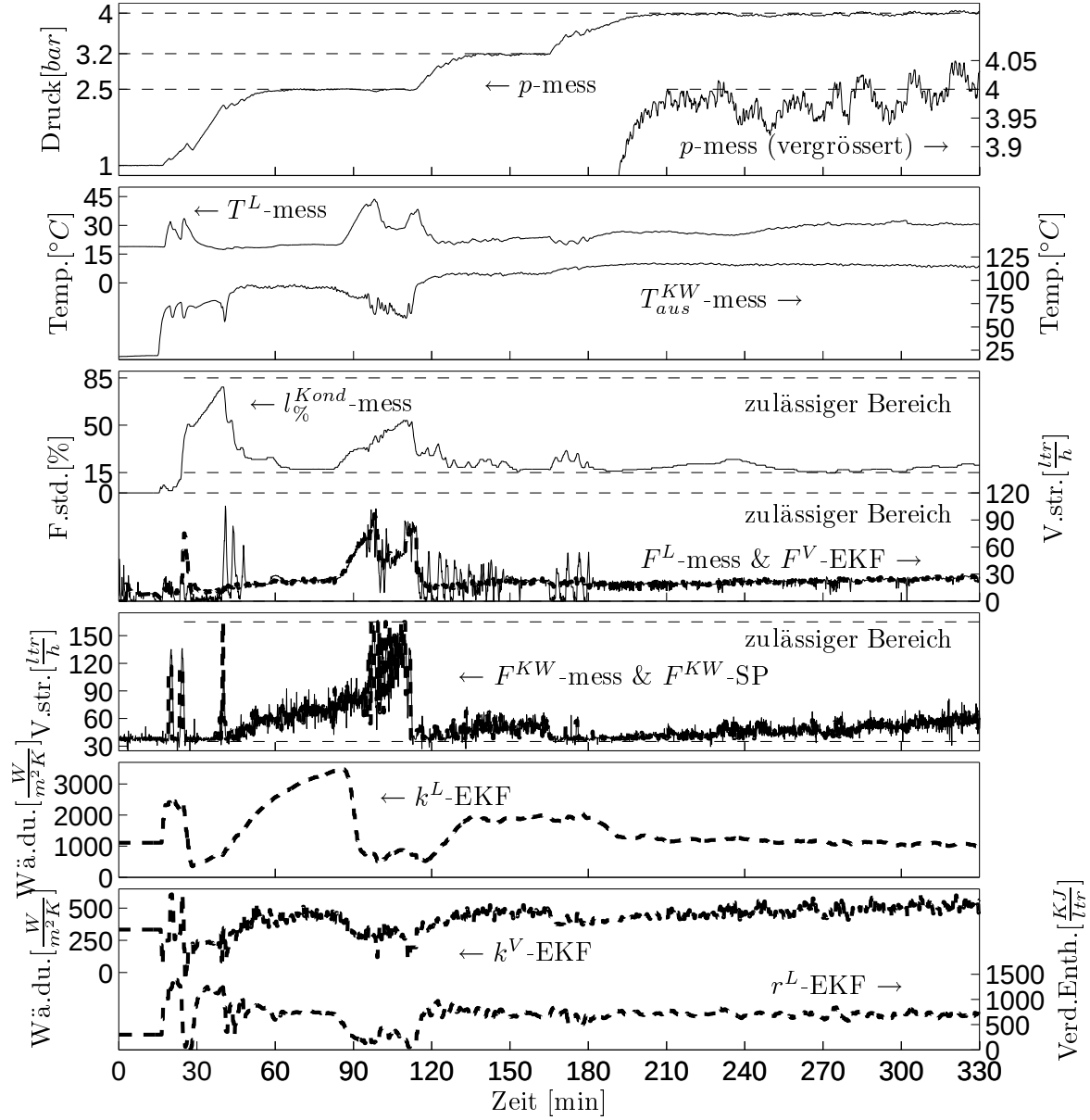


Abbildung 5.8: Performanz des NMPC für mehrere Sollwertsprünge im durch die Belastungsgrenzen definierten Betriebsbereich, die vom EKF geschätzten Größen sind gestrichelt dargestellt; „EKF“ geschätzte Größen, „mess“ gemessene Größen, „SP“ optimale Entscheidungen/*set-points*

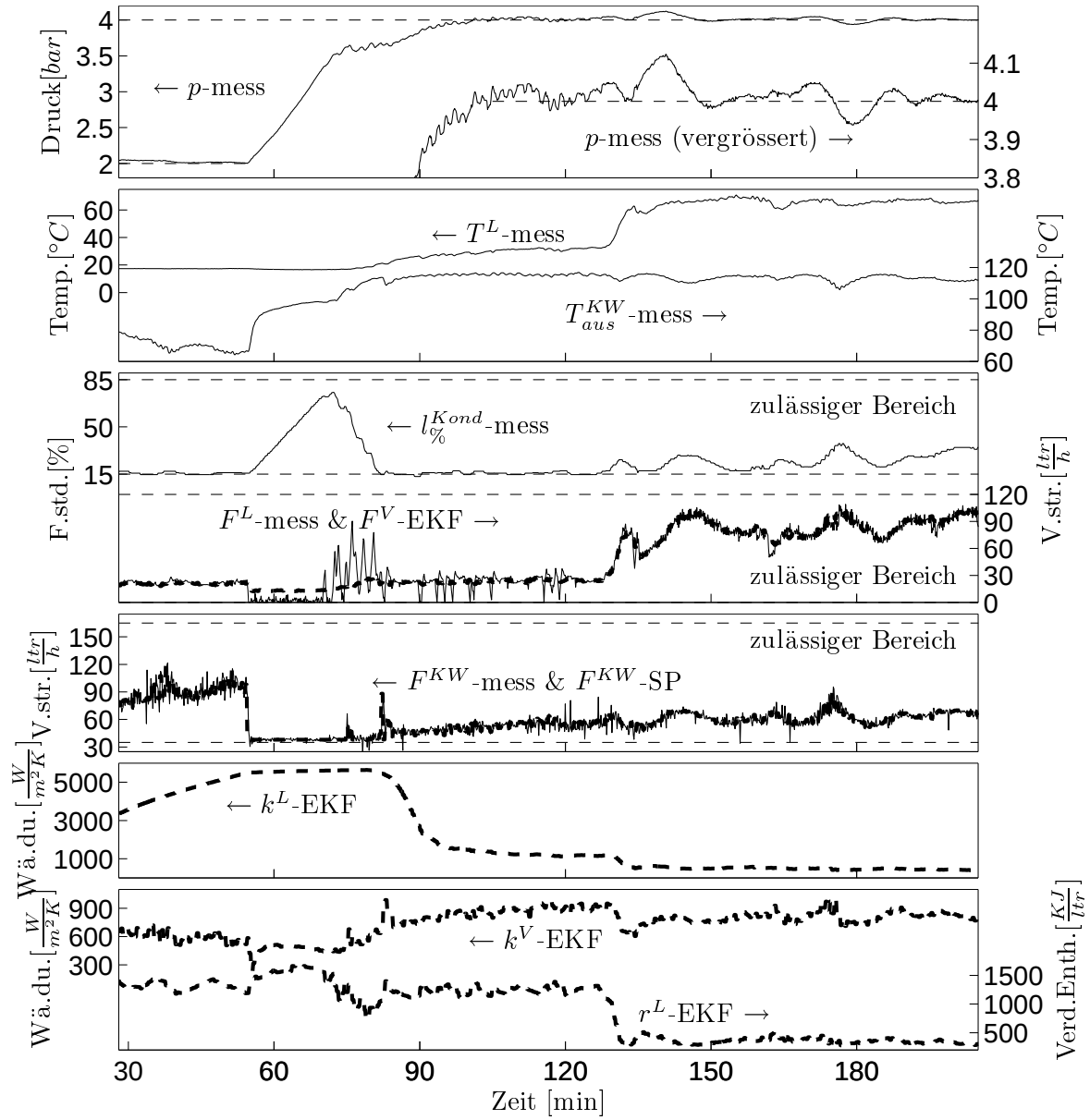


Abbildung 5.9: Performanz des NMPC für einen großen Sollwertsprung und mit zunehmend stark gestörtem Betrieb, die vom EKF geschätzten Größen sind gestrichelt dargestellt; „EKF“ geschätzte Größen, „mess“ gemessene Größen, „SP“ optimale Entscheidungen/set-points

kontrollierbar, da der NMPC die Stellgrößenbeschränkungen explizit berücksichtigt⁵.

Die Kondensattemperatur kann, trotz expliziter Berücksichtigung der Kondensatunterkühlung, für den Betrieb innerhalb der Belastungsgrenzen nicht signifikant erhöht werden (Abb. 5.8 und 5.9). Dies liegt in der Kondensatordimensionierung und seiner speziellen Betriebsführung begründet (Kap. 4.4.2).

Abbildung 5.8 zeigt das Regelverhalten beim Anfahren. Sammelt sich das erste Kondensat im Kondensator werden EKF und NMPC aktiviert. Bis zum Erreichen des Sollwertes weist das Modell noch starke Abweichungen auf und die geschätzten Größen schwanken teilweise stark. Aufgrund der sich ständig ändernden Parameter konvergiert der NMPC nicht immer und findet teilweise keine zulässige Lösung. Im Mittel werden korrekte Entscheidungen getroffen und das Anfahren lässt sich auch mit dem NMPC realisieren. Hat der Druck seinen Sollwert erreicht, weist der NMPC generell eine schlechtere Reglerperformanz als die konventionelle Druckregelung (PID) auf (maximale Schwankungsbreite: $\approx 15 - 20 \text{ mbar}$ PID und $\approx 50 \text{ mbar}$ NMPC). Der NMPC hängt stark von der Schätzgüte des PAEKF ab. Das Schwingen um den Sollwert ist hier hauptsächlich auf die verzögerte Identifikation der Variation des Dampfstromes zurückzuführen.

In Abbildung 5.9 wird der stark gestörte Betrieb (starke Änderungen des Dampfstromes) gezeigt. Der Regler greift nur mäßig ein und es resultieren große Abweichungen (bis 100 mbar) vom Sollwert. Allerdings zeigt der für den normal belasteten Betrieb getunte PID-Regler hier ähnlich starke Abweichungen. Aufgrund des hohen Kondensatstromes (überlasteter Betriebsbereich, siehe Indikator r^L) wird hier eine nennenswerte Anhebung der Kondensattemperatur T^L erreicht.

Die Schwankungsbreite des Kondensatstroms F^L fällt allgemein geringer und gedämpfter aus als für die konventionelle Füllstandsregelung (Kap. 4.4.4, Vergleich bei Betrieb ohne Filterung des Sollwerts des Rücklaufstromes). Dies ist einerseits auf die vom EKF korrigierte Messgröße $l_{\%}$ und andererseits auf die Berücksichtigung der Änderungsrate von F^L in der Zielfunktion des NMPC zurückzuführen.

⁵Voraussetzung ist, dass die minimal und maximal abführbare Kühlleistung (minimaler Kühlmengenstrom bei maximalem Füllstand und umgekehrt) ausreicht, um die Regelbarkeit des Drucks für die gewählte Sumpfleistung zu gewährleisten. Der NMPC erweitert dabei im Vgl. zum PID Regler den möglichen Betriebsbereich.

6 Modellbasierte Arbeitspunktoptimierung

Die Modellgüte des rigorosen Kolonnenmodells wurde bereits im Kapitel 4.5 untersucht. Das Modell soll nun zur Ermittlung optimaler Entscheidungen für den stationären Betrieb genutzt werden.

Es wird zunächst ein stationäres Optimierungsproblem ohne Berücksichtigung der Modellunsicherheiten formuliert (Kap. 6.1). Die Lösung des nominalen Optimierungsproblems und die experimentelle Umsetzung der optimalen Entscheidungen an der Anlage werden im Kapitel 6.2 präsentiert. Aufgrund der nichtberücksichtigten Modellunsicherheiten werden die Produktspezifikationen im realen Betrieb nicht erfüllt. Daher werden Untersuchungen zum Einfluss der Modellunsicherheiten angestellt (Kap. 6.3) und das Optimierungsproblem wird unter Berücksichtigung der Unsicherheiten erneut gelöst (Kap. 6.4). Dafür wird die Einhaltung der Spezifikationen mit einer definierten Wahrscheinlichkeit gefordert. Das Ergebnis sind optimale und robuste modellbasierte Entscheidungen zur Betriebsführung. Die experimentelle Umsetzung zeigt, dass diese auch für unsichere Prozessmodelle die Einhaltung der Produktspezifikationen garantieren.

6.1 Das stationäre Optimierungsproblem

Im Rahmen der Untersuchungen zur Modellgüte des rigorosen Kolonnenmodells (Kap. 4.5) wurde die Kolonne mit 2 bar und einer Feedkonzentration von 45 mol% auf dem Boden 18 (von unten) betrieben. Dieser Betriebspunkt und die ermittelten Parameter bilden den Ausgangspunkt der Arbeitspunktoptimierung (Tab. 6.1).

Tabelle 6.1: Parameter und Betriebsvariablen für die stationäre Arbeitspunktoptimierung

$\zeta_w = 1,5$	$p^{Kopf} = 2\text{ bar}$	$F^{Feed} = 15\text{ ltr/h}$
$\eta^A = 0,45$	$(\Delta T)_{UK} = 70^\circ\text{C}$	$x_{Ac}^{Feed} = 45\text{ mol\%}$
$\eta^V = 0,45$	$T^{sens} = 110^\circ\text{C}$	$T^{Feed} = 70^\circ\text{C}$

Der optimale stationäre Betriebspunkt der Hochdruckkolonne ist durch Beschränkungen definiert (siehe auch Kapitel 4.3.2). Da die stationäre Arbeitspunktoptimierung für Zeiträume von Wochen bis Monaten durchgeführt wird, werden hier nur kostenrelevante Aspekte betrach-

tet. Die Einhaltung sicherheitskritischer Beschränkungen, wie maximaler Temperaturen und Drucke, wird in den prozessnahen Automatisierungsebenen (Feld-, und Gruppenleitebene) bzw. durch passive Sicherheitsvorkehrungen garantiert. Daher wird hier wieder das vereinfachte Kondensatormodell genutzt (Tab. 4.3). Der Kopfdruck p^{Kopf} und die Kondensatunterkühlung $(\Delta T)_{UK}$ werden als konstante Prozessparameter direkt vorgegeben. Dies gilt auch für die Temperatur auf dem sensitiven Boden T^{sens} . Damit ergibt sich die aufzubringende Heizleistung als abhängige Variable durch Lösung der Modellgleichungen.

Ziel der stationären Arbeitspunktoptimierung ist die Einhaltung der Produktkonzentrationen für einen minimalen Energieeinsatz. Während für die Einhaltung der Sumpfreinheit eine indirekte Konzentrationsregelung genutzt wird, wird die Kopfreinheit über das fest eingestellte Rücklaufverhältnis (*feed-forward*) beeinflusst (Kap. 4.5). Die Reinheiten können also nicht direkt beeinflusst werden.

Das rigorose stationäre Kolonnenmodell wird genutzt, um die Wirkung der Entscheidungsgrößen (Feedboden, Boden für die Temperaturregelung im Abtriebsteil auf T_{soll}^{sens1} und Rücklaufverhältnis) auf die nicht-messbaren beschränkten Produktkonzentrationen vorherzusagen. Es ergibt sich folgendes deterministisches Optimierungsproblem:

$$\begin{aligned}
\min_{R, \mathbf{Y}_l^{Feed}, \mathbf{Y}_k^{sens}} \quad & J = \dot{Q}^{Sumpf} \\
\text{so dass} \quad & \text{stationäre Modellgleichungen} \\
& x_{Ac}^{Kopf} \geq 63,2 \text{ mol}\% \\
& x_{Ac}^{Sumpf} \leq 0,5 \text{ mol}\% \\
& \bigvee_{l \in \mathbf{D}^{Feed}} \left[\begin{array}{c} \mathbf{Y}_l^{Feed} \\ F_l^{Feed} = 15 \text{ ltr/h} \\ F_i^{Feed} = 0, \quad i \in \mathbf{D}^{Feed} \setminus \{l\} \\ \mathbf{D}^{Feed} = [2 : 2 : 10, 16 : 2 : 24] \end{array} \right] \\
& \mathbf{Y}_l^{Feed} \in \{\text{True}, \text{False}\}, \quad l \in \mathbf{D}^{Feed} \\
& \bigvee_{k \in \mathbf{D}^{sens}} \left[\begin{array}{c} \mathbf{Y}_k^{sens} \\ T_k = 110^\circ \text{C} \\ T_j = f(R, \mathbf{Y}_l^{Feed}, \mathbf{Y}_k^{sens}), \quad j \in \mathbf{D}^{sens} \setminus \{k\} \\ \mathbf{D}^{sens} = [1 : 1 : 5] \end{array} \right] \\
& \mathbf{Y}_k^{sens} \in \{\text{True}, \text{False}\}, \quad k \in \mathbf{D}^{sens}
\end{aligned} \tag{6.1}$$

Es handelt sich um ein gemischt-ganzzahliges Optimierungsproblem, da die Entscheidungen bezüglich der Lage des Feeds $\mathbf{Y}_l^{Feed}$ und des sensitiven Bodens $\mathbf{Y}_k^{sens}$ diskreter Natur sind. Da sowohl die Belegung eines Feedbodens bzw. eines sensitiven Bodens die Belegung anderer Böden als Feedboden bzw. Regelungsböden ausschließt, werden für die mathematische Beschreibung disjunktive (ausschließende) Bedingungen formuliert. Es resultieren Nebenbedin-

¹Damit wird die vertikale Lage bzw. die Höhe der Temperaturfront beeinflusst.

gungen, welche durch den logischen Operator $\vee$ („oder“, Disjunktion) verknüpft sind (Stein et al., 2004).

6.1.1 Lösungsansatz zur Berücksichtigung diskreter Entscheidungen

Für die Lösung des Optimierungsproblems wurden die diskreten Bedingungen für die Feedposition in Gleichung (6.1) als kontinuierliche Nebenbedingungen umformuliert (Raghunathan et al., 2004; Stein et al., 2004). Durch die Nutzung spezieller zusätzlicher (ebenfalls kontinuierlicher) Nebenbedingungen lassen sich die nun kontinuierlichen Entscheidungen $\tilde{\mathbf{Y}}_i^{Feed}$ Schritt für Schritt auf diskrete Werte zwingen. In Stein et al. (2004) werden verschiedene Formulierungen geeigneter zusätzlicher Nebenbedingungen am Beispiel der Wahl des optimalen Feedbodens einer Kolonne verglichen. Im Rahmen dieser Arbeit wurden die sogenannten *circle conditions* in das Optimierungsproblem aufgenommen, da diese einfach zu implementieren sind und erfolgreich angewandt wurden. Die Umsetzung für die Feedbedingungen ist in Gleichung (6.2) dargestellt.

$$1 = \sum_{i \in \mathbf{D}^{Feed}} \tilde{\mathbf{Y}}_i^{Feed} \quad (6.2)$$

$$\nu_i^2 \leq \left(\tilde{\mathbf{Y}}_i^{Feed} - \frac{1}{2} \right)^2 + \left(\sum_{j \in \mathbf{D}^{Feed} \setminus i} \tilde{\mathbf{Y}}_j^{Feed} - \frac{1}{2} \right)^2 \leq \frac{1}{2}, \quad \forall i \in \mathbf{D}^{Feed}$$

Das umformulierte Problem wird sequentiell für die Parameter $\nu_i^2 = [0 : 0,1 : 0,5]$ für $i = 1, \dots, 6$ gelöst, bis die relaxierten Entscheidungen für $\nu_i^2 = 0,5$ auf diskrete Werte gezwungen sind. Die Ergebnisse jeder Optimierung i werden dabei als Startwerte der folgenden Optimierung $i+1$ verwendet. Die resultierenden NLP-Probleme sind einfach und effizient lösbar, weisen jedoch durch die zusätzlichen Beschränkungen einen nicht-konvexen Charakter auf (Raghunathan et al., 2004; Stein et al., 2004). Der Vorteil gegenüber der Lösung eines *Mixed Integer-NLP Problems* liegt in der geringeren Anzahl notwendiger Funktionsaufrufe, da hier effiziente gradientenbasierte Lösungsverfahren genutzt werden können.

Die Methode der Relaxierung basiert auf der Superposition verschiedener diskreter Entscheidungsmöglichkeiten. Diese sind im Fall der Feedbodenwahl innerhalb einer Simulation realisierbar (Simulation mit simultaner Feedzufuhr auf verschiedenen Böden). Die simultane Regelung des Temperaturprofils auf verschiedenen Böden ist aufgrund des beschränkten Freiheitsgrades der Kolonne nicht möglich. Ist die Lage der Temperaturfront definiert, stellen sich die übrigen Temperaturen als Funktion der Entscheidungsvariablen ein (siehe auch Gl. 6.1). Für die Superposition verschiedener Regelungsverschaltungen bzw. die Berechnung des Ergebnisses für relaxierte Entscheidungsvariablen (bspw. für die Regelung auf dem 3,7-ten Boden) ist die mehrfache Simulation erforderlich. Die möglichen Böden für die Regelung des Temperaturprofils können jedoch bereits aus ingenieurtechnischem Verständnis auf die Böden

1-5 beschränkt werden. Aufgrund der geringen Dimension der möglichen Realisierungen, mit $\dim(\mathbf{Y}_k^{sens}) = 5$, wurde das Problem (6.1) auf die Wahl von Feedboden und Rücklaufverhältnis reduziert. Das relaxierte Problem weist damit $1 + 10 = 11$ kontinuierliche Variablen auf und wird 5-mal gelöst (Tab. 6.2). Das Optimum ergibt sich aus dem Vergleich der Ergebnisse für die möglichen Realisierungen von $\mathbf{Y}_k^{sens}$.

Tabelle 6.2: Startwerte für die Optimierungsläufe für $\mathbf{Y}_k^{sens} = 1$; mit $k = 1, \dots, 5$

$$R = 1 \quad \tilde{\mathbf{Y}}_i^{Feed} = 0,1; \quad \forall i \in \mathbf{D}^{Feed}$$

Abbildung 6.1 links zeigt die Ergebnisse der sequentiellen Optimierungen für $\mathbf{Y}_2^{sens} = 1$. Schon für die erste Optimierung (vollständig relaxiertes Problem mit $\nu_i^2 = 0$) wird die optimale Feedzugabe im Abtriebsteil der Kolonne identifiziert. Für die zunehmende Verschärfung ergibt sich schließlich mit $\nu_i^2 = 0,5$ (vollständig diskrete Entscheidung) der Feedboden 10 als Optimum. Die zunehmende Verschärfung der Nebenbedingungen ist mit einer Verschlechterung der Zielfunktion verbunden. So steigt in Abbildung 6.1 links die notwendige Heizleistung $\dot{Q}_{Sumpf}$ um $\approx 2-3\%$, da die Wahl eines einzelnen Feedbodens weniger optimal ist, als die Feedzufuhr über mehrere Böden.

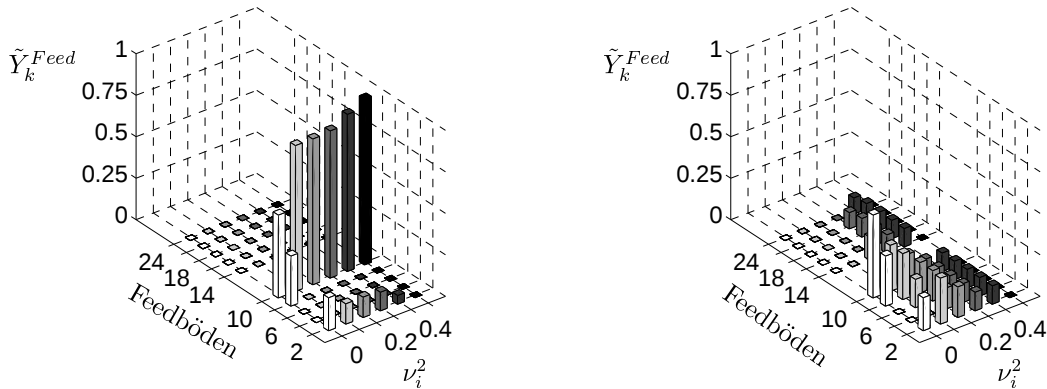


Abbildung 6.1: Optimierungsläufe für $\nu_i^2 = [0 : 0,1 : 0,5]$, $\forall i \in \mathbf{D}^{Feed}$ und die Startwerte aus Tab. 6.2, **links**: erfolgreiche Konvergenz für $\mathbf{Y}_2^{sens} = 1$ bei $\tilde{\mathbf{Y}}_{10}^{Feed} = 1$; **rechts**: die zunehmende Verschärfung zwingt das Ergebnis in das unzulässige Gebiet für $\mathbf{Y}_3^{sens} = 1$

Abbildung 6.1 rechts zeigt das Ergebnis der Optimierungen für $\mathbf{Y}_3^{sens} = 1$. Für die zunehmende Verschärfung der Nebenbedingungen wird hier der Feed im gleichen Verhältnis auf allen Böden zugegeben. Während die Variante der Feedzugabe für $\nu^2 = 0,3$ noch zulässig ist, wird sie für $\nu^2 = 0,4$ bereits unzulässig. Die verwendeten SQP-Algorithmen waren nicht in der Lage, ausgehend von diesem Startwert eine zulässige Lösung zu ermitteln. Der beschriebene Fall trat in mehr als 50 % der Optimierungsläufe auf. Um zulässige Lösungen zu

erhalten, waren hier heuristische Anpassungen der Startwerte und der Schrittweiten $\nu_{i+1}^2 - \nu_i^2$ notwendig.

Der in dieser Arbeit genutzte Ansatz zur Relaxierung diskreter Entscheidungen hat den schon beschriebenen Nachteil der Erzeugung eines stark nicht-konvexen Lösungsraumes. Es wird eine Vielzahl abgeschlossener Lösungsräume definiert, welche für die zunehmende Verschärfung von ν_i^2 teilweise unzulässig werden. Die Lösung mit den hier verwendeten SQP-Algorithmen war stark vom Startwert abhängig und die Optimierungsläufe wiesen ein schlechtes Konvergenzverhalten auf. Diese Nachteile könnten durch die Verwendung globaler Optimierungsverfahren beseitigt werden (Stein et al., 2004).

6.2 Lösung ohne Berücksichtigung von Modellunsicherheiten

Die Optimierungsergebnisse für die möglichen Regelungsböden der Temperaturfront sind in Abbildung 6.2, links dargestellt. Der minimale Energieeinsatz ergibt sich erwartungsgemäß für eine niedrige Lage der Temperaturfront im Abtriebsteil. Bemerkenswert ist, dass auch für die Temperaturregelung auf dem 1. Boden die Anforderungen an die Sumpfreinheit mit $x_{Ac}^{Sumpf} \leq 0,30 \text{ mol\%}$ noch übererfüllt werden. Dagegen liegt die Kopfreinheit aufgrund der kontinuierlichen Entscheidungsvariable Rücklaufverhältnis an der Beschränkung $x_{Ac}^{Kopf} = 63,2 \text{ mol\%}$. Die optimale Feedzugabe auf dem 8.ten Boden widerspricht den Erwartungen, da seine Zusammensetzung der Kopfkonzentration näher ist (siehe auch Kap. 4.5.1). Die vergleichsweise niedrige Feedzugabe lässt sich auf die relativ hohe Stufenzahl der Kolonne, bezogen auf die geforderte Trennaufgabe zurückführen. Die ermittelten optimalen Ergebnisse

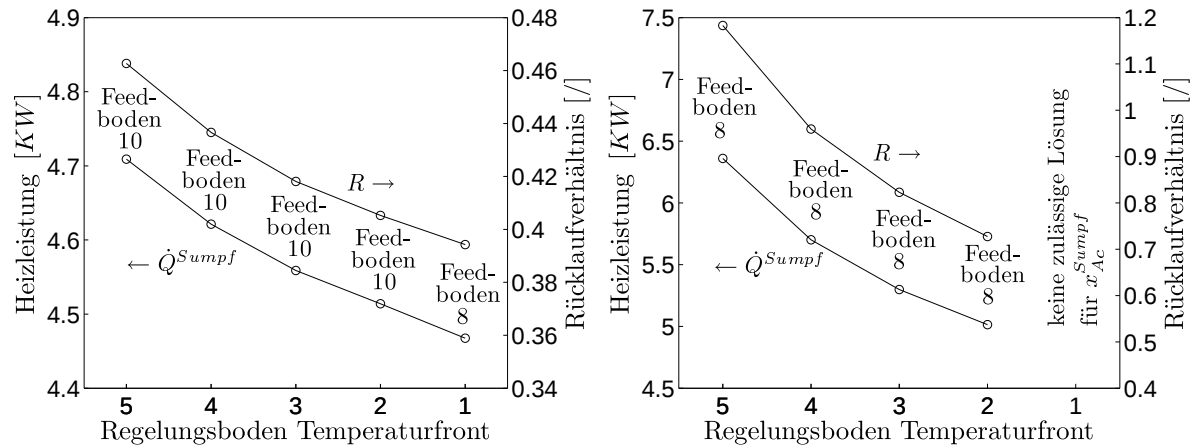


Abbildung 6.2: **links:** Nominale Ergebnisse der deterministischen Optimierung für die fünf möglichen Regelungsböden der Temperaturfront im Abtriebsteil, **rechts:** Robuste Ergebnisse der stochastischen Optimierung für die fünf möglichen Regelungsböden der Temperaturfront im Abtriebsteil

wurden an der Anlage implementiert. In Abbildung 6.3 sind die vorhergesagten modellbasierten Ergebnisse und die experimentellen Daten für den Temperatur- und Konzentrationsverlauf

dargestellt. Für die experimentelle Umsetzung der optimalen nominalen Entscheidungen waren sowohl Feedmengenstrom als auch Feedkonzentration höher als ursprünglich (im Modell) angenommen (siehe Tab. 6.4, nominales Ergebnis). Es resultieren Abweichungen, welche vor allem beim Vergleich des Konzentrationsprofils deutlich werden (Abb. 6.3). Aufgrund der ge-

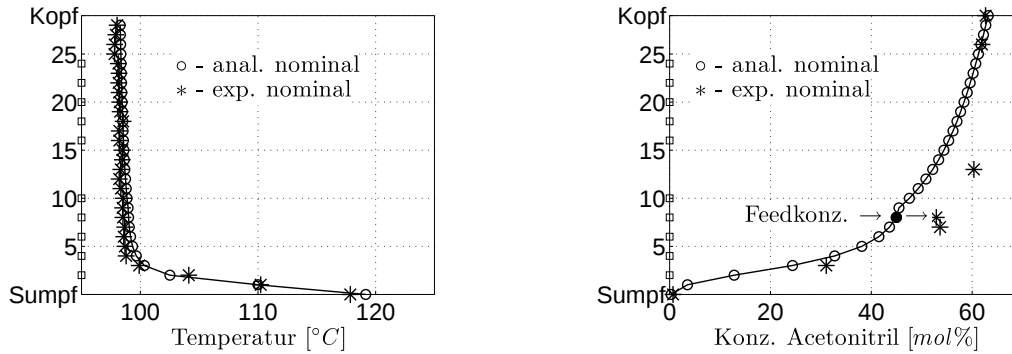


Abbildung 6.3: Optimaler (nominaler) Arbeitspunkt als Lösung von Problem (6.1); Rücklaufverhältnis $R \approx 0,41$; Regelboden der Temperaturfront 1 und Feedboden 8; die Ungenauigkeiten der experimentell gemessenen Konzentrationen entsprechen $\pm 0,5 \text{ mol\%}$

nannten Abweichungen werden die Produktspezifikationen im realen Betrieb für die ermittelte Strategie in der Praxis nicht erfüllt (Tab. 6.4, nominales Ergebnis).

6.3 Untersuchung zum Einfluß von Unsicherheiten auf das Optimierungsergebnis

Bisher blieben die Auswirkungen von Modellunsicherheiten bei der Ermittlung optimaler Entscheidungen unberücksichtigt, was letztendlich zur Verletzung der Produktspezifikationen im realen Betrieb führte. Die Unsicherheiten werden als normalverteilte Modellparameter $\xi \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$ charakterisiert. Damit wird die Robustheit modellbasierter Entscheidungen aufgrund der Wahrscheinlichkeit für die Einhaltung der Produktspezifikationen charakterisiert.

Die unsicheren Parameter sind in Tabelle 6.3 aufgelistet. Die unsicheren Feedbedingungen wurden an die Tagesschwankungen eines industriellen Destillationsprozesses angepasst (Wozny und Jeromin, 1991). Die geregelte Feedtemperatur kann dabei als konstant angesehen werden. Weiterhin wurden die an der Technikumsanlage ermittelten stationären Betriebschwankungen als unsichere Variablen berücksichtigt. Sie kennzeichnen die Reglerperformanz der Basisregler bei leichten Störungen.

In Abbildung 6.4 sind die theoretischen Auswirkungen jeder einzelnen Unsicherheit auf das nominale Optimierungsergebnis dargestellt. Während für das Kopfprodukt sämtliche berücksichtigten Unsicherheiten eine Verletzung der Spezifikation verursachen, können für das

Tabelle 6.3: Unsicherheiten der Parameter und Betriebsvariablen (die Unsicherheiten sind als $\pm 3\sigma$ Intervall angegeben)

Unsichere Parameter		
$\zeta_w = 1,5 \pm 1$	$\eta^A = 0,45 \pm 0,24$	$\eta^V = 0,45 \pm 0,24$
Unsichere Randbedingungen		
$F^{Feed} = 15 \pm 4,5 \text{ ltr/h}$	$x_{Ac}^{Feed} = 45 \pm 12 \text{ mol\%}$	
Unsichere Betriebsvariablen		
$p^{Kopf} = 2 \pm 0,030 \text{ bar}$	$T^{sens} = 110 \pm 7^\circ C$	
$(\Delta T)_{UK} = 70 \pm 9^\circ C$	$R = R^* \pm 0,02$	

Sumpfprodukt die Unsicherheiten teilweise durch die Übererfüllung der Produktspezifikation kompensiert werden². Allgemein wirken sich Schwankungen der geregelten Temperaturfront am stärksten auf die Sumpfreinheit aus. Neben der Feedkonzentration s_{Ac}^{Feed} beeinflussen die unsicheren Bodenwirkungsgrade im Verstärkungs- und Abtriebsteil η^V, η^A vor allem die Kopfkonzentration. Die Strategie des festeingestellten Rücklaufverhältnisses R erweist sich damit als weniger robust bezüglich der Einhaltung der Kopfreinheit als die Ersatzregelung der Temperaturfront bezüglich der Einhaltung der Sumpfreinheit. Schließlich wird der Einfluss der Güte der Kopfdruckregelung auf die Kopfkonzentration deutlich (siehe auch Kap. 4.4.1).

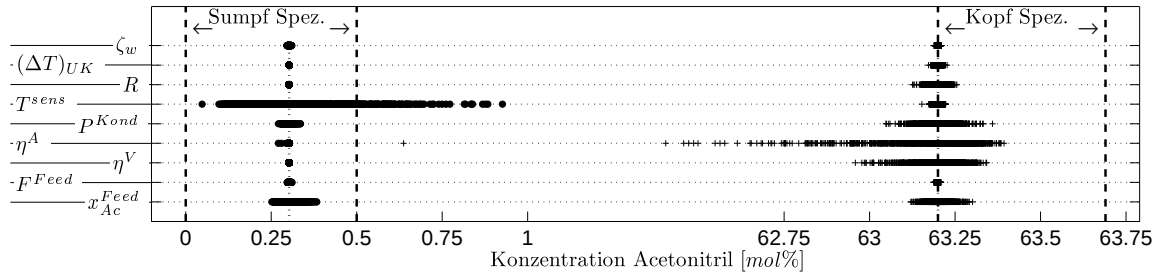


Abbildung 6.4: Untersuchungen zum theoretischen Einfluss der einzelnen Unsicherheiten auf die Produktreinheiten für die nominalen optimalen Entscheidungen, Darstellung durch Monte-Carlo-Sampling mit 1000 *samples*

Der Vergleich der Verteilungen mit den approximierten Verteilungen in Abbildung 4.14 zeigt, dass die Annahme der Gaussverteilung der Ausgangsgrößen gerade für die Beschreibung der Verteilung der Produktreinheiten unzureichend ist.

²Das konservative Ergebnis resultiert aus der diskreten Entscheidung bezüglich der Lage der Temperaturfront in Gleichung (6.1).

6.4 Lösung mit Berücksichtigung von Modellunsicherheiten

Im Folgenden wird das Optimierungsproblem (6.1) unter der Berücksichtigung der einflussreichsten Unsicherheiten gelöst. Ziel ist die Berechnung eines robusten Arbeitspunktes, der die Einhaltung der Produktbeschränkungen garantiert. Um die Robustheit zu garantieren ist eine Korrektur der nominalen Entscheidungen (auch *back-off*, siehe Kap. 3.2.4) notwendig. Dies entspricht einem Mehraufwand an Heizenergie. Dieser Mehraufwand soll nur so gering ausfallen, wie es nötig ist, um die Modellunsicherheiten und ihre Auswirkungen auf die Produktreinheiten zu kompensieren.

Für die Lösung wurde der im Kapitel 3.3.6 beschriebene Ansatz verwendet. Mit der Vorgabe der Temperatur T^{sens} ergibt sich die Heizleistung aus den Modellgleichungen und ist damit ebenfalls unsicher mit unbekannter Verteilung. Um die aufwendige Berechnung des Erwartungswertes der Heizleistung für die Auswertung der Zielfunktion zu umgehen, wird diese nicht im Optimierungsproblem betrachtet und durch das Rücklaufverhältnis ersetzt (Gl. (6.3)). Dieses ist eine Entscheidungsvariable und daher deterministisch. Es wird dabei die Annahme getroffen, dass das Ergebnis mit minimalem Rücklauf dem energieminimalen Betrieb entspricht. Die Einhaltung der Produktspezifikationen wird separat mit der entsprechenden Wahrscheinlichkeit $\alpha_{[1,2]} = 95\%$ gefordert.

$$\begin{aligned}
 \min_{R, \mathbf{Y}_l^{Feed}, \mathbf{Y}_k^{sens}} \quad & J = R \\
 \text{so dass} \quad & \xi = [T^{sens}; \eta^{[A,V]}; x_{Ac}^{Feed}]^T; \quad \text{siehe Tab. 6.3} \\
 & Pr_1 \left\{ x_{Ac}^{Kopf} \geq 63,2 \text{ mol}\% \right\} \geq \alpha_1 = 95\% \\
 & Pr_2 \left\{ x_{Ac}^{Sumpf} \leq 0,5 \text{ mol}\% \right\} \geq \alpha_2 = 95\% \\
 \text{und} \quad & \text{disjunktive NB aus Gl. (6.1)}
 \end{aligned} \tag{6.3}$$

Neben den Schwankungen der Temperaturfront T^{sens} wurden die Bodenwirkungsgrade η^A und η^V als unsichere Größen berücksichtigt. Letztere wurden zu einem unsicheren Parameter zusammengefasst, wodurch sich der Rechenaufwand erheblich reduzieren lässt (Kap. 3.3.6). Die ebenfalls berücksichtigte Unsicherheit der Feedkonzentration bedeutet nicht nur Schwankungen der Acetonitrilkonzentration, sondern auch der Wasserkonzentration $x_{Wa}^{Feed} = f(x_{Ac}^{Feed})$. Zusätzlich ist der Einfluss der Feedkonzentration auf den Feedmolenstrom $F^{Feed}[\text{mol}\%] = f(x_{Ac}^{Feed})$ zu berücksichtigen. Die zweite Abhängigkeit resultiert aus der Diskrepanz der molaren Modellgleichungen und der volumetrischen Mengenregulierung in der Praxis (Volumenstromregelung des Feeds) und wurde bereits in Fieg (1996) diskutiert. Die obengenannten Beziehungen und die entsprechenden Sensitivitäten werden in der Simulationsebene aufgelöst. Damit sind im Optimierungsproblem keine zusätzlichen Abhängigkeiten zu berücksichtigen.

Das Ergebnis von Problem (6.3) ist in Abbildung 6.2 rechts gezeigt. Für die Regelung der Temperaturfront auf dem ersten Boden konnte hier keine zulässige Lösung gefunden werden.

Daher entspricht der energie-minimale Betrieb der Regelung auf dem Kolonnenboden Nr. 2.

Die robusten Entscheidungen wurden wieder an der Anlage implementiert (Abb. 6.5). Die modellbasierten Daten ergeben sich durch Verwendung der Erwartungswerte der unsicheren Parameter. Die experimentellen Daten stellen Mittelwerte des stationären Betriebs dar. Es

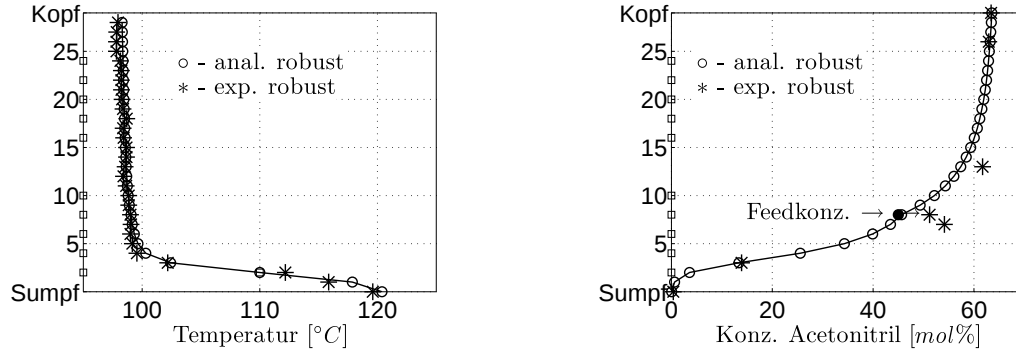


Abbildung 6.5: Optimaler robuster Arbeitspunkt als Lösung von Problem (6.3); Rücklaufverhältnis $R \approx 0,74$; Regelboden der Temperaturfront 2 und Feedboden 8; die Ungenauigkeiten der experimentell gemessenen Konzentrationen entsprechen $\pm 0,5 mol\%$

wird deutlich, dass auch hier falsche Annahmen bezüglich der Feedkonzentration getroffen wurden. Gleiches gilt auch für den experimentellen Feedmengenstrom mit $F^{Feed} = 16 ltr/h$. Der Vergleich mit Abbildung 6.3 zeigt sowohl für den modellbasierten, als auch den experimentellen Verlauf des Konzentrationsprofils eine deutliche Verbreiterung bzw. Verschiebung in Richtung beider Produktkonzentrationen. Die gemessenen Produktkonzentrationen lagen für den robusten Betrieb innerhalb der Spezifikation³.

In Tabelle 6.4 sind die Ergebnisse für die nominale und robuste Arbeitspunktoptimierung gegenübergestellt. Die relativ hohe Robustheit der modellbasierten Entscheidungen mit $\alpha_{[1,2]} = 95\%$ bedeutet einen erhöhten Energiebedarf, welcher für das Experiment bei $\approx +14\%$ lag.

In Abbildung 6.6 links ist der Einfluss der geforderten Robustheit der modellbasierten Entscheidungen auf das Optimierungsergebnis dargestellt. Hier wird die Wahrscheinlichkeit für die Einhaltung der Kopfreinheit variiert. Dies hat Auswirkungen auf das notwendige Rücklaufverhältnis und damit auf die aufzubringende Heizleistung. Rechts sind die für den nominalen und robusten Fall berechneten theoretischen Konzentrationen über einer der drei berücksichtigten unsicheren Größen, hier $\eta^{A,V}$, aufgetragen. Während im nominalen Fall (keine Berücksichtigung von Unsicherheiten, Rechnung mit den Erwartungswerten) nur ca. 50 % der Produktreinheiten die Spezifikation erfüllen, sind es im robusten Fall 95 %. Die stark nichtlineare Beziehung von Ein- und Ausgangsgrößen wird auch hier deutlich.

³Durch den höheren Rücklaufstrom steigt die Belastung der Kolonne. Dies bewirkt ebenfalls einen positiven Effekt auf die Trennleistung (Vgl. Abb. 4.13). Dieser Einfluss wurde hier nicht berücksichtigt.

Tabelle 6.4: Ergebnisse der Arbeitspunktoptimierung ohne (nominal) und mit (robust) Berücksichtigung von Modellunsicherheiten (der analytische Wert $\dot{Q}^{Sumpf}$ ist ohne Wärmeverlust $\Delta\dot{Q}^V$ gerechnet)

	nominales Ergebnis		robustes Erg. ($\alpha_{[1,2]} = 95\%$)	
	analytisch	experimentell	analytisch	experimentell
$x_{Ac}^{Kopf} \geq 63,2$	[mol%] 63,2	$62,7 \pm 0,5$	63,6	$63,4 \pm 0,5$
$x_{Ac}^{Sumpf} \leq 0,5$	[mol%] 0,3	$0,69 \pm 0,5$	0,05	$0,38 \pm 0,5$
$x^{Feed} [mol\%]$	45,0	$53,0 \pm 0,5$	45,0	$51,2 \pm 0,5$
$F^{Feed} [ltr/h]$	15	16	15	16
$\dot{Q}^{Sumpf} [KW]$	$4,48 + 0,31$	5,55	5,56	6,32
$R [l]$	0,41	0,4	0,74	0,72

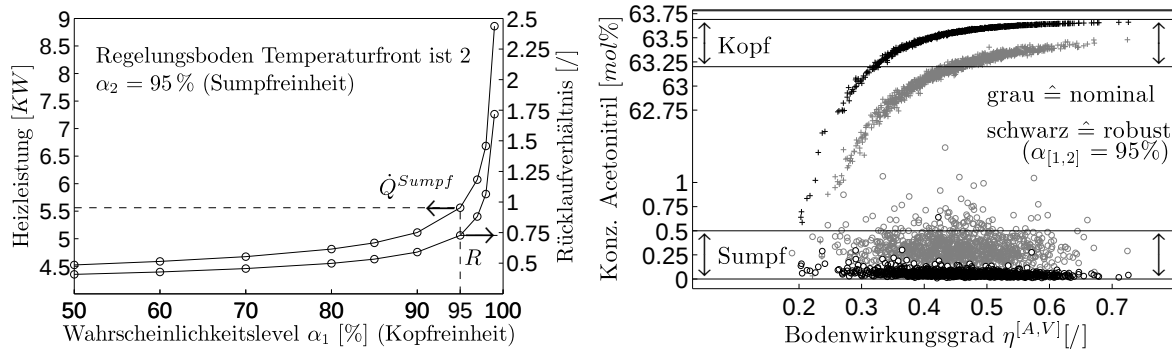


Abbildung 6.6: **links:** Modellbasierte Entscheidungen als Funktion der geforderten Wahrscheinlichkeit für die Einhaltung der Kopfreinheit, **rechts:** Berechnete Produktreinheiten über dem (zusammengefassten) Bodenwirkungsgrad $\eta^{[A,V]}$ für die nominale Lösung und den robusten Fall mit $\alpha_{[1,2]} = 95\%$

7 Visualisierung modellbasierter Prozessdaten

Im Kapitel 4-6 wurden modellbasierte Verfahren als Unterstützungswerkzeuge für die Überwachung und Betriebsführung einer Destillationskolonne theoretisch und experimentell eingesetzt. Dabei wurden die wesentlichen Einsatzgebiete modellbasierter Techniken: Softsensoren, modellbasierte Regelung und stationäre Arbeitspunktoptimierung abgedeckt (Vgl. Abb. 2.1). Weiterhin wurde gezeigt, welchen Einfluss die Güte der den Verfahren zugrundeliegenden Modelle auf die Ergebnisunsicherheit bzw. die Ergebniswahrscheinlichkeit modellbasierter Daten hat. Nach einer Zusammenfassung der Ergebnisse (Kap. 7.1) wird die Entwicklung von Prototypen für die Visualisierung der erzeugten modellbasierten Daten beschrieben (Kap. 7.2). Ausgangspunkt bilden die Ergebnisse des Arbeitstreffens zur Sammlung von Gestaltungsrichtlinien und ersten Visualisierungsvorschlägen (siehe Kap. 2.5.1). Kapitel 7.3 ist der Prototype-nevaluation gewidmet.

7.1 Praktische Bedeutung der Ergebnisunsicherheit modellbasierter Daten

Die in Kapitel 4-6 diskutierten modellbasierten Systeme erlauben die explizite Berücksichtigung der Ergebnisunsicherheit modellbasierter Daten. Die Daten können dabei sowohl einen rein informativen Charakter besitzen (passiver Einsatz der Systeme) als auch konkrete Prozessführungsentscheidungen bedeuten (aktiver Einsatz der Systeme). Für den passiven Einsatz modellbasierter Systeme ist die Ergebnisunsicherheit der Daten hinsichtlich folgender Faktoren relevant:

- Für die Ermittlung modellbasierter Daten ist sowohl die Güte des Modells als auch der verwendeten Messdaten zu berücksichtigen¹. Modellbasierte Daten liefern häufig redundante/zusätzliche Informationen zu einer bereits gemessenen Prozessgröße. Durch den Vergleich ist die Identifikation und ggf. Korrektur fehlerhafter Messungen oder Modellaussagen möglich (bspw. Kap. 4.5.1: korrigierte Durchflussmenge in Abb. 4.10).
- Die Identifizierbarkeit und Qualität modellbasierter geschätzter bzw. nicht-messbarer Prozessgrößen hängt von deren Sensitivität gegenüber Messdaten und der Korrelation mit weiteren geschätzten Prozessgrößen ab. So entstehen sehr unterschiedliche Er-

¹Auf diese Weise werden auch für inkonsistente Messdaten Ermittlungsergebnisse erzielt (siehe auch Kap. 4.5.2).

gebnissunsicherheiten auch bei der Verwendung des selben Modells (bspw. Kap. 4.5.2: geschätzte Parameter Gl. (4.9) und Konzentrationen Abb. 4.15).

- Außerhalb des Gültigkeitsbereichs von Modellen bzw. für auftretende nicht-berücksichtigte/nicht-modellierte Effekte treten strukturelle Unsicherheiten auf. Diese können anhand des Verlassens eines erwarteten Wertebereichs geschätzter Parameter identifiziert werden. Damit können auch Rückschlüsse auf ein verändertes Betriebsverhalten bzw. ein Fehlverhalten gezogen werden (bspw. Kap. 5.3.3: geschätzte Verdampfungswärme in Abb. 5.6 oder Kap. 4.5.1: geschätzte Parameter in Abb. 4.13 jeweils für unterschiedliche Belastungsbereiche)

Beim aktiven Einsatz modellbasierter Systeme beeinflussen modellbasierte Daten unmittelbar das Prozessgeschehen. Sie können sowohl konkrete Entscheidungen bedeuten (Sollwerte) als auch eine Datengrundlage konventioneller bzw. modellbasierter Automatisierungssysteme sein. Die folgenden Punkte gelten daher zusätzlich zu den obengenannten Faktoren.

- Die Qualität der Prozessführung hängt stark von der Güte des verwendeten Modells ab, da basierend auf der stationären und dynamischen Vorhersage der ermittelten Daten Entscheidungen getroffen werden. Der Vergleich von geplanter Beeinflussung von Prozessgrößen und der tatsächlich eintretenden Veränderung liefert ein direktes Maß für die Modellgüte (bspw. Kap. 6.2: stationäre Arbeitspunktoptimierung, Abb. 6.3 und Kap. 5.4.2: zeitliche Vorhersage der Prozessgrößen, Abb. 5.7).
- Modellbasierte Systeme werden bevorzugt auf komplexe und/oder gekoppelte Prozesse angewendet. Die modellbasierten Entscheidungen resultieren dabei aus der Berücksichtigung unterschiedlicher Kriterien, welche konkurrierende Ziele mit eigenen Prioritäten beeinhalteln können. Die kausalen Zusammenhänge, welche die letztliche Entscheidung beeinflussen, sind nicht immer nachvollziehbar (bspw. Kap. 5.4.2: Verlauf der Entscheidungsgrößen in Abb. 5.8 und 5.9 und Kap. 6.2: Entscheidungsvariablen für die stationäre Optimierung in Abb. 6.2).
- Die Einhaltung von Beschränkungen hat höchste Priorität. Modellbasierte Entscheidungen repräsentieren daher immer ein bestimmtes Risiko für die Verletzung von Beschränkungen und damit ein bestimmtes Maß an Robustheit (bspw. Kap. 6.4: stationäre robuste Arbeitspunktoptimierung, Abb. 6.4 und Abb. 6.6)).

Sowohl die Korrektheit bereitgestellter Informationen als auch die Korrektheitswahrscheinlichkeit generierter Entscheidungen liefern ein Maß für die Beurteilung der Zuverlässigkeit modellbasierter Automatisierungssysteme (siehe auch Def. 3.1). Die Bewertungskriterien resultieren aus den Anforderungen der Prozessführung.

7.2 Prototypenentwicklung für das Kurvenbild

Prototypen stellen die Gesamtheit oder einen Teil eines Produktes oder Systems dar und können für dessen Bewertung verwendet werden (DIN EN ISO 13407, 1999). Im Rahmen dieser Arbeit wurde die Entwicklung funktional ausgereifter Prototypen am Beispiel des Kurven- bzw. Trendbildes (Kap. 2.5.2) verfolgt. Die Darstellungsformen wurden im emulierten Prozessleitsystem am konkreten Beispiel der modellbasierten Regelung (Kap. 5) umgesetzt. Damit wird die Komplexität abgebildet, welche den betrachteten APC-Systemen eigen ist. Weiterhin wird der Zugang zu Operateuren ermöglicht, welche einerseits Schwierigkeiten in der Bewertung neuer Technologien haben, die ihnen nur in abstrakter Form präsentiert werden, und denen andererseits klassische (nicht funktionale) Prototypen nicht überzeugend genug erscheinen (Alavi, 1984; Burmester et al., 2000).

7.2.1 Auswahl von Gestaltungsvarianten

Im Rahmen der Auswertung der Gestaltungsvorschläge für das Kurvenbild (Ergebnisse des explorativen Arbeitstreffens, Kap. 2.5.2) wurde zunächst eine Bestandsaufnahme existierender Richtlinien und etablierter Darstellungsformen getätigt. Besondere Aufmerksamkeit galt der Darstellung vorausberechneter (zukünftiger) Prozessdaten sowie der Ergebnisunsicherheit. Umfangreiche Richtlinien zu Prozessgrößentrends finden sich in VDI/VDE 3699, Blatt 1 (2005) bis VDI/VDE 3699, Blatt 6 (2002). Überraschenderweise findet sich hier auch ein Hinweis zur Anzeige zukünftiger Prozessgrößen, sogenannter Prädiktorkurven (VDI/VDE 3699, Blatt 4, 1997). Die Entwicklung von Prozessgrößen wird vor einem mit der Zeit zunehmend ausgegrauten Hintergrund dargestellt. Zusätzlich ist der voraussichtliche Trend durch einen Wechsel der Linienart, von durchgezogen zu gestrichelt, gekennzeichnet. Die DIN-Normen liefern dagegen eher allgemeine Informationen zu Anzeigeeinrichtungen, Darstellungen im Koordinatensystem, Symbolen und Kennbuchstaben (DIN 33414-4, 1990; DIN 461, 1973; DIN 19227-2, 1991; DIN EN 60614, 1997; DIN 4844-1, 2005). Schließlich wurden auch kommerzielle Bedienoberflächen diverser Hersteller von Leitsystemen analysiert. Hier orientiert sich die Gestaltung weitgehend an den genannten Richtlinien. Allerdings werden die Produkte mit einer möglichst flexiblen Darstellung beworben. Damit obliegt es teilweise dem Nutzer, seine Oberfläche richtlinienkonform zu konfigurieren. Die Möglichkeit der Anbindung von Simulations- und Optimierungsumgebungen ist durch die Vielfalt existierender Kommunikationsschnittstellen bereits Standard moderner Leitsysteme (Enste und Uecker, 2002). Damit verbunden ist auch die Möglichkeit der Nutzung und Darstellung modellbasierter Prozessdaten in der Prozessführung bzw. im BuB. Darstellungsformen wurden in diesem Zusammenhang nicht gefunden.

Im Folgenden wurden die sich in verschiedenen Teilaspekten unterscheidenden neuen Gestaltungsvorschläge für die Visualisierung modellbasierter Prozessdaten zunächst mit der Me-

thode morphologischer Kasten, einer systematischen Strukturanalyse, den konventionellen Darstellungsformen gegenübergestellt (Abbildung 7.1). Die Verletzung bestehender Richtlinien stellte dabei ein Ausschlusskriterium dar. Alternativen, welche einem Standard zugeordnet werden können, sind als Erweiterung (nicht als Ersetzung) der konventionellen Darstellungsformen im Kurvenbild zu sehen. Diese Alternativen wurden im kleinen Kreis priorisiert und Kandidaten für die prototypische Implementierung gewählt.

7.2.2 Ergebnisse für die Darstellung modellbasierter Daten

Wie in Abbildung 7.1 gezeigt, lassen sich die Kandidaten nach dem Darstellungsort und der Darstellungsart unterscheiden (siehe auch Anhang 9.5.1).

- Darstellungsorte:
 - Kurvenbeschriftungsfeld: Das Kurvenbeschriftungsfeld ist im oberen Bildschirmbereich positioniert. Es enthält numerische Angaben über den Wert einer jeden Kurve K_i zum Zeitpunkt t mit $i = 1, \dots, 6^2$.
 - Kurvenfeld: Das Kurvenfeld nimmt den Hauptteil der Bedienoberfläche ein. Es beinhaltet grafische Angaben über den Kurvenverlauf $K_i(t)$.
- Darstellungsarten:
 - Absolute Angabe - Ergebnisunsicherheit $EU_i(t)$: Die Diagrammdaten werden als absolute Werte wiedergegeben, was einer direkten Darstellung der Genauigkeit über die „Streuung der Kurvenbreite“ im Kurvenfeld bzw. über numerische Werte im Kurvenbeschriftungsfeld entspricht. Zur grafischen Darstellung im Kurvenfeld stehen hierfür die Elemente Rauschen, Punktwolke, Fehlerbalken und Konfidenzbereich zur Verfügung (Abb. 7.2 links, für detaillierte Informationen siehe auch Anhang 9.5.1). Die Darstellung ergibt sich durch überlagertes Gauß'sches Rauschen bzw. aus der Kennzeichnung der Grenzen des Konfidenzintervalls $EU_i(t) = 6\sigma_i(t)$.
 - Relative Angabe - Ergebniswahrscheinlichkeit $EW_i(t)$: Die Diagrammdaten werden relativ wiedergegeben, was einer indirekten Darstellung der Genauigkeit über Farbtintensitätsskalen im Kurvenfeld bzw. über prozentuale Angaben im Kurvenbeschriftungsfeld entspricht. Zur grafischen Darstellung im Kurvenfeld stehen hierfür die Elemente Verblassen, Einfärben und Ausgrauen zur Verfügung (Abb. 7.2 rechts)³.

Neben den verschiedenen Visualisierungselementen für das Kurvenfeld ergeben sich vier mögliche Kombinationen der Informationsdarstellung (Tab. 7.1).

²6 ist die maximale Anzahl darzustellender Kurven im Kurvenbild (VDI/VDE 3699, Blatt 4, 1997).

³Zur Ermittlung relativer Maße siehe folgendes Kapitel: „Varianten für die relative Darstellung“.

	Alternativen						
Funktionen & Merkmale	Standard	Neuartige Darstellungsformen					
Kurvenfeld							
Kurvendarstellung Softsensor	kein Blinken / Farbwechsel, Codierung belegt	Punktwolke	eigene Codierung	Blinken			
Kurvendarstellung Ergebnisunsicherheit			Farb-gradient / Verblassen	Wechsel der Codierung	Rauschen	Errorbars	Fluten
Position Achsen Werteachse	rechts (Gegenwart) Links (Historie)	Links (Prädiktion)	immer bei t=0	rechts Softsensor	3. Dim. für Ergebnisunsicherheit		
Zeitspannen / Update-Rate / Skalenteilung	30 min / 2 sec / 5 min (Vorgeschichte)	1/2 der Vorgeschichte für Prädiktion	2. Zeitachse Soft/Hard-sensoren				
Hintergrundfarbe Softsensor	dunkel, unbunt, Sättigung (Prädiktion)	Farbwechsel für Prädiktion					
Hintergrundfarbe Ergebnisunsicherheit	dunkel, unbunt, Sättigung (Prädiktion)	Sättigung Softsensor	Sättigung als Funktion der Ergebnisuns.	Ergebnisuns. über Farbcodierung			
Erweiterte Darstellungen	Kurvenlineal (1-2 parallel zur Werteachse)	Kurvenlineal indiziert Simulation/ Historie					
Kurvenbeschriftungsfeld							
Informationen zu Prozessdaten	Kurvenfarbe, Beschreibung, Warnungen	Kennzeichnung Softsensor, Statusanzeige	Daten-grundlage Softsensor				
Numerische Anzeigen	4 Dekaden Genauigkeit	Runden nach Genauigkeit	Anzeige Konfidenz-intervall	Anzeige Varianz			
Funktionalitäten / Buttons	Ein/Aus-blenden von Kurven	Ein/Aus-blenden Softsensoren					
Erweiterte Darstellungen Soft-Sensor	/	Tendenz-richtung per Pfeil	grafischer Schieber für die Zeit				
Erweiterte Darstellungen Ergebnisunsicherheit	/	Balken-diagramm	Torten-diagramm				
Features bei Bildauswahl	Bildwechselzeiten < 2sec	Switch Hard / Softsensor	gedrückter Button für Softsensor	Standard Anwahl Softsensor			
Änderung der Darstellungszeitspanne	Scrollen der Zeitspanne	Scrollen mit Feedback Gegenwart /Prädiktion		Extra Button Prädiktion			

Abbildung 7.1: Morphologischer Kasten zur Analyse der vorgeschlagenen Erweiterungen (soft- und hard-Sensor wird hier synonym für modellbasierte Daten bzw. Messdaten verwendet)

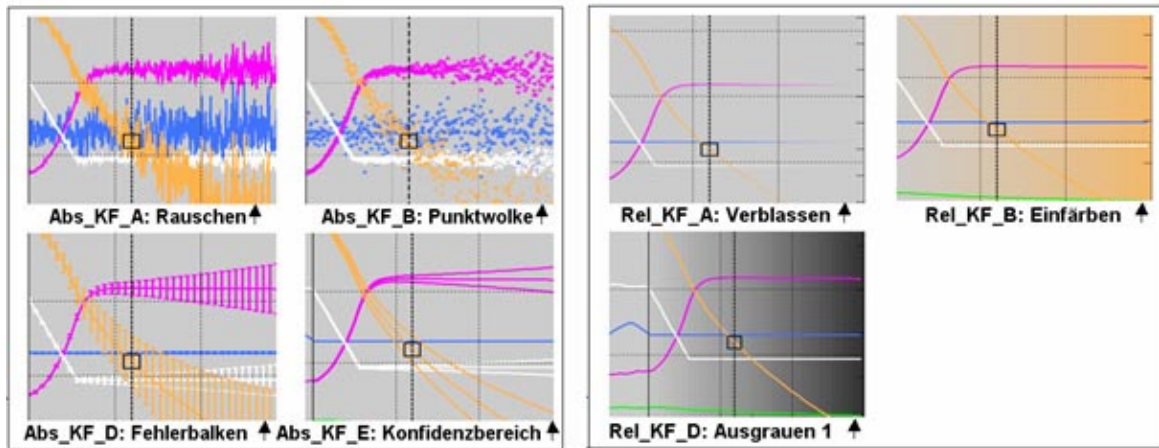
Abbildung 7.2: Absolute (**links**) und relative (**rechts**) Visualisierungselemente im Kurvenfeld

Tabelle 7.1: Mögliche Kombinationen der Informationsdarstellung

Kombination	1	2	3	4
Kurvenfeld	abs.	abs.	rel.	rel.
Kurvenbeschriftungsfeld	abs.	rel.	abs.	rel.

Varianten zur Ermittlung relativer Angaben

Das relative Maß für die Bewertung der Zuverlässigkeit modellbasierter APC-Systeme ist die Ergebniswahrscheinlichkeit (Kap. 3.1.1). Sie ist aus zwei Gründen von Vorteil. Erstens stellt sie ein einheitliches Maß auch für unterschiedliche Prozessgrößen dar (bspw. der Vgl. Güte von Druck und Temperatur). Zweitens sind stochastische Merkmale oft erst hinsichtlich spezieller Kriterien relevant: Wahrscheinlichkeit eines Ausfalls $\rightarrow$ Zuverlässigkeit, Wahrscheinlichkeit der Verletzung von Betriebsgrenzen $\rightarrow$ Robustheit, Wahrscheinlichkeit der Korrektheit einer Aussage $\rightarrow$ Genauigkeit.

Die Robustheit modellbasierter Entscheidungen wurde bereits bezüglich der Ergebniswahrscheinlichkeit für die Einhaltung von Beschränkungen charakterisiert. Für modellbasierte Informationen wurde bisher die Standardabweichung als Maß für die Ergebnisunsicherheit verwendet. Für die Transformation in eine Ergebniswahrscheinlichkeit werden hier zwei mögliche Bezugswerte berücksichtigt:

- Variante a: Naheliegender ist der Bezug der Ergebnisunsicherheit (ausgedrückt über die Streuung bzw. Varianz) auf den Absolutwert der gemessenen Prozessgröße, $\mathbf{EW}_i(t) := 6\sigma_i(t)/K_i(t)$.
- Variante b: Hier wurde der jeweils aktuell vom Nutzer (per „Y-Zoom“) eingestellte Anzeigenbereich der Ordinate $\mathbf{AO}_i$ als Bezugswert genutzt. Es wird davon ausgegangen, dass der Nutzer bewusst den relevanten Anzeigenbereich einer Größe wählt und damit

indirekt eine Angabe zur gewünschten Genauigkeit gibt. Neben der physikalischen Bildschirmauflösung ist für das Ablesen vor allem die Skalenteilung und die Anzahl verfügbarer Gitterlinien entscheidend. Da in VDI/VDE 3699, Blatt 4 (1997) lediglich eine geringe Anzahl an Gitterlinien vorgesehen ist, wurde hier der Bezugswert zu 1/5 des gewählten Ordinatenausschnitts gesetzt, $EW_i(t) := 1 - 6\sigma_i(t) / (AO_i/5)$, mit $EW_i(t) \in [0, 100\%]$.

7.3 Evaluation der Prototypen

Die entwickelten Prototypen wurden zunächst im Rahmen einer heuristischen *usability evaluation* (UE) bewertet. Diese wird im Gegensatz zur klassischen Evaluation nicht mit Nutzern, sondern mit Experten auf dem Gebiet der nutzerzentrierten Systemgestaltung durchgeführt und stellt eine sehr effiziente Möglichkeit dar, Probleme der Gebrauchstauglichkeit zu identifizieren (Nielsen, 1993). Während Nielsen (1993) schon eine Anzahl von 5 Probanden in einer UE für ausreichend hält, gelten 10 Testpersonen in der *usability*-Forschung als anerkannter Kompromiss (Manhartsberger und Musil, 2001). Hier wurden 13 Teilnehmer (im Folgenden *usability*-Experten, Geschlecht: 6 m und 7 w, durchschnittliches Alter: 30 Jahre, durchschnittliche Expertise: 3,6 Jahre), welche bereits am Arbeitstreffen zur Anforderungsanalyse (Kap. 2.5.1) teilgenommen hatten, herangezogen. Der Fokus der Untersuchung lag klar auf der Bewertung der Bedienbarkeit der verschiedenen Prototypen. So wurden die Teilnehmer explizit aufgefordert, Probleme der Gebrauchstauglichkeit zu identifizieren. Weiterhin wurden die einzelnen Visualisierungselemente, die Varianten zur Berechnung der Ergebniswahrscheinlichkeit sowie die 4 möglichen Kombinationen der Informationsdarstellung qualitativ und quantitativ bewertet (Kap. 7.2.2).

Um auch die fachliche Angemessenheit der Prototypen zu bewerten, wurde die Evaluation ein zweites Mal mit 13 Probanden aus der Prozessführungsdomäne (im Folgenden Prozessführungsexperten, Geschlecht: 12 m, 1 w, durchschnittliches Alter: 34 Jahre, durchschnittliche Expertise: 4,9 Jahre) durchgeführt, welche über Erfahrungen mit kommerziellen Leitsystemen hauptsächlich von Laboranlagen des universitären Umfelds verfügen. Beide Evaluationen waren inhaltlich und methodisch identisch. Die zweite wurde jedoch an den Bedürfnissen der Zielgruppe (Operateure) orientiert. So wurden die Teilnehmer gebeten, vor allem anwendungsbezogene Probleme aus ihrer alltäglichen fachlichen Sicht herauszuarbeiten.

Die Evaluationen wurden in Gruppen zu maximal 5 Personen unter Führung eines Versuchsleiters durchgeführt und dauerten jeweils 90 Minuten. Für die UE wurde eine statische Prototypenversion (ohne Aktualisierung des Prozessgeschehens) mit eingeschränkten Funktionen bezüglich der Interaktion genutzt. Damit wurde die Unabhängigkeit vom verfahrenstechnischen Prozess sowie die Kontrollierbarkeit der Evaluationsbedingungen ermöglicht. Die Durchführung der UE erfolgte szenariobasiert (Details im Anhang 9.5.2). Nach einer Einführung in die konventionellen Bedienelemente mussten die Teilnehmer verschiedenen normativen Arbeitsanweisungen unter Einbeziehung von Messdaten und modellbasierten Daten

folgen. Bsp.: „In wieviel Minuten wird der Füllstand L102 erstmals seinen Grenzwert von 85% erreichen? Nutzen sie nur die Informationen des Kurvenfeldes! Würden sie diese Zeit unter Berücksichtigung der Verlässlichkeit der Information korrigieren?“. Oder: „Geben Sie den aktuellen Wert der Kennzahl für den Wärmedurchgang an. Wie genau können Sie den Wert angeben? Nutzen Sie nur die Informationen des Kurvenbeschriftungsfeldes!“. Die Aufgabenstellungen wurden in Gruppen bearbeitet, wobei jeweils eine Person mit dem Prototypen interagierte. Befragungsergebnisse und Anmerkungen wurden von den Teilnehmern während der UE individuell schriftlich festgehalten (siehe Anhang 9.5.2).

7.3.1 Auswertung der heuristischen Evaluationen

Während die *usability*-Experten quantitative Angaben in Form von Präferenzurteilen (Benennung eines Favoriten) abgaben, wurde in der zweiten Evaluation mit den Prozessführungsexperten eine detailliertere Bewertung in Form von Rangreihenfolgen abgefragt. Die quantitativen Daten werden hier vornehmlich deskriptiv bzw. in Form einfacher Säulendiagramme dargestellt, da die Stichprobengröße der UE die Kriterien für eine statistische Überprüfung der erhobenen Daten durch Signifikanztests nicht erfüllt (Bortz, 2005). Die qualitativen Untersuchungsanteile, also Daten in Textform, wurden analysiert und Kategorien zugeordnet.

Ergebnisse der Evaluation mit *usability*-Experten

Die qualitativen Ergebnisse wurden wie folgt kategorisiert:

- *usability*-Probleme (18 mal): Enthält alle *usability*-Probleme, die den Kriterien für die Gebrauchstauglichkeit, entsprechend DIN EN ISO 9241-10 (1996)⁴, zugeordnet werden können, geordnet nach der Häufigkeit der Nennung.
- Sonstiges (4 mal): Beinhaltet selten (einmalig) genannte Probleme.
- Andere Probleme (2 mal): Beinhaltet Probleme außerhalb des Untersuchungsfokus.

Als häufigstes *usability*-Problem wurde die Aufgabenangemessenheit, eine Dialogeigenschaft, die das Unterstützungspotential des Nutzers bei der Erledigung seiner Aufgaben beschreibt, genannt (12 mal). Hier wurden vor allem Probleme mit dem Bedienelement Marker im Kurvenfeld thematisiert. Hauptkritikpunkt war die mögliche Beeinflussung seiner Lesbarkeit und Sichtbarkeit durch die unterschiedlichen absoluten und relativen Darstellungen der Ergebnisgüte modellbasierter Daten. Die häufige Nennung von Problemen in Bezug auf den Marker unterstreicht seine große Bedeutung als Instrument für das Ablesen sowohl im Kurvenfeld als auch im Kurvenbeschriftungsfeld (anhand der numerischen Anzeige). Ebenfalls wurden Nachteile bezüglich redundanter Darstellungen aufgedeckt, welche für Kombination 1 und 4 (siehe Tab. 7.1) auftreten.

⁴Es werden folgende Kriterien genannt: Aufgabenangemessenheit, Selbstbeschreibungsfähigkeit, Erwartungskonformität, Fehlertoleranz, Steuerbarkeit, Individualisierbarkeit, Lernförderlichkeit.

Weiterhin wurden Probleme mit der Erwartungskonformität genannt (6 mal), welche durch eine inkonsistente Dialoggestaltung auftraten. Dies gilt im Besonderen für die Darstellung der Ergebniswahrscheinlichkeit in Kombination 4. Weiterhin lassen sich hier Anmerkungen eines Probanden zuordnen, welcher darauf hinwies, dass der Marker sich entsprechend der Genauigkeit verändern sollte. Die Verknüpfung des „Y-Zoom“ mit der Genauigkeitsangabe (Variante b der relativen Angaben, Kap. 7.2.2) traf auf allgemeines Unverständnis und sorgte teilweise für Verwirrung. So gab ein Proband an, dass ihm der gegenläufigen Effekt der abnehmenden Genauigkeit bei zunehmendem Zoom nicht klar sei.

Die weiteren Nennungen lassen sich hauptsächlich der Steuerbarkeit und Individualisierbarkeit der Gestaltungslösungen zuordnen. Sie wurden hier nicht berücksichtigt, da Fragen der Bedienung und Anpassbarkeit des Kurvenbildes nicht im Fokus der Untersuchungen standen. Anmerkungen, welche offensichtlich durch das relativ große Statistikwissen der Probanden motiviert waren, wurden gleichfalls ignoriert. So sah ein Proband eine Gefahr in der Möglichkeit, dass die (variable) Prozentangabe im Kurvenbeschriftungsfeld zur Annahme verleiten könne, dass das im Kurvenfeld dargestellte Konfidenzintervall ebenfalls variabel sei.

Die quantitativen Ergebnisse sind in Abb. 7.3 rechts dargestellt. Sie werden im Folgenden zusammen mit den Ergebnissen der zweiten UE diskutiert.

Ergebnisse der Evaluation mit Prozessführungsexperten

Die zweite UE mit Probanden aus der Prozessführungsdomäne wurde hauptsächlich mit dem Ziel der Priorisierung der Darstellungsalternativen durchgeführt. Da die Probanden bereits einen starken Bezug zu den Tätigkeiten der Operateure besaßen, war die Diskussion deutlich von eigenen Erfahrungen im Umgang mit Leitsystemen geprägt. Die abgegebenen Bewertungen waren vergleichsweise stark auf die Darstellungsformen bezogen, dafür wurde seltener Bezug auf allgemeine Gestaltungskriterien von Mensch-Maschine-Schnittstellen genommen.

Die quantitativen Ergebnisse geben, im Gegensatz zu den Präferenzurteilen der ersten UE, detailliertere Informationen, da hier neben den Favoriten auch alle weiteren Alternativen bewertet und in Relation zueinander gebracht wurden. Im Folgenden werden häufig genannte qualitative Aussagen den entsprechenden quantitativen Ergebnissen gegenübergestellt (Abb. 7.3). Die aufgeführten Präferenzurteile der *usability*-Experten sind nur bezüglich der gewählten Favoriten vergleichbar.

Ein sehr positives Ergebnis, quantitativ und qualitativ, wurde bezüglich der Kombinationen der Informationsdarstellung erzielt (Abb. 7.3). Klarer Favorit ist die absolute Darstellung der Ergebnisunsicherheit im Kurvenfeld gepaart mit der relativen im Kurvenbeschriftungsfeld. Die Probanden bemerkten, die absolute Darstellungsform im Kurvenbild sei der konventionellen Darstellung am nächsten, die Genauigkeit der Anzeige sei schnell erfassbar sowie leicht und gezielt ablesbar. Weiterhin wurde mehrfach auf die große Bedeutung absoluter Angaben im Betrieb hingewiesen. Damit lässt sich auch der zweite Platz der Kombination 1 (absolute

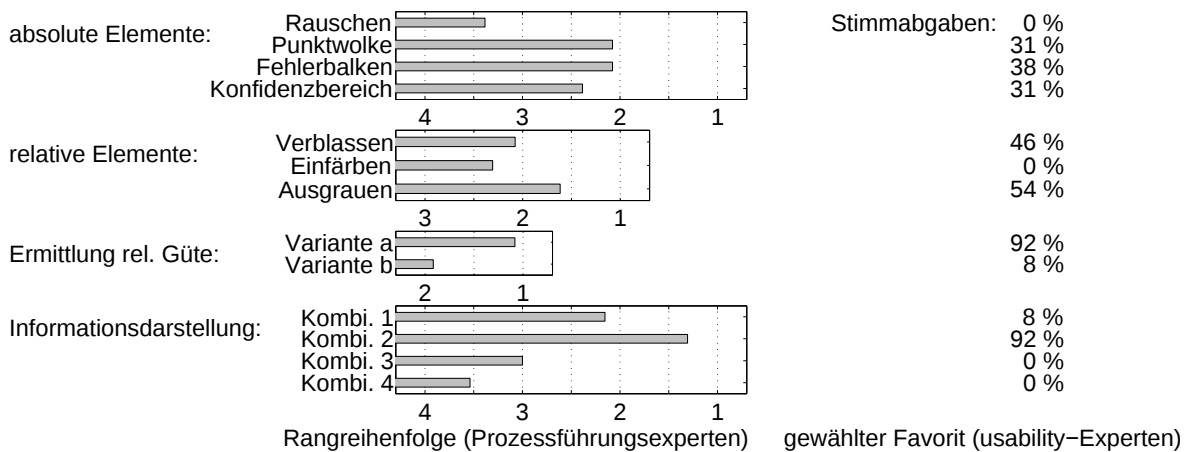


Abbildung 7.3: Ergebnisse der heuristischen Evaluation

Angaben in beiden Darstellungsorten) erklären. Relativen Angaben wurde eher eine ergänzende Funktion in der Informationsdarstellung zugeordnet. Sie wurden positiv bezüglich ihrer Übersichtlichkeit, Eindeutigkeit und Vergleichbarkeit bewertet. Diese Eigenschaften kommen durch die Balkendarstellung im Kurvenbeschriftungsfeld am deutlichsten zum Tragen (7 mal) und lassen im Zusammenspiel mit den absoluten Angaben im Kurvenfeld die sinnvolle und einfache Auswertung zu. Interessant ist dabei, dass dennoch 4 Probanden Probleme bei der Interpretation prozentualer Genauigkeiten angaben.

Das schlechte Abschneiden von Kombination 3 und 4 ist klar auf die Darstellung relativer Angaben im Kurvenfeld zurückzuführen. Diese wird mehrfach als unübersichtlich bezeichnet. Weiterhin führe die individuelle Wahrnehmung von Kontrast und Farbe sowie die fehlenden Skalen oder Referenzpunkte zu sehr subjektiven Einschätzungen. Das Ausgrauen im Kurvenfeld sei intuitiv, hat aber den Nachteil, dass hier nur Informationen zur jeweils angewählten Kurve gegeben werden. Ebenso wie in der ersten UE wurde Variante b, für die Ermittlung der relativen Genauigkeit, fast ausschließlich negativ beurteilt. Es fielen Begriffe wie: verwirrend, unübersichtlich, zu komplex.

Für die absoluten Darstellungselemente im Kurvenfeld konnte kein eindeutiger Favorit identifiziert werden. Klar abgelehnt wurde die Darstellung Rauschen, da hier keine klare Unterscheidung von modellbasierten Daten und Messdaten besteht. Ebenso wurden für alle Darstellungsalternativen Probleme hinsichtlich der übersichtlichen Darstellung für die Überlagerung mehrerer Kurven genannt. Die Punktwolke wurde allgemein als intuitiv für die Darstellung von Ungenauigkeiten bezeichnet. Unklar ist, inwieweit die Entscheidungen von dem relativ hohen mathematischen Grundkenntnissen der Probanden beeinflusst wurden. So wurden die Darstellungen Fehlerbalken und Konfidenzbereich auch wegen der guten optischen Trennung von Erwartungswert und Varianz positiv bewertet. Es ist jedoch fragwürdig, ob die Darstellung des Erwartungswertes eines Ergebnisses für die Vermittlung der Ergebnisunsicherheit

förderlich ist.

Darstellungsfavorit

Die Ergebnisse der Evaluationen mit *usability*- und Prozessführungsexperten zeigen eine sehr gute Übereinstimmung. In Abbildung 7.4 ist der Favorit, mit der Punktwolke als Darstellungselement der absoluten Genauigkeit im Kurvenfeld, dargestellt. Zusätzlich zur zeitlichen Vorhersage der Prozessgrößen (für den Horizont 0–8 min) wird hier die Wärmeübergangskennzahl (blaue Linie) zyklisch anhand der verfügbaren Messdaten (für den aktuellen Messzeitpunkt) ermittelt. Als rein modellbasierte Größe wird sie auch für die Vergangenheit als Punktwolke dargestellt. Die weiße und gelbe Linie stellen Entscheidungsgrößen dar und besitzen daher keine Ergebnisunsicherheit. Weitere (für die Evaluation nicht explizit bewertete) Elemente,

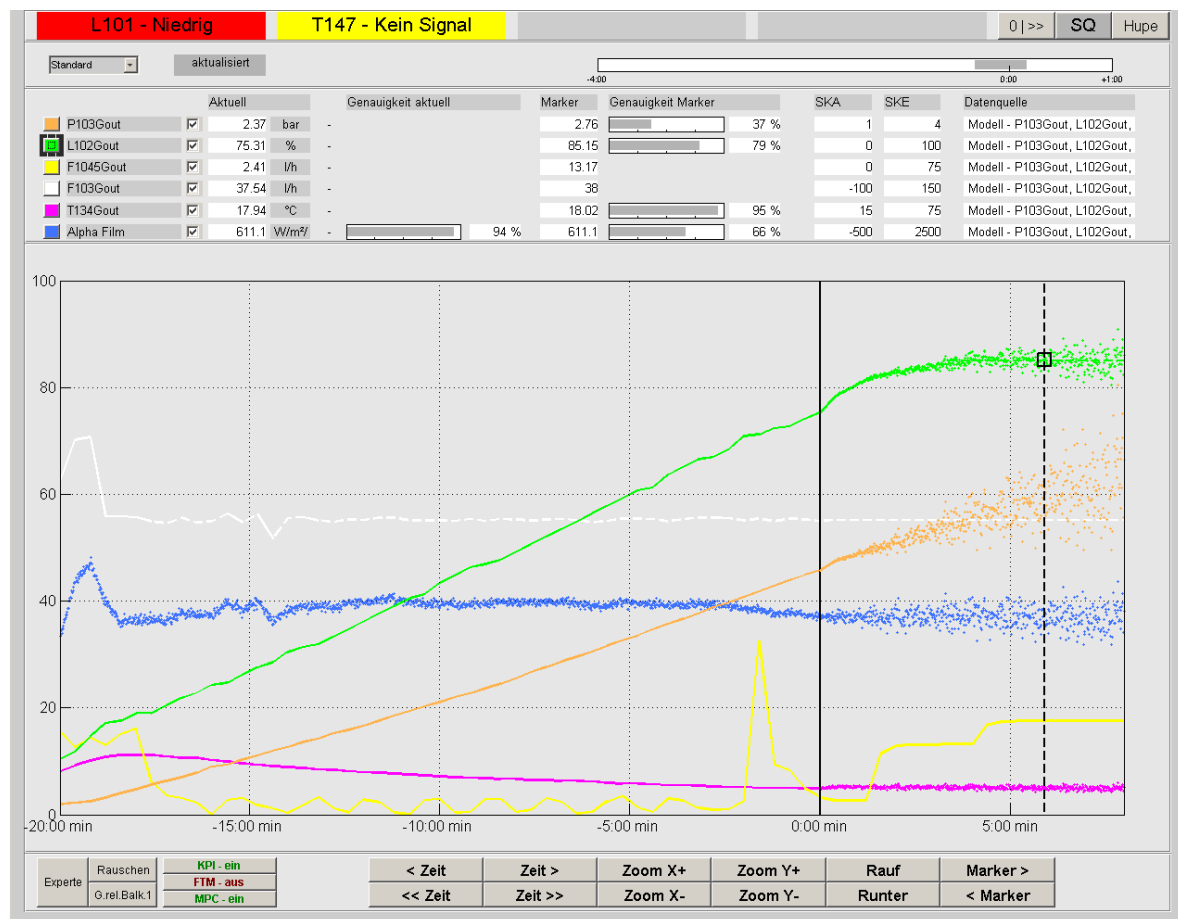


Abbildung 7.4: Kombination der Darstellungen: absolute Genauigkeit im Kurvenfeld (als Punktwolke) und relative Darstellungen im Kurvenbeschriftungsfeld (als Balken bzw. numerisch)

welche die Darstellung modellbasierter Daten anzeigen, sind: die Anzeige der Datengrundlage (Datenquelle) und für die Prädiktion die Erweiterung der Darstellung der Zeitspanne im Titelfeld sowie der Wechsel der Werteachse/Ordinate von rechts nach links.

8 Zusammenfassung und Ausblick

Trotz des hohen Potentials modellbasierter Prozessführungssysteme hinsichtlich der Steigerung der Effizienz von Produktionsprozessen bestehen verschiedentliche Vorbehalte gegen ihre Einführung. Als eines dieser Akzeptanzprobleme wird mangelndes Vertrauen der Nutzer in die Verlässlichkeit dieser Automatisierungssysteme gesehen.

Ausgehend von der Hypothese, dass die Eigenschaften Transparenz, Selbsterklärbarkeit und Lernförderlichkeit akzeptanzfördernd wirken, wurde die Entwicklung geeigneter Darstellungsformen für die Visualisierung modellbasierter Prozessdaten im BuB unter Berücksichtigung dieser Eigenschaften verfolgt. Abbildung 8.1 zeigt die einzelnen Entwicklungsetappen.

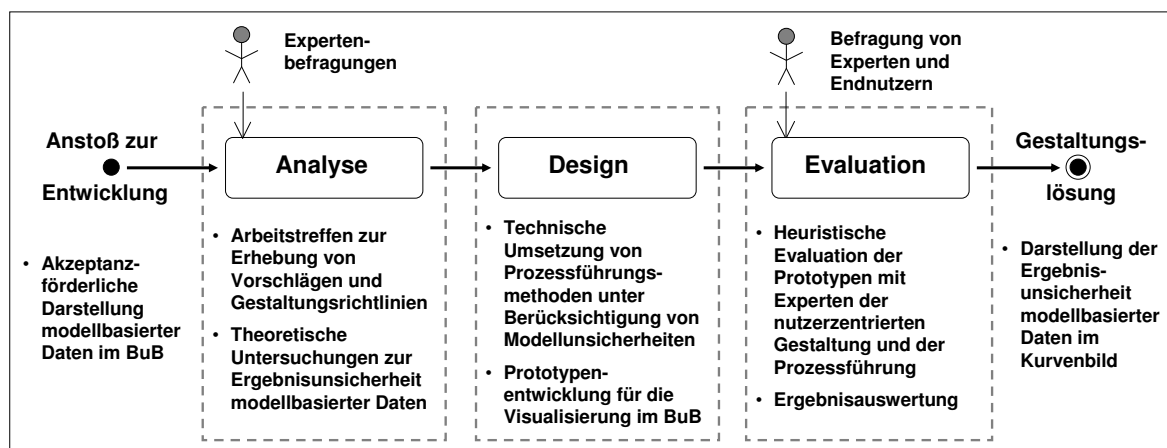


Abbildung 8.1: Vorgehensmodell zur Entwicklung von Gestaltungslösungen

Analyse: Als wichtigstes Ergebnis des Arbeitstreffens mit Experten auf dem Gebiet der nutzerzentrierten Systemgestaltung (*usability*-Experten) ergab sich, dass die verwendeten modellbasierten Daten immer mit einem Gütemaß gekennzeichnet werden sollten. Dieses stellt einen Indikator für die Zuverlässigkeit des Automatisierungssystems dar. Auf diese Weise wird die kritische Auseinandersetzung mit dem System gefördert und die Beurteilung des Systemverhaltens entscheidend unterstützt.

Im Gegensatz zur klassischen Betrachtungsweise der Sicherheitstechnik, in der hauptsächlich die Zuverlässigkeit der Komponenten von Automatisierungssystemen betrachtet werden,

wurden in dieser Arbeit explizit die Unsicherheiten des dem Verfahren zugrundeliegenden Prozessmodells berücksichtigt. Diese systeminhärenten Eigenschaften des Automatisierungssystems haben einen vergleichsweise großen Einfluss auf die Güte modellbasierter Daten.

Als zentrales Darstellungselement wurden die Ergebnisunsicherheit bzw. die Ergebniswahrscheinlichkeit modellbasierter Daten identifiziert. Ihre Berechnung stellt aufgrund der Komplexität und Nichtlinearität typischer verfahrenstechnischer Prozessmodelle immer noch eine große Herausforderung dar.

Aus diesem Grund wurden unsichere Größen durch Gauß'sche Normalverteilungen beschrieben sowie probabilistische Berechnungen auf Basis des linearisierten Modells durchgeführt. Der damit verbundene Fehler wurde für den im Rahmen dieser Arbeit untersuchten thermischen Trennprozess am Beispiel ermittelter Konzentrationen diskutiert.

Design: Die praktische Relevanz und Realisierbarkeit der entwickelten Ansätze wurde durch die Implementierung konkreter modellbasierter APC-Systeme am Leitsystem einer Rektifikationskolonne im Technikumsmaßstab nachgewiesen. Diese decken die wesentlichen Einsatzgebiete modellbasierter Methoden ab. So wurden Modelle unterschiedlicher Detailliertheit und Komplexität für den Einsatz von Softsensoren, die modellbasierte Regelung und die Arbeitspunktoptimierung genutzt.

Dazu wurden im Vorfeld umfangreiche Untersuchungen zur Regelung, zum Anfahren und zum stationären Betrieb der Kolonne angestellt, deren Ergebnisse als Grundlage für weitere Arbeiten herangezogen werden können. Durch die in diesem Zusammenhang vorgenommene technische Modifikation der Kondensatorkühlung, wird der stabile Betrieb über den gesamten Arbeitsbereich von 1–4 bar ermöglicht.

Voraussetzung für die Ermittlung der Ergebnisunsicherheit modellbasierter Daten ist die Quantifizierung der Modellgüte. Sie wird über Unsicherheiten ausgewählter Modellparameter beschrieben, welche im Rahmen der optimierungsbasierten Parameterschätzung (MLE) bestimmt werden können. Für das stationäre rigorose Kolonnenmodell wurden Parameter und deren Ergebnisunsicherheiten bestimmt, welche eine sehr gute Übereinstimmung mit den Ergebnissen vorhergehender Untersuchungen aufweisen. Weiterhin konnte gezeigt werden, dass die anhand des angepassten Modells ermittelten Prozessgrößen wesentliche Informationen für die Beurteilung des Betriebs verkörpern.

Im gleichen Zug wurden die Grenzen modellbasierter Verfahren aufgezeigt. Liegt der Betriebspunkt des realen Prozesses außerhalb des Gültigkeitsbereiches des Prozessmodells treten strukturelle Unsicherheiten auf. Diese können nicht immer durch die Anpassung von Parametern kompensiert werden. Als Folge wird das Prozessverhalten unzureichend wiedergegeben. Das Verlassen des Gültigkeitsbereiches wurde durch die Definition von Grenzwerten für die geschätzten Parameter bzw. durch die Auswertung der Abweichungen von modellbasierten und gemessenen Prozessdaten identifiziert.

Die Auswirkungen von Modellunsicherheiten wurden am Beispiel von Softsensoren zur Er-

mittlung des Konzentrationsprofils untersucht. Diese basierten auf einem einfachen Siede-/Taupunktmodell bzw. auf dem stationären rigorosen Kolonnenmodell. Es konnte gezeigt werden, dass die Ergebnisunsicherheit der modellbasierten Daten nicht nur vom verwendeten Prozessmodell und damit dem verwendeten Prozesswissen beeinflusst wird, sondern auch von der Qualität der genutzten Messinformationen abhängt. Die sehr unterschiedlichen ermittelten Ergebnisunsicherheiten unterstreichen die große Bedeutung der Visualisierung von Gütemaßen der modellbasierten Daten.

Im Rahmen der Untersuchungen zur modellbasierten Regelung des Kolonnendrucks wurde ein reduziertes dynamisches Modell entwickelt, welches die wesentlichen Wirkzusammenhänge der Prozessgrößen des Kondensators beschreibt. Durch die Anbindung eines stochastischen Schätzverfahrens (EKF) an das Leitsystem wurden die relevanten Zustandsgrößen, Modellparameter und eine externe Störgröße, unter Berücksichtigung der Unsicherheiten von Modell- und Messdaten, *online* ermittelt. Damit wurde das Modell an den Betrieb angepasst. Weiterhin wurden die Voraussetzungen für die Visualisierung der dynamischen Entwicklung modellbasierter Daten und ihrer Güte geschaffen.

Darauf aufbauend wurde eine Mehrgrößenregelung (MPC) implementiert, welche sich vor allem durch die Erweiterung des Betriebsbereiches der Kolonne auszeichnet. Das geregelte Verhalten weist jedoch die für MPC-Systeme typische Komplexität auf. Daher trägt die Darstellung der dem System zugrundeliegenden vorhergesagten Daten und ihrer Güte wesentlich zum Verständnis des aktuellen Prozessgeschehens bei. Nachteilig ist der Einsatz nichtlinearer Modelle im Regelungsalgorithmus zu bewerten. Erste weiterführende Untersuchungen von Günther (2008) zur Regelung auf Basis des linearisierten Modells, zeigen ein wesentlich besseres Konvergenzverhalten und damit eine höhere Reglerperformanz.

Modellbasierte Daten können sowohl Informationen zum Betriebsverhalten als auch konkrete Entscheidungen für die Prozessführung darstellen. Als Folge der probabilistischen Herangehensweise ist eine gewünschte Wahrscheinlichkeit für die Einhaltung von Beschränkungen zu definieren. Dieser Sachverhalt wurde am Beispiel der stationären Arbeitspunktoptimierung des Kolonnenbetriebs diskutiert. Die experimentelle Umsetzung zeigt, dass die Einhaltung der Produktspezifikationen nur durch die explizite Berücksichtigung der begrenzten Güte des rigorosen Kolonnenmodells garantiert werden kann. Der am Fachgebiet entwickelte Ansatz zur Lösung komplexer Optimierungsprobleme unter der Berücksichtigung von Wahrscheinlichkeitsrestriktionen wurde damit erstmalig am realen Prozess angewandt und dessen praktische Relevanz unter Beweis gestellt.

Basierend auf den gesammelten Richtlinien und Vorschlägen zur Darstellung modellbasierter Daten wurden Gestaltungslösungen entwickelt, welche sich in das Kurvenbild konventioneller Bedienoberflächen integrieren lassen. Am Beispiel der modellgestützten Regelung des Kolonnendrucks wurden sie prototypisch im emulierten Leitsystem der Rektifikationskolonne realisiert.

Evaluation: Die prototypischen Gestaltungslösungen wurden im Rahmen zweier Evaluationen sowohl mit *usability*-Experten als auch mit erfahrenen Nutzern konventioneller Leitsysteme bewertet. Die gemeinsame Darstellung modellbasierter Daten und ihrer Güte im konventionellen Kurvenbild fand eine durchweg positive Resonanz. Weiterhin konnte ein klarer Favorit für die Darstellung von Gütemaßen im Kurvenbild ermittelt werden.

Bemerkenswert war, dass keiner der befragten Probanden die Darstellung der Güte modellbasierter Daten in Frage stellte. Vielmehr wurde diese als wichtiges Instrument für die Beurteilung modellbasierter Daten angesehen. Ebenso entsprach die sowohl bei Automatisierungstechnikern als auch Ingenieurpsychologen bekannte Tatsache (Gelb, 1974; Wickens und Hollands, 2000), dass die Güte modellbasierter Daten mit zunehmendem Prädiktionshorizont abnimmt, den allgemeinen Erwartungen.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass die befragten Probanden die Aussage von Wickens und Hollands (2000), dass der Wert einer modellbasierten Information nur so groß wie seine Zuverlässigkeit ist, bestätigten. In dieser Arbeit wurde der recht allgemeine Begriff der Zuverlässigkeit durch den Begriff der Ergebnisunsicherheit bzw. der Ergebniswahrscheinlichkeit inhaltlich konkretisiert.

Ausblick: Die Ergebniswahrscheinlichkeit von modellbasierten Entscheidungen kennzeichnet die Robustheit bezüglich der Einhaltung von Beschränkungen. Ihre Visualisierung wurde im Rahmen der UE noch nicht berücksichtigt. Sie stellt eine festzulegende Größe dar, mit der die Funktionsweise des Automatisierungssystems beeinflusst wird. Es wird angenommen, dass deren Kenntnis eher für den Experten auf dem Gebiet der Automatisierungstechnik relevant ist. Hier sind die Vorteile einer optionalen Darstellung noch zu prüfen.

Für komplexe nichtlineare Problemstellungen stellt das Konvergenzverhalten neben der Modellgüte eine zusätzliche systeminhärente Eigenschaft dar, welche einen großen Einfluss auf die Zuverlässigkeit des Systems besitzt. Im Besonderen sind davon Systeme zur Arbeitspunktoptimierung oder für die RTO betroffen. Diese Eigenschaften sind für die Ermittlung von Zuverlässigkeitsindikatoren zu berücksichtigen. Allgemein erscheinen hier die existierenden Lösungsansätze noch nicht ausgereift genug für den Einsatz in der verfahrenstechnischen Leitwarte.

Die für das Kurvenbild erarbeiteten Darstellungselemente lassen sich teilweise auch im Fließbild und im Gruppenbild einsetzen. Es wurden Lösungswege sowohl für die Ermittlung als auch die Visualisierung der Zuverlässigkeitsindikatoren aufgezeigt. Hier sind weder technische noch personelle Hindernisse zu erwarten. Einer Integration in vorgefertigte Funktionsbausteine und Bedienelemente modellbasierter Systeme steht damit nichts im Weg.

9 Anhang

9.1 Daten der Hochdruckkolonne

Tabelle 9.1: Geometrische und kalorische Daten der Hochdruckkolonne

Böden	
Bodenabstand	$h^{Boden} = 0,15 \text{ m}$
Ø Boden	$\varnothing_{innen} = 0,107 \text{ m}$
freier Querschnitt	$A_{quer}^{Boden} = 8,99 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2$
stat. Volumen	$V_{stat}^{Boden} = 3,12 \cdot 10^{-4} \text{ m}^3$
Wehrhöhe	$h^{Wehr} = 0,028 \text{ m}$
Wehrlänge	$l^{Wehr} = 0,025 \text{ m}$
Dampfdurchtritt	$A_{quer}^{Glocke} = 4,5 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2$
Kondensator	
max. Füllstand	$l_{max}^{Kond} = 1 \text{ m}$
freie Bodenfläche	$A_{quer}^{Kond} = 4,85 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2$
Anz. Rohre	$N = 15$
Ø-Rohre	$\varnothing_{aus}^{KW} = 1 \cdot 10^{-2} \text{ m}$
	$\varnothing_{in}^{KW} = 6 \cdot 10^{-3} \text{ m}$
Vol. Kühlwasser	$V^{KW} = 4,24 \cdot 10^{-4} \text{ m}^3$
WÜ-Fläche	$A_{WU}^{Kond} = 0,47 \text{ m}^2$
Wärmekapazität	$mc_p^{Wand} = 2,6 \frac{\text{KJ}}{\text{K}}$
Sumpf	
Volumen Verdampfer	$V_{stat}^{Sumpf} = 0,012 \text{ m}^3$
Volumen Kolonnensumpf	$V_{var}^{Sumpf} = 0,006 \text{ m}^3$

9.2 Diskretisierung mit dem Orthogonalen Kollokationsverfahren

Im Rahmen der Diskretisierung wird eine Unterteilung des gesamten Optimierungshorizontes in NL Intervalle mit der Länge $\Delta t_l = t_l - t_{l-i}$ vorgenommen. Für jedes Intervall liegt ein

Anfangswertproblem vor.

$$\dot{\mathbf{x}}_l = \mathbf{f}[\mathbf{x}_l, \mathbf{u}_l, \Delta t_l], \quad \text{mit } l = 1, \dots, NL \quad (9.1)$$

Um die Kontinuität der Zustandsvariablen zwischen den Zeitintervallen zu garantieren wird der Endwert eines jeden Intervalls als Anfangswert des nächsten Intervalls verwendet $\mathbf{x}(t_{l-1,0} + \Delta t) = \mathbf{x}(t_{l,0})$.

Die Approximation der Zustandsvariablen mit orthogonalen Lagrange-Polynomen, beschreibt die Zustandsvariablen anhand ihrer Werte an diskreten vordefinierten Stützstellen im Intervall. Die Anzahl der Stützstellen NK entspricht der Ordnung der Polynome und verbessert damit einerseits die Genauigkeit der Approximation, erhöht aber andererseits die Anzahl der zu berechnenden Variablen im Intervall und damit den Rechenaufwand. Das Kollokationsverfahren approximiert die Zustandsvariablen in jedem Intervall als Linearkombination eines *sets* von Lagrange-Polynomen $\mathbf{p}$ der Ordnung NC :

$$\mathbf{x}_l(\tau) \approx \sum_{i=0}^{NC} \mathbf{x}_{l,i} \cdot \mathbf{p}_i(\tau) = \sum_{i=0}^{NC} x_{l,i} \cdot \left[\prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^{NC} \frac{\tau - \tau_j}{\tau_i - \tau_j} \right], \quad \text{mit } 0 \leq \tau \leq 1 \quad (9.2)$$

Der Einfachheit halber wird für jedes Intervall zunächst die normierte Zeitschrittweite τ verwendet. Die Wahl der Position der Stützstellen τ_i , mit $i = 1, \dots, NC$ erfolgt nach den Gesetzmäßigkeiten der orthogonalen Kollokation. Danach lässt sich $\mathbf{x}_l(\tau)$ optimal beschreiben, wenn die Polynome orthogonal zueinander sind. Für die Lagrange Polynome NC -ter Ordnung lassen sich daraus optimale Stützstellen ableiten (Li, 1998). Für die Realisierung der Kontinuität

Tabelle 9.2: Optimale Kollokationspunkte für das Verfahren 3. und 5. Ordnung (das Radau Verfahren besitzt zusätzlich $\tau_s = 0$)

Ordnung NC	τ_s			
3	0,11270 16654	0,50000 00000	0,88729 83346	
5	0,04691 00771	0,23076 53450	0,50000 00000	
	0,76923 46551	0,95308 99230		

der Zustandsvariablen ist die Berücksichtigung der Anfangswerte in jedem Intervall notwendig. Es wird der zusätzliche (nicht optimale) Stützpunkt zum Zeitpunkt $\tau = 0$ eingeführt. Die Ordnung des Verfahrens erhöht sich um eins, $NK = NC + 1$. Die Konvergenzordnung und Genauigkeit wird um 1 geringer als die maximal mögliche Ordnung eines Runge-Kutta-Verfahrens. Diese Variante des Kollokationsverfahren ist auch als Radau-Verfahren bekannt. Die für die Diskretisierung der Modellgleichungen benötigten zeitlichen Ableitungen der Zustandsvariablen (der Anfangszustand $\mathbf{x}_l(\tau = 0)$ ist konstant) werden an den Stützstellen der

Polynome in jedem Intervall l berechnet.

$$\left. \frac{\partial \mathbf{x}_l(\tau)}{\partial \tau} \right|_{\tau=\tau_s} \approx \sum_{i=0}^{NC} \mathbf{x}_{l,i} \cdot \left. \frac{\partial p_i(\tau)}{\partial \tau} \right|_{\tau=\tau_s}, \quad \text{mit } s = 1, \dots, NC \quad (9.3)$$

Aus den Ableitungen der Lagrangepolynome ergeben sich konstante Koeffizienten für die Zustandsvariablen. Da das DAE-System an den Kollokationspunkten exakt erfüllt ist, ist es vorteilhaft, die Transitionsbedingungen benachbarter Intervalle für den letzten Stützpunkt $\mathbf{x}_{l,NC}$ und den jeweils ersten Stützpunkt $\mathbf{x}_{l+1,0}$ zu definieren (Li, 1998). Damit die berechnete Lösung am Stützpunkt NC für eine beliebige absolute Zeitschrittweite Δt_l berechnet wird, wird für die Diskretisierung die korrigierte Schrittweite $\Delta t_l^{korr} = \Delta t_l / \tau_{NC}$ verwendet. Das diskretisierte Anfangswertproblem Gl. (9.1) ergibt ein System nichtlinearer Differentialgleichungen der Dimension $\dim(\mathbf{x}) \cdot NC$:

$$\frac{1}{\Delta t_l^{korr}} \cdot \sum_{i=0}^{NC} \mathbf{x}_{l,i} \cdot \left. \frac{\partial p_i(\tau)}{\partial \tau} \right|_{\tau=\tau_s} = \mathbf{f}[\mathbf{x}_{l,s}, \mathbf{u}_{l,s}, \Delta t_{l,s}], \quad \text{mit } s = 1, \dots, NC \quad (9.4)$$

9.3 Berechnung von Stoff- und Gemischdaten

Die Berechnungsgrundlagen und Parameter der Reinstoffe (Acetonitril und Wasser) wurden CHEMCAD® (2007) entnommen. Für die Phasengleichgewichtsberechnung bzw. die Berechnung der Gleichgewichtskonstante $K_i(T, p, x_i) = y_i^* / x_i$ wurde auf die in Forner (2003) verwendeten Daten zurückgegriffen.

Das Gleichgewicht wird aus dem Isotugazitätskriterium der Komponenten berechnet:

$$\begin{aligned} f_i^L &= f_i^V \\ x_i \gamma_i f_i^0 &= y_i^* \varphi_i p \end{aligned} \quad (9.5)$$

Für ideale Gase ist der Fugazitätskoeffizient $\varphi_i = 1$. Für niedrige Drücke ($p \leq 10 \text{ bar}$) kann die Standardfugazität $f_i^0 = p_{0i}^{LV}$ gesetzt werden. Für die Berechnung der Aktivitätskoeffizienten

γ_i wird der semi-empirische Wilson-Ansatz als GE-Modell verwendet. Es ergibt sich:

$$k_i = \frac{y_i^*}{x_i} = \frac{\gamma_i p_{0i}^{LV}}{p} \quad (9.6)$$

mit,

$$\ln \gamma_1 = -\ln\left(\sum_{j=1}^{NK} x_j \Lambda_{ij}\right) + 1 - \sum_k \frac{x_k \Lambda_{ki}}{\sum_j x_j \Lambda_{kj}}$$

$$\Lambda_{ij} = \frac{v_j^L}{v_i^L} \exp\left(-\frac{\Delta\lambda_{ij}}{RT}\right)$$

für 2 Komponenten,

$$\ln \gamma_1 = -\ln(x_1 + \Lambda_{12} + x_2) + x_2 \left(\frac{\Lambda_{12}}{x_1 + \Lambda_{12}x_2} - \frac{\Lambda_{12}}{x_2 + \Lambda_{12}x_1} \right)$$

$$\ln \gamma_2 = -\ln(x_2 + \Lambda_{12} + x_1) + x_1 \left(\frac{\Lambda_{12}}{x_1 + \Lambda_{12}x_2} - \frac{\Lambda_{12}}{x_2 + \Lambda_{12}x_1} \right)$$

$$\Lambda_{12} = \frac{v_2^L}{v_1^L} \exp\left(-\frac{\lambda_{12}-\lambda_{21}}{RT}\right) \quad \text{und} \quad \Lambda_{21} = \frac{v_1^L}{v_2^L} \exp\left(-\frac{\lambda_{21}-\lambda_{12}}{RT}\right)$$

Alle Mischungen werden linear angenommen (Vernachlässigung von Exessgrößen). Molenbezogene Mischungsgrößen $\tilde{\Upsilon}$ (hier: $\tilde{h}^V(T)$, $\tilde{h}^L(T)$, $\tilde{h}^{LV}(T)$, $\tilde{v}^V(T)$, $\tilde{v}^L(T)$)¹ sind mit den molaren Anteilen zu wichten (n - Anzahl der Komponenten).

$$\tilde{\Upsilon} = \sum_{i=1}^n \left(x_i \cdot \tilde{\Upsilon}_i \right) \quad (9.7)$$

Massenbezogene Mischungsgrößen Ψ (hier: $1/\rho^L(T)$, $1/\rho^V(T)$) sind mit dem Massenbruch zu wichten.

$$\Psi = \sum_{i=1}^n \left(\frac{x_i M_i}{\sum_{i=1}^n x_i M_i} \cdot \Psi_i \right) \quad (9.8)$$

9.4 Modifikation des Kondensatorbetriebs

9.4.1 Einfluss der Wärmetauscherleistung auf die Druckregelung für Variante A2

Im Folgenden wird der Einfluss der Wärmetauscherleistung für Variante A2 (Abb. 4.6) auf den Betriebsbereich des Kondensators untersucht. (Die Wärmetauscherleistung des Kondensators wird nicht berücksichtigt.) Die Lösung des vereinfachten stationären Modells (alle Temperaturprofile linear angenommen, konstante Kondensationstemperatur T^V , siehe Abb. 9.1) beschreibt das Betriebskennfeld T^V über den Kühlwasserstrom F^{KW} . Für den Betriebsbereich von 1–4 bar sind Dampftemperaturen von 75–145°C einzustellen (Abb. 4.3 links). Das Betriebskennfeld hängt neben dem Wärmeübertragungsvermögen des Wärmetauschers $(kA)^{WT}$ auch von der abzuführenden Kondensationswärme $\dot{Q}^{LV} = \dot{Q}_{WU}^V$ ab. Der minimale Kühlwas-

¹Im Rahmen der Modellierung wird die Annahme getroffen, dass die Dampftemperatur immer der Siedepunkttemperatur des Stoffgemisches entspricht. $\tilde{v}_i^V(T)$ ergibt sich daher aus der Kombination der idealen Gasgleichung $\tilde{v}_i = f(p, T)$ mit der Antoine-Gleichung $p_{0i}^{LV} = f(T^{LV})$ (Dampfdruck der Reinkomponente am Siedepunkt).

$$\begin{aligned}\dot{Q}_{WU}^V &= F^{KW} cp^{KW} (T_{aus}^{KW} - T_{ein}^{KW}) \\ \dot{Q}_{WU}^V &= (kA)^{Kond} ((T^V - T_{aus}^{KW}) + (T^V - T_{ein}^{KW})) / 2 \\ T_{aus}^{KW} - T_1^{KW} &= T_{ein}^{KW} - T_0^{KW} \\ F^{KW} cp^{KW} (T_{ein}^{KW} - T_0^{KW}) &= (kA)^{WT} (T_1^{KW} - T_0^{KW})\end{aligned}$$

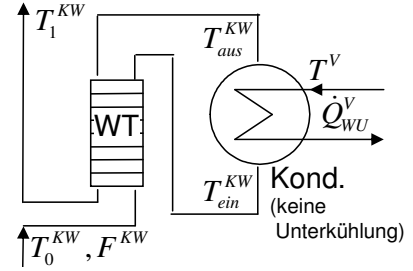


Abbildung 9.1: stationäre Bilanzierung der Variante A2 in Abbildung 4.6

serstrom F_{min}^{KW} ergibt sich aus der Forderung $T_1^{KW} \leq 70^\circ C$ (maximale Temperatur für die Abführung) und ist abhängig von der Kondensationsleistung $\dot{Q}^{LV} = \dot{Q}_{WU}^V$ (Abb. 9.1 links und rechts). Die Auslegung des Wärmetauschers spielt eine entscheidende Rolle. $(kA)^{WT} = 0$

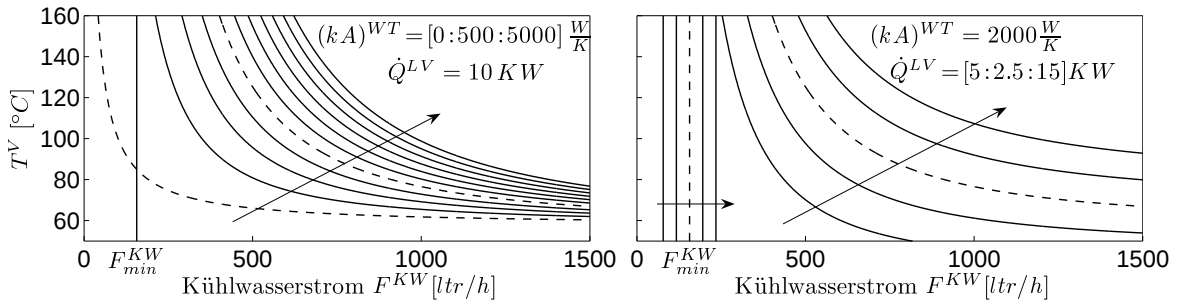


Abbildung 9.2: Berechnete Dampftemperatur T^V in Abhängigkeit des Kühlwasserstroms F^{KW} für:
links: schrittweise Erhöhung von $(kA)^{WT}$ um 500; **rechts:** schrittweise Erhöhung von $\dot{Q}^{LV}$ um 2,5

entspricht dem Fall ohne Vorwärmer B2. Mit steigenden Werten werden bessere Sensitivitäten $\partial T^V / \partial F^{KW}$ erreicht. Der aufzuwendende Kühlwasserstrom F^{KW} wird aber auch zu höheren Werten verschoben (Abb. 9.1 links). Damit verringert sich der maximal abführbare Wärmestrom. Daher sollte der WT nicht zu groß ausgelegt werden. Im rechten Bild wird für eine mittlere $(kA)^{WT}$ die Abhängigkeit der Kennlinie für verschiedene Kondensationsleistungen gezeigt. Für $\dot{Q}^{LV} = \dot{Q}_{WU}^V \geq 10 KW$ kann hier die Dampftemperatur auch für den maximalen Kühlwasserstrom F^{KW} nicht mehr unter $T^V \leq 80^\circ C$ abgesenkt werden. Der Druck ist dann nicht mehr regelbar.

9.4.2 Durchgeführte Umbaumaßnahmen für Variante B2

Für die Realisierung von Variante B2 (Abb. 4.6) wurde ein Plattenwärmetauscher (Leistung 20 KW, maximale Betriebstemperatur $135^\circ C$, Betriebsdruck 30 bar) installiert (siehe Abb. 9.3). Der Kühlwasservordruck beträgt 5,5 bar (absolut). Damit konnte im PLS die maximale Temperatur für TIR-142 auf $120^\circ C$ festgelegt werden. Weitere Sicherheits- bzw. Alarmgrenzen sind TIR-140 = $70^\circ C$ und TIR-142 = $120^\circ C$, sowie der minimale (gefilterte) Wert des Men-

genstroms $\text{FIR-103} = 30 \text{ ltr/h}$. Durch die Installation variabler Durchflußbegrenzer V1021 und V1022 wird die Kennlinie des Kühlwasserventils zu kleineren Strömen verschoben. Damit können über den gesamten Ventilhub genügend große Änderungen des Volumenstroms erzeugt werden (Abb. 9.3). Dies ist der Fall, da der vom Ventil erzeugte Druckverlust weiterhin mehr als die Hälfte des Druckverlustes an den restlichen Systemteilen der Strecke ausmacht. Der maximale Durchfluss sollte für eine gute Regelbarkeit zwischen $150 - 250 \text{ ltr/h}$ liegen. Damit wurde keine der Sicherheitsbeschränkungen für die im Rahmen dieser Arbeit gemachten Untersuchungen überschritten.

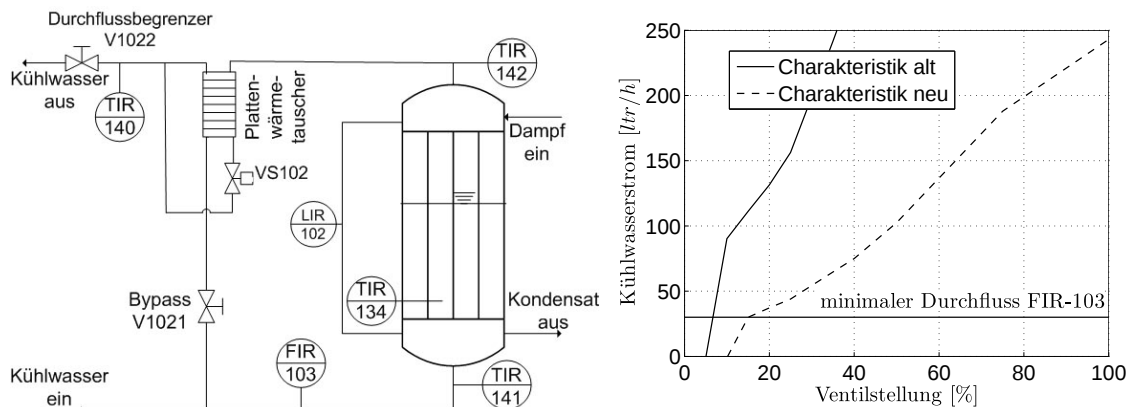
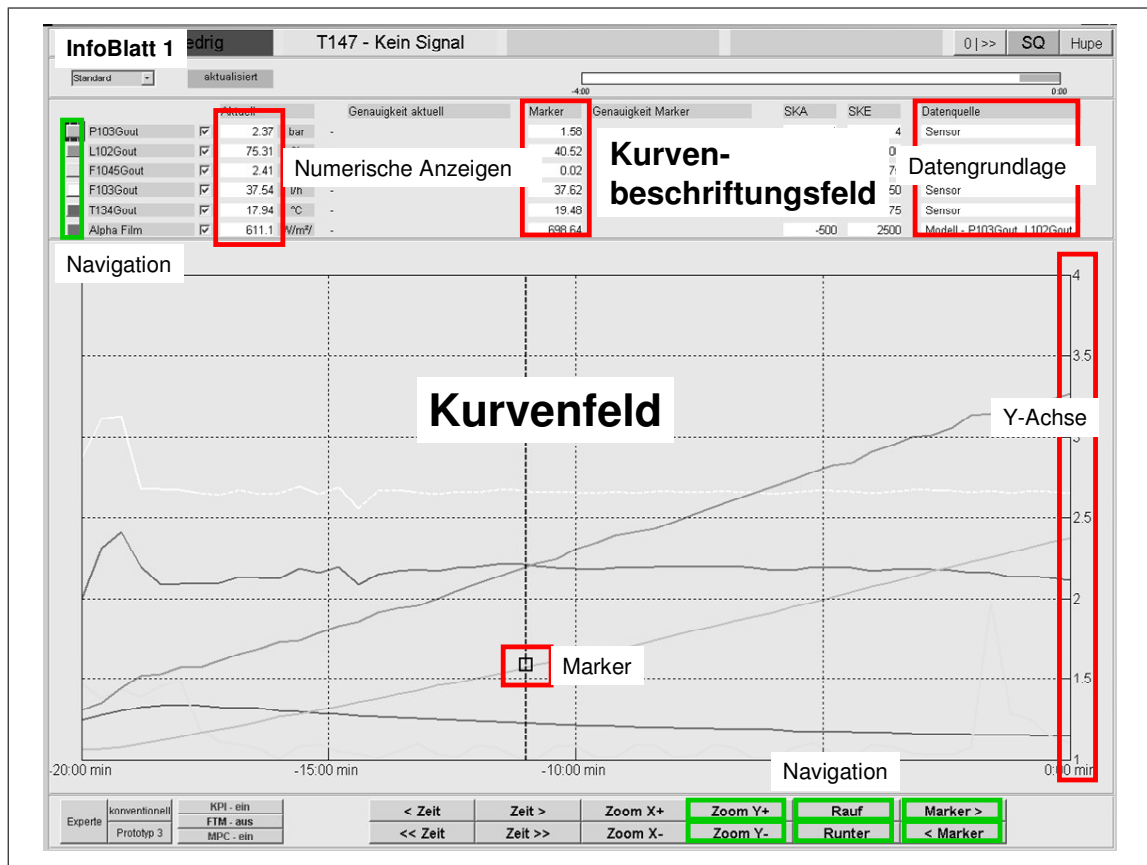


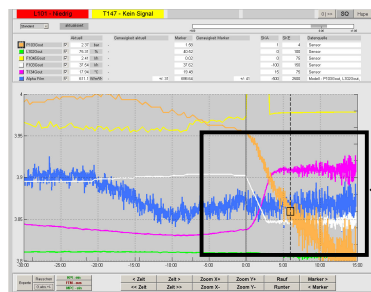
Abbildung 9.3: links: R&I des Kondensators; rechts: angepasste Ventilkennlinie FIR-103

9.5 Evaluationsunterlagen

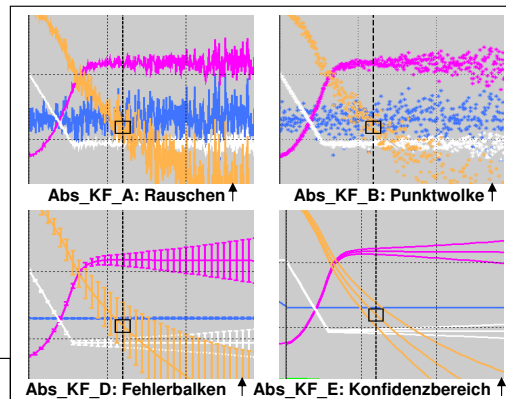
9.5.1 Informationsmaterial



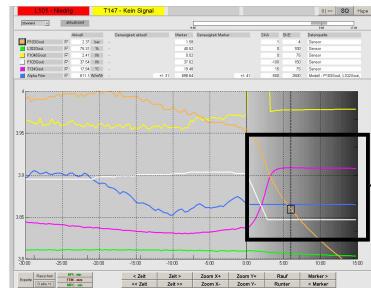
InfoBlatt 2 oben

Absolute Angabe der Güte im Kurvenfeld:direkte grafische Visualisierung
des Konfidenzbereiches

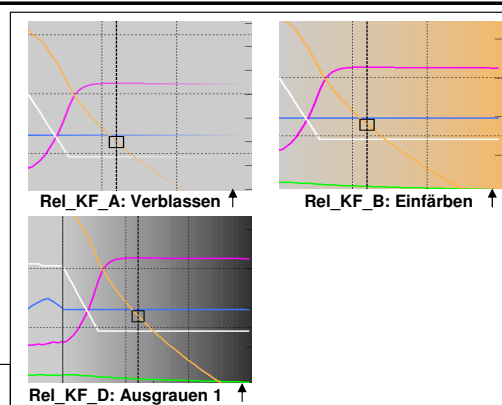
Alternativen:



InfoBlatt 2 unten

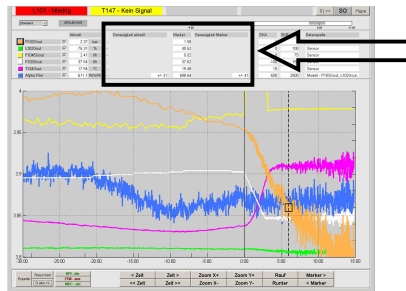
Relative Angabe der Güte im Kurvenfeld:Indirekte grafische Visualisierung
des Konfidenzbereiches

Alternativen:

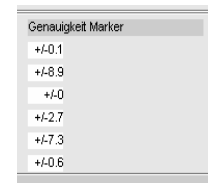
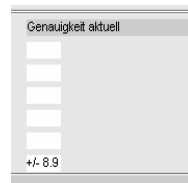


InfoBlatt 3 oben

Absolute Angabe der Güte im Kurvenbeschriftungsfeld:



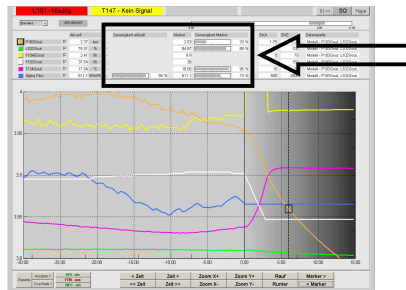
direkte grafische Visualisierung
des Konfidenzbereiches



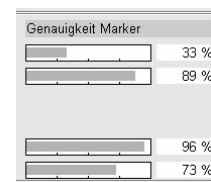
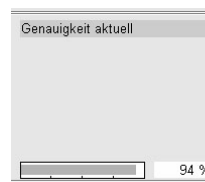
↑ Abs_KBF_A: numerisch als Konfidenzintervall ↑

InfoBlatt 3 unten

Relative Angabe der Güte im Kurvenbeschriftungsfeld:



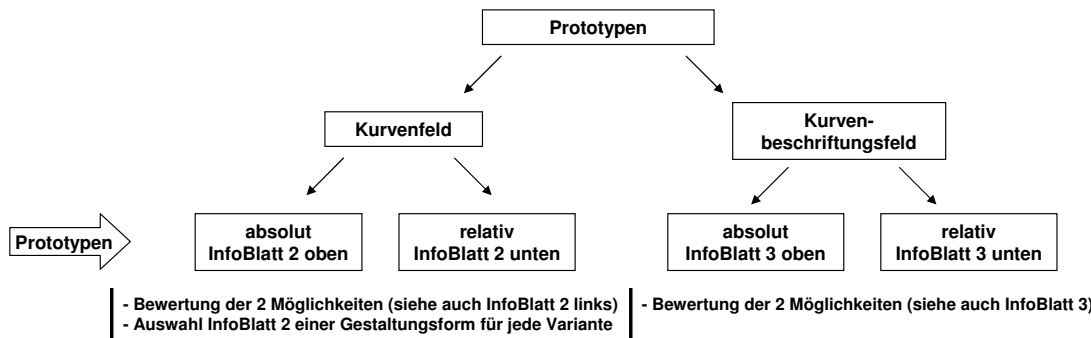
Indirekte grafische Visualisierung
des Konfidenzbereiches



↑ Rel_KBF_A: relativ als Balken ↑

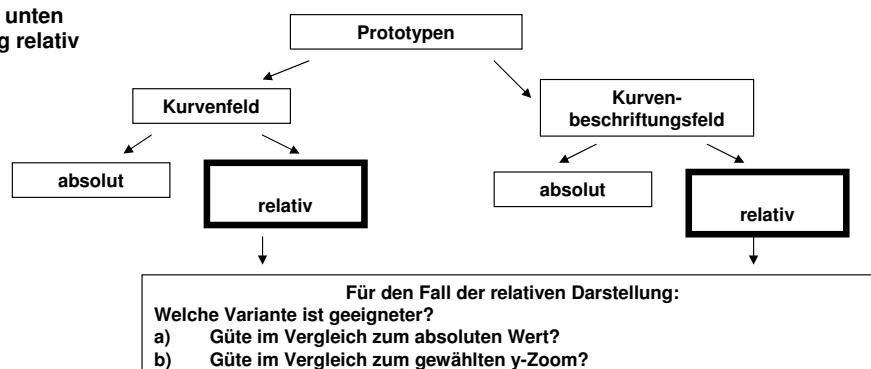
InfoBlatt 4 oben

Baumstruktur der möglichen Varianten



InfoBlatt 4 unten

Umsetzung relativ



9.5.2 Unterlagen für den Versuchsleiter & Auswertungsvorlagen

Evaluation mit Prozessführungsexperten - Unterlagen für den Versuchsleiter

1

Workshopzeit beginnt (0 min – 3 min)

Eine kleiner Ausflug in die Prozessführung

Wie sieht die Prozessführung in der chemischen Industrie aus?

- 1) Operateure überwachen die Prozesse in der chemischen Industrie.
- 2) Der Zustand der Anlage wird anhand von Messdaten (Sensoren) beurteilt:
Dies sind hauptsächlich Füllstände (oder Level) in Tanks, Temperaturen, Drucke, und Durchflüsse (Mengenströme).
- 3) Die Messdaten werden an zentralen Bildschirmen in der Leitwarte kontinuierlich angezeigt und aktualisiert.
- 4) Meist orientieren sich Operateure dabei an Kurvenbildern.

Kurvenbilder sind etabliert und die Gestalt und Interaktion mit dem Kurvenbild ist in Richtlinien bereits beschrieben.

Was ist neu?

Es werden zunehmend auch modellbasierte Daten in der Prozessführung verwendet. Sie liefern zusätzliche Informationen zu den bestehenden Messdaten (Sensoren).

Das können Informationen sein:

- a) die kontinuierlich mit den (vom Prozess) ankommenden Messdaten zusammen zur Verfügung stehen,
- b) die das zukünftige Verhalten von Messdaten (vom Prozess) vorhersagen.

Was ist das Ziel des Workshops?

Ziel dieser Arbeit ist es, diese neuen (modellbasierten) Daten in das Kurvenbild einzubinden.

Dazu wurden schon verschiedene Prototypen entwickelt.

Heute sollen diese Prototypen evaluiert werden.

Wie wird das heute gemacht?

Zunächst werden alle Prototypen einzeln vorgestellt und getestet. Im zweiten Teil wird Ihre Meinung zur besten Kombination der Prototypen abgefragt. (Es können nämlich 2 gleichzeitig benutzt werden, aber dazu später mehr.)

Bitte Freiwillige auswählen:

- Eine Person interagiert mit den Prototypen und macht Tests. (Bitte zunächst ein Freiwilliger – dieser bekommt die Maus. Später wird gewechselt.)
- Alle Teilnehmer bekommen Kopien von den „Info-Blättern“. Sie werden später gemeinsam durchgesehen!
- Alle Teilnehmer nutzen die „Auswertungsvorlage“. Es sind Fragen zu beantworten und Bewertungen zu protokollieren, jeweils nach den Tests.

0 Einführung in die Bedienung:

(Workshopzeit 4 min –18 min)

Modus wählen: (unten links)

Button 1: Konv. Zukunft

Button 2: G. ohne

Kommentar:

Es handelt sich um eine Einführung in die Interaktion mit dem Kurvenbild, so wie sie Standard in den Leitwarten ist. Die Evaluation hat noch nicht begonnen!

Siehe hierzu auch **InfoBlatt 1**.

Die Navigation ist auf die für die Evaluation relevanten Funktionen begrenzt. Siehe grüne Buttons!

Aufgabe 1: Zeigen Sie die y-Achse für die blaue Linie an / Bringen Sie die blaue Linie in den Vordergrund!

Lösung 2:

Oben links auf das blaue Kästchen klicken.

Kommentar zur Lösung:

Der Marker ist jetzt auf die blaue Linie gesprungen. Die Achse wird jetzt für die blaue Linie angezeigt. Die blaue Linie ist eine Wärmeübergangszahl, die laufend anhand aktueller Daten vom Modell berechnet wird. Sie wird auch für die Zukunft vorhergesagt.

Aufgabe 2: Identifizieren Sie die modellbasierten Daten durch Nutzung des Buttons <Marker> für die blaue und orangene Linie:

- a) für die Vergangenheit
- b) für die vorhergesagte Zukunft.

Lösung 1:

Bewegen des Markers in Vergangenheit und Zukunft verändert die Datengrundlage (Position oben rechts).

Aufgabe 3: Ermitteln Sie Werte für die blaue Linie anhand der numerischen Anzeige:

- a) für den aktuellen Wert (0 min), anhand der numerischen Anzeige für den aktuellen Wert (befindet sich oben etwas weiter links)
- b) für die Vorhersage (+ 5min), anhand der numerischen Anzeige für den Marker (oben weiter rechts).

Lösung 3:

Verschieben des Markers auf 0 bzw. +5 min, ablesen des Ergebnisses oben im Kurvenbeschriftungsfeld.

Aufgabe 4: Ermitteln Sie Werte für die orangene Linie:

- für die Vorhersage (+ 5min), anhand der Achsenbeschriftung der y-Achse.

Kommentar:

Dies ist ein Sensor für den Druck (in der Vergangenheit), der weitere Verlauf für die Zukunft wird hier (ab +0 min bis + 8 min) vom Modell vorhergesagt.

Lösung 4:

Markieren der orangenen Linie (die y-Achse wird jetzt für die orange Linie aktiv).

Nutzen von <Zoom Y+> und <Zoom Y->, bzw. <Rauf> und <Runter> Buttons, bis der Wert an der Y-Achse abgelesen werden kann.

Hinweis: Ist die Linie „verschwunden“ nutze <Zoom Y->, bis sie wieder da ist...

Aufgabe 5: Bitte gehen Sie noch mal alle relevanten Buttons und Anzeigen durch und rekapitulieren Sie ihre Funktion! Siehe hierzu noch mal das Infoblatt zu den Buttons (**InfoBlatt 1**).

1 Evaluation Teil 1

(Workshopzeit 19 min – 29 min)

Kommentar: Die Evaluation beginnt.

Es werden nun für das Kurvenfeld und das Kurvenbeschriftungsfeld nacheinander

Prototypen/Darstellungsformen vorgestellt (siehe auch **InfoBlatt 4 oben**). Diese Prototypen können unterteilt werden in: absolute Prototypen und relative Prototypen. Sie werden jetzt einzeln behandelt und auch vorgestellt.

Im Folgenden werden verschiedene Aufgaben gestellt, die mit den Prototypen zu lösen sind. Hier geht es darum, durch das Lösen der Aufgaben ein Gefühl für die Vor-/Nachteile der Prototypen zu bekommen. Eine exakte Lösung gibt es oft nicht. Es wird jedoch erwartet, dass die jeweiligen Prototypen den Nutzer unterschiedlich stark bei der Aufgabenerfüllung unterstützen.

Wichtig: Bitte teilen Sie uns mit, wie Sie die Lösung der Aufgaben angehen und welche Elemente Sie dafür nutzen. Bitte informieren Sie uns auch über Dinge, die Sie nicht verstehen.

Versuch 1 (von Evaluation Teil 1):

Absolute Anzeige im Kurvenbeschriftungsfeld:

Modus wählen:

Button 1: Konv. Zukunft

Button 2: G.abs.+/-

Kommentar:

Hier wird jetzt die absolute Genauigkeit in Form von Konfidenzintervallen im Kurvenbeschriftungsfeld für den aktuellen und markierten modellbasierten Wert angezeigt (numerische Anzeige +/- Wert) siehe **InfoBlatt 3 oben**.

Nutzen Sie **Auswertungsvorlage Seite 1** nach Ablauf des Tests!

Aufgabe 1: Die grüne Linie ist der Füllstand. Er steigt kontinuierlich.

Kommentar:

Dies ist ein Sensor für den Füllstand (in der Vergangenheit), der weitere Verlauf für die Zukunft wird hier (ab +0 min bis + 8 min) vom Modell vorhergesagt.

Schauen Sie sich die Vorhersage für die Zukunft an!

1 a) Zu welcher Zeit wird er seinen Grenzwert von 85 % Füllstand erreichen?

Lösung 1a:

Das Erreichen von 85% wird für ungefähr + 4 min vorhergesagt.

1 b) Wie entwickelt sich die Genauigkeit des vorhergesagten Füllstandes über die Zukunft?

Lösung 1b:

Die Genauigkeit der modellbasierten Daten nimmt über den Horizont ab

1 c) Welche modellbasierte Größe hat die höchste/ niedrigste Genauigkeit? Vergleichen Sie für die Zukunft von orange und blau!

Lösung 1c:

Die absolute Genauigkeit ist für den Druck / orange am größten und für Alpha Film / blau am geringsten.

Bitte Versuch auswerten! **Auswertungsvorlage Seite 1!** Max 3 min!!!

Versuch 2 (von Evaluation Teil 1):

Absolute Anzeige im Kurvenfeld und Kurvenbeschriftungsfeld(?):

(Workshopzeit 30 min –40 min)

Modus wählen:

Button 1: Rauschen

Button 2: G.abs.+/-

Kommentar:

Hier wird jetzt die absolute Genauigkeit in Form als überlagerte Punktwolke im Kurvenfeld visualisiert -> Alternativen hierzu (Rauschen, Punktwolke, Fehlerbalken 1 & 2) siehe **InfoBlatt 2 oben**.

Aufgabe 1: Schauen Sie sich noch einmal die blaue Linie an.

Kommentar:

Dies ist wieder die modellbasierte Größe für den Wärmeübergang (für die Vergangenheit und Zukunft).

1 a) Wie groß ist der Wärmeübergang in der Vergangenheit bei –15 min? Nutzen Sie die numerische Anzeige und auch das Ablesen an der y-Achse.

Lösung 1a:

Laut numerischer Anzeige für den Marker 694 W/m²/K, beim Ablesen an der y Achse können es rund 650-700 W/m²/K sein.

1 b) Geben Sie einen Fehlerbereich für den Wert bei –15 min an! Bitte sowohl anhand der numerischen Anzeige als auch mit der y-Achse.

Lösung 1b:

Bsp: Rund 650-700 W/m²/K , ungefähr +/- 30.

1 c) Ist diese Angabe des Wertes < 693,92 > bei –15 min Ihrer Meinung nach noch sinnvoll?

Lösung 1c:

Hängt natürlich davon ab, ob man auf einen genauen Wert angewiesen ist, oder eine Größenordnung reicht (Bsp ungefähr 700).

1 d) Wie entwickelt sich die Genauigkeit der blauen Kurve über die Zeit?

Lösung 1d:

Ist in der Vergangenheit konstant und nimmt für die Zukunft ab

1) Bitte Versuch auswerten! Nutzen Sie **Auswertungsvorlage Seite 2** Max 3 min!!!

2) Welche Alternative ist Ihrer Meinung nach am geeignetsten? **Siehe InfoBlatt 2 oben**
Nutzen Sie dazu **Auswertungsvorlage Seite 5 nur oben!** Max 3 min!!!

Versuch 3 (von Evaluation Teil 1):
Relative Anzeige im Kurvenfeld und im Kurvenbeschriftungsfeld:
(Workshopzeit 41 min –50 min)

Modus wählen:

Button 1: Ausgrau 2

Button 2: G.rel.Balk.2

Kommentar:

Hier wird jetzt die relative Genauigkeit in Form von Ausgrauen im Kurvenfeld visualisiert ->

Alternativen hierzu (Verblassen, Einfärben, Ausgrauen) siehe **InfoBlatt 2 unten**.

Zusätzlich wird auch die relative Genauigkeit als Balken im Kurvenbeschriftungsfeld visualisiert siehe **InfoBlatt 3 unten**. Nutzen Sie **Auswertungsvorlage Seite 3 & 4**.

Aufgabe 1: Schauen Sie sich noch einmal die grüne und die blaue Linie an!

1 a) Lesen Sie noch einmal den Wert für + 5min für grüne und blaue Linie im Kurvenfeld (an der y-Achse) ab. Klicken Sie dazu zunächst auf die Kurvenauswahl (Farb-Buttons unten links).

Nutzen Sie nun die Information des Ausgrauens und der Balken im Kurvenbeschriftungsfeld!

Wie bewerten Sie anhand dieser indirekten Information die Genauigkeit?

Lösung 1a:

Ablesen ergibt -> 85 und 611.

Oben Links die Kurven anwählen, nun mit dem <Zoom Y> und den <Rauf/Runter> Buttons die Kurve so legen, das man gut ablesen kann.

Die blaue Kurve ist stärker ausgegraut -> daher unsicherer/schlechtere Genauigkeit.

1 b) Verfolgen Sie nun den Verlauf der Genauigkeit für die blaue Linie! In welcher Richtung nimmt die Genauigkeit ab? Nutzen Sie hier auch den Marker. (Fahren Sie mit dem Marker die Linie von links nach rechts ab.) -> beide Richtungen Vergangenheit / Zukunft.

Lösung 1b:

Die Genauigkeit ist in der Vergangenheit konstant und nimmt in der Zukunft ab.

Kommentar:

Die relative Genauigkeit wurde hier durch Bezug der Genauigkeit auf den jeweiligen Wert der modellbasierten Größe ermittelt.

Kurvenfeld -> Balken -> alle werden angezeigt.

Kurvenbeschriftungsfeld -> Ausgrauen -> nur aktuelle Größe der y-Achse.

1) Bitte Versuch auswerten! Nutzen Sie **Auswertungsvorlage Seite 3 & 4** Max 4 min!!!

2) Welche Alternative ist Ihrer Meinung nach am geeignetsten? **Siehe InfoBlatt 2 unten**
 Nutzen Sie dazu **Auswertungsvorlage Seite 5 unten!** Max 3 min!!!

Evaluation Teil 2

(Workshopzeit 51 min –60 min)

Kommentar:

Unabhängig von der bisherigen Wahl, werden nun nur relative Prototypen behandelt. Wie bereits gesehen, können diese sowohl im Kurvenfeld als auch im Kurvenbeschriftungsfeld angewandt werden. Im Folgenden soll eine Entscheidung zwischen zwei Varianten (a und b) zur Realisierung der relativen Prototypen getroffen werden (siehe **InfoBlatt 4 unten**).

Bis jetzt wurde die relative Genauigkeit immer in Abhängigkeit des absoluten Wertes der Prozessgröße ermittelt. Dies entspricht Variante a (siehe **InfoBlatt 4 unten**). Im Folgenden wird ein Ansatz zur Ermittlung der Genauigkeit im Vergleich des gewählten y-Zooms präsentiert (Variante b).

Versuch 4 (von Evaluation Teil 2):**Indirekte/relative Anzeige im Kurvenfeld und im Kurvenbeschriftungsfeld:***(Workshopzeit 61 min –70 min)***Modus wählen:**

Button 1: Ausgrau 1

Button 2: G.rel.Balk.1

Kommentar:

Hier ist wie im letzten Bsp. die relative Genauigkeit in Form von Ausgrauen im Kurvenfeld visualisiert. Es handelt sich nun nur um die Entscheidung (siehe **InfoBlatt 4 unten**) wie die relative Genauigkeit am besten ermittelt wird.

Hier wird nun die relative Genauigkeit nicht mehr abhängig:

- a) vom absoluten Wert berechnet (wie letztes Bsp.)
- b) sondern von dem vom Nutzer gewählten y-Ausschnitt.

Nutze Auswertungsvorlage Seite 6!

Aufgabe 1: Schauen Sie sich noch ein letztes mal die grüne und die blaue Linie an!

1 a) Lesen Sie noch einmal den Wert für + 5min für die grüne und die blaue Linie im Kurvenfeld (an der y-Achse) ab. Bitte diesmal so genau wie möglich!

Nutzen Sie wieder die Information des Ausgrauens und der Balken im Kurvenbeschriftungsfeld zur Beurteilung der Genauigkeit!

Lösung 1a:

Kurven anwählen, <Zoom Y> und <Rauf/Runter> Buttons

Kommentar:

Desto weiter ich in die Kurve „reinzooome“ desto stärker wird ausgegraut.

Auch der Balken im Kurvenbeschriftungsfeld verhält sich so.

Dies zeigt an, dass ich aufgrund der beschränkten Genauigkeit meiner Informationen nicht beliebig genau ablesen kann.

1 b) Verfolgen Sie nun wieder den Verlauf der Genauigkeit für die blaue Linie! Diesmal in der Zukunft für unterschiedliche Ausschnitte in der y-Achse. Nutzen Sie hier wieder den Marker. (Fahren Sie mit dem Marker die Linie von links nach rechts ab).

Lösung 1b:

Die Genauigkeit ist in der Vergangenheit konstant und nimmt in der Zukunft ab. Zusätzlich nimmt die Genauigkeit je nach gewählter Zoom-Stufe unterschiedlich schnell ab.

Kommentar:

Die relative Genauigkeit wurde hier durch Bezug der Genauigkeit auf den jeweiligen y-Achsen Abschnitt gewählt.

1 c) Schauen Sie sich den Effekt für beliebige andere Prozesswerte an!

Bitte Versuch auswerten! Nutzen Sie **Auswertungsvorlage Seite 6** Max 3 min!!!

Fazit Teil 2:

Auswahl aus Varianten a und b siehe InfoBlatt 4 unten

(Workshopzeit 71 min –80 min)

Bitte bearbeiten Sie dazu die **Auswertungsvorlage Seite 7.**

Hier kann (bei Bedarf) ein bisschen länger diskutiert werden (- 7 min). Bitte möglichst dokumentieren!

Bemerkungen:

Es wird nur eine Variante (a oder b) für beide Darstellungsräume (Kurvenfeld und Kurvenbeschriftungsfeld) umgesetzt. Eine Mischform macht natürlich alles sehr unverständlich und wird nicht berücksichtigt.

Falls noch mal an den Prototypen probiert werden soll:

Alternativen:

- a) *G rel Balk 2*
- b) *G rel Balk 1*

Abschliessende Diskussion:

Welche Kombination ist am besten?

(Workshopzeit 81 min –Ende)

Kommentar:

- Die Vor-/Nachteile der einzelnen Darstellungen sind jetzt untersucht.
- Nun soll die Frage in der Gruppe geklärt werden, welche Kombinationsmöglichkeit von Darstellungen für das Kurvenfeld bzw. das Kurvenbeschriftungsfeld die geeignetste ist.
- Damit geht es um die Kombination aus 2 Darstellungen (jeweils eine für das Kurvenfeld und eine für das Kurvenbeschriftungsfeld). Bitte beachten Sie, dass sich die einzelnen Vor- und Nachteile aufheben können (durch eine ergänzende Form im anderen Darstellungsraum) oder verstärken können (durch redundante Informationen).

Es entstehen 4 übergeordnete Kombinationsmöglichkeiten (siehe **InfoBlatt 4 oben**):

- Kombination 1: absolut im Kurvenfeld/ absolut im Kurvenbeschriftungsfeld
- Kombination 2: absolut im Kurvenfeld/ relativ im Kurvenbeschriftungsfeld
- Kombination 3: relativ im Kurvenfeld/ absolut im Kurvenbeschriftungsfeld
- Kombination 4: relativ im Kurvenfeld/ relativ im Kurvenbeschriftungsfeld.

Bitte bearbeiten Sie dazu die **Auswertungsvorlage Seite 8!** Bitte auch hier Gründe angeben!

Erster Teil entspricht InfoBlatt 4 oben**Auswertung Versuch 1:****Absolute Anzeige im Kurvenbeschriftungsfeld:**

Bitte schildern Sie hier kurz in Stichpunkten, welche Probleme oder Schwierigkeiten Sie bei der Bearbeitung der Aufgaben zu bewältigen hatten. Falls Sie Verbesserungsvorschläge haben, können Sie diese hier auch nennen.

Bitte schreiben Sie hier:

...

Bemerkung des Autors: analog zu „Auswertung Versuch 1“

Auswertung Versuch 2: Absolute Anzeige im Kurvenfeld:**Auswertung Versuch 3: Relative Anzeige im Kurvenfeld:****Auswertung Versuch 3: Relative Anzeige im Kurvenbeschriftungsfeld:****Ende Teil 1 entspricht InfoBlatt 4 oben**

Bilden Sie nun bitte eine Rangreihe über die von Ihnen getesteten Alternativen! Beginnen Sie bitte mit der Alternative, die Ihnen am besten gefallen hat!

InfoBlatt 2!

Ergebnisse aus dem **InfoBlatt 2 oben:**

Alternativen	Rangreihe
Rauschen	1.
Punktwolke	2.
Fehlerbalken	3.
Konfidenzbereich	4.

Bitte schreiben Sie hier:

...

+++++

Ergebnisse aus dem **InfoBlatt 2 unten:**

Alternativen	Rangreihe
Verblässen	1.
Einfärben	2.
Ausgrauen	3.

Bitte begründen Sie kurz die Wahl der besten und der schlechtesten Alternative!

...

Zweiter Teil entspricht InfoBlatt 4 unten**Auswertung Versuch 4:****Relative Anzeige im Kurvenfeld und im Kurvenbeschriftungsfeld:**

Zur Bewertung der relativen Genauigkeiten: Bitte vergleichen Sie die Anzeige der relativen Genauigkeiten:

- a) im Verhältnis zum **absoluten Wert** und
- b) in Abhängigkeit vom eingestellten **Y-Zoom**.

Bitte nennen Sie Vor- und Nachteile der jeweiligen Variante!

a) *Verhältnis zum absoluten Wert*

b) *Abhängigkeit vom Y-Zoom*

Pro:

...

Pro:

Fazit Teil 2 entspricht InfoBlatt 4 unten

Bitte wählen Sie einen Favoriten aus den Varianten a und b für die relative Darstellung (**InfoBlatt 4 unten**)!

Ergebnisse aus dem **InfoBlatt 4 unten**:

	Anzahl der Stimmen
Variante a	
Variante b	

Bitte Vor- und Nachteile zu den Varianten dokumentieren:

Hier wären ein paar Kommentare nett! ;-)

...

Abschließende Diskussion

Es entstehen 4 übergeordnete Kombinationsmöglichkeiten (siehe **InfoBlatt 4 oben**):

Bitte bringen Sie die Kombinationen in eine Rangreihe. Beginnen Sie mit der, die Ihnen am besten gefallen hat.

Alternativen	Rangreihe
Kombination 1	1.
Kombination 2	2.
Kombination 3	3.
Kombination 4	4.

Bitte begründen Sie kurz die Wahl der besten und der schlechtesten Kombination!

Es darf bis zum Schluss nach allen (noch vorhandenen) Kräften diskutiert werden!

Bitte beantworten Sie uns abschließend ein paar Fragen:

Alter: _____ Jahre, Geschlecht: m/w,

Praktische Erfahrung „Bedienen und Beobachten“: _____ Jahre

Literaturverzeichnis

- Alavi, M.: An assessment of the prototyping approach to information systems development. In: *Communications of the ACM*, Band 27(6):S. 556–563, 1984.
- Allgöwer, F., Badgwell, T. A., Qin, J. S., Rawlings, J. B. und Wright, S. J.: Nonlinear Predictive Control and Moving Horizon Estimation - An Introductory Overview. In: FRANK, P.M. (Hg.) *Advances in Control, Highlights of ECC'99*, Springer, Advances in Control, Highlights of ECC'99, S. 391–449. 1999.
- ARC Advisory Group: Real-Time Process Optimization and Training - Market Analysis and Forecast through 2007. Technischer Bericht, 2003.
- Arellano-Garcia, H.: *Chance Constrained Optimization of Process Systems under Uncertainty*. Dissertation, Institut für Prozess- und Anlagentechnik, TU-Berlin, 2006.
- Arellano-Garcia, H., Wendt, M., Barz, T. und Wozny, G.: Closed-Loop Stochastic Dynamic Optimization under Probabilistic Output-Constraints. In: Biegler, L., Allgöwer, F. und Findeisen, R. (Hg.) *Assessment and Future Directions of Nonlinear Model Predictive Control*, Springer, Berlin/Heidelberg, Band 358 von *Lecture Notes in Control and Information Sciences*, S. 305–315. 2007.
- Avizienis, A., Laprie, J.-C. und Randell, B.: Fundamental concepts of dependability. Technischer Bericht 739, Department of Computing Science, University of Newcastle upon Tyne, 2001.
- Balzert, H.: *Lehrbuch der Software-Technik: Software-Management, Software-Qualitätssicherung, Unternehmensmodellierung*. Berlin: Spektrum, Akademischer Verlag, Heidelberg, 1998.
- Bamberg, A.: *Entwicklung und Vergleich von Regelungskonzepten für eine Zweidruck-Destillationsanlage*, Band Reihe 8 Nr. 910 von *VDI Fortschritt-Berichte*. VDI Verlag, Düsseldorf, 2001.
- Bard, Y.: *Nonlinear parameter estimation*. Academic Press, New York, 1974.
- Barz, T., Arellano-Garcia, H. und Wozny, G.: Robust online optimization based on controller performance metrics for a high-pressure distillation column. In: *Institution of Chemical Engineers Symposium Series*, Band 152:S. 954–963, 2006a.

- Barz, T., Arellano-Garcia, H. und Wozny, G.: Robust implementation of optimal strategies accounting for controller performance and uncertainty. In: *European Symposium on Computer Aided Process Engineering - 17*. Elsevier, Bukarest, Rumänien, 2007, Band 24.
- Barz, T., Huss, J., Platzk, S. und Wozny, G.: Visualisierung modellbasierter Prozessgrößen in der verfahrenstechnischen Leitwarte. In: *USEWARE 2006 - Nutzergerechte Gestaltung technischer Systeme*, VDI-Wissensforum IWB GmbH, Düsseldorf, Band VDI-Bericht 1946 von *Tagungsband zur USEWARE 2006*, S. 83–92. 2006b.
- Bates, D. M. und Watts, D. G.: *Nonlinear Regression Analysis and Its Applications*. Probability and Mathematical Statistics. Wiley, New York, 1988.
- Bauer, I., Bock, H. G., Leineweber, D. B. und Schlöder, J. P.: Direct multiple shooting methods for control and optimization of dae in chemical engineering. In: *Scientific Computing in Chemical Engineering II: Simulation, Image Processing, Optimization, and Control*, S. 2–18, 1999.
- Biegler, L. T.: Solution of dynamic optimization problems by successive quadratic programming and orthogonal collocation. In: *Computers & Chemical Engineering*, Band 8(3-4):S. 243–7, 1984.
- Biegler, L. T.: An overview of simultaneous strategies for dynamic optimization. In: *Chemical Engineering and Processing*, Band 46(11):S. 1043–1053, 2007.
- Biegler, L. T. und Grossmann, I. E.: Retrospective on optimization. In: *Computers & Chemical Engineering*, Band 28(8):S. 1169–1192, 2004.
- Birchfield, G. S.: Advanced Process Control, Optimization and Information Technology in the Hydrocarbon Processing Industries - The Past, Present and Future. http://www.aspentech.com/publication_files/Advanced_Process_Control.pdf, 2002.
- Bortz, J.: *Statistik für Human- und Sozialwissenschaftler*, Band 6. Springer-Verlag, Berlin, 2005.
- Brendel, M., Oldenburg, J., Schlegel, M. und Stockmann, K.: DyOS, Version 2.1 - User's Guide. Technischer Bericht, Lehrstuhl für Prozesstechnik, RWTH Aachen, 2006.
- Bronstein, I.N., Semendjajew, K.A., Musiol, G. und Mühlig, H.: *Taschenbuch der Mathematik*. Verlag Harri Deutsch, Thun und Frankfurt am Main, fünfte Auflage, 2001.
- Burmester, M., Komischke, T. und Wüst, L.: Innovative User Interfaces in Automation Engineering by application of usability engineering methods shown by the example of a three-dimensional plant representation. In: *International Journal of Human-Computer Interaction*, Band 12(3&4):S. 359–373, 2000.

- Camacho, E. F. und Bordons, C.: *Model Predictive Control (Advanced Textbooks in Control and Signal Processing)*. Advanced Textbooks in Control and Signal Processing. Springer-Verlag, zweite Auflage, 2004.
- Canney, W. M.: The future of advanced process control promises more benefits and sustained value. In: *Oil & Gas Journal*, Band 101:S. 48–54, 2003.
- CHEMCAD®: Online Dokumentation von CHEMCAD®. Chemstations, Inc.: <http://www.chemstations.net/documents/manuals.htm>, 2007.
- Deutel, F.: Fitnessprogramm durch Simulation. In: *P&A Kompendium*, publish-industry Verlag GmbH, S. 63–65. 2004.
- Diehl, M., Findeisen, R., Schwarzkopf, S., Uslu, I., Allgöwer, F., Bock, H. G. und Schlöder, J. P.: An Efficient Approach for Nonlinear Model Predictive Control of Large-Scale Systems Part I: Description of the Methodology. In: *Automatisierungstechnik*, Band 50(12):S. 557–567, 2002.
- Diehl, M., Findeisen, R., Schwarzkopf, S., Uslu, I., Allgöwer, F., Bock, H. G. und Schlöder, J. P.: An Efficient Approach for Nonlinear Model Predictive Control of Large-Scale Systems. Part II: Experimental Evaluation Considering the Control of a Distillation Column. In: *Automatisierungstechnik*, Band 51(1):S. 22–29, 2003.
- Diehl, M. M.: *Real-Time Optimization for Large Scale Nonlinear Processes*. Dissertation, Naturwissenschaftlich-Mathematischen Gesamtfakultät, Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, 2001.
- DIN 19227-2: *Leittechnik; Graphische Symbole und Kennbuchstaben für die Prozeßleittechnik; Darstellung von Einzelheiten*. Berlin: Beuth Verlag, 1991.
- DIN 33414-4: *Ergonomische Gestaltung von Warten; Gliederungsschema, Anordnungsprinzipien*. Berlin: Beuth Verlag, 1990.
- DIN 461: *Graphische Darstellung in Koordinatensystemen*. Berlin: Beuth Verlag, 1973.
- DIN 4844-1: *Graphische Symbole - Sicherheitsfarben und Sicherheitskennzeichen - Teil 1: Gestaltungsgrundlagen für Sicherheitszeichen zur Anwendung in Arbeitsstätten und in öffentlichen Bereichen (ISO 3864-1:2002 modifiziert)*. Berlin: Beuth Verlag, 2005.
- DIN 55350-12: *Begriffe der Qualitätssicherung und Statistik, Merkmalsbezogene Begriffe*. Berlin: Beuth Verlag, 1989.
- DIN 55350-13: *Begriffe der Qualitätssicherung und Statistik, Begriffe zur Genauigkeit von Ermittlungsverfahren und Ermittlungsergebnissen*. Berlin: Beuth Verlag, 1987.

- DIN 55350-33: *Begriffe der Qualitätssicherung und Statistik, Begriffe der statistischen Prozesslenkung (SPC)*. Berlin: Beuth Verlag, 1993.
- DIN EN 60614: *Graphische Symbole für Schaltpläne*. Berlin: Beuth Verlag, 1997.
- DIN EN ISO 13407: *Benutzer-orientierte Gestaltung interaktiver Systeme*. Berlin: Beuth Verlag, 1999.
- DIN EN ISO 9241-10: *Ergonomische Anforderungen für Bürotätigkeiten mit Bildschirmgeräten. Teil 10: Grundsätze der Dialoggestaltung*. Berlin: Beuth Verlag, 1996.
- DIN EN ISO 9241-11: *Ergonomische Anforderungen für Bürotätigkeiten mit Bildschirmgeräten. Teil 11: Anforderungen an die Gebrauchstauglichkeit - Leitsätze*. Berlin: Beuth Verlag, 1998.
- DIN ISO 9126: *Informationstechnik; Beurteilen von Softwareprodukten, Qualitätsmerkmale und leitfaden zu deren Verwendung*. Berlin: Beuth Verlag, 1991.
- DIN VDE 31000-2: *Allgemeine Leitsätze für das sicherheitsgerechte Gestalten technischer Erzeugnisse*. Berlin: Beuth Verlag, 1979.
- Dittmar, R., Bebar, M. und Reinig, G.: Control Loop Performance Monitoring - Motivation, Methoden, Anwenderwünsche. In: *atp - Automatisierungstechnische Praxis*, Band 45(4):S. 94–103, 2003.
- Dittmar, R. und Pfeiffer, B.-M.: *Modellbasierte prädiktive Regelung, Eine Einführung für Ingenieure*. Oldenbourg Wissenschaftsverlag, 2004.
- Dittmar, R. und Pfeiffer, B.-M.: Modellbasierte prädiktive Regelung in der industriellen Praxis. In: *at - Automatisierungstechnik*, Band 54(12):S. 590 – 601, 2006.
- Diwekar, U. M. und Kalagnanam, J. R.: Efficient sampling technique for optimization under uncertainty. In: *AIChE J.*, Band 43(2):S. 440–447, 1997.
- Edgar, T. F. und Himmelblau, D. M.: *Optimization of Chemical Processes*. McGraw-Hill Chemical Engineering Series, Singapore, erste Auflage, 1989.
- Enste, U. und Uecker, F.: Standardisierte Kommunikationssysteme zur vertikalen Integration der Betriebs- und Prozessleitebene - eine Übersicht. In: *atp - Automatisierungstechnische Praxis*, Band 44(2):S. 63–73, 2002.
- Faber, R., Arellano-Garcia, H. und Wozny, G.: Bestimmung von nicht messbaren Prozessgrößen mit Hilfe von optimierungsbasierten Techniken. In: *Chemie Ingenieur Technik*, Band 78(10):S. 1509–1522, 2006.

- Faber, R., Li, P. und Wozny, G.: Sequential Parameter Estimation for Large-Scale Systems with Multiple Data Sets. 1. Computational Framework. In: *Industrial & Engineering Chemistry Research*, Band 42(23):S. 5850–5860, 2003.
- Faber, R., Li, P. und Wozny, G.: Sequential Parameter Estimation for Large-Scale Systems with Multiple Data Sets. 2. Application to an Industrial Coke-Oven-Gas Purification Process. In: *Industrial & Engineering Chemistry Research*, Band 43(15):S. 4350–4362, 2004.
- Fieg, G.: Einige Aspekte der dynamischen Simulation von Stofftrennapparaten im Hinblick auf ihre Übertragung auf reale Anlagen. In: *Heat and Mass Transfer*, Band 31:S. 205–223, 1996.
- Flemming, T., Bartl, M. und Li, P.: Set-Point Optimization for Closed-Loop Control Systems under Uncertainty. In: *Industrial & Engineering Chemistry Research*, Band 46(14):S. 4930–4942, 2007.
- Forner, F.: *Entwicklung eines dynamischen Modells für die Trennung homogener azeotroper Gemische in stofflich und energetisch gekoppelten Destillationskolonnen*. Diplomarbeit, Institut für Prozess- und Anlagentechnik, TU-Berlin, 2003.
- Gelb, A.: *Applied Optimal Estimation*. The MIT press, Massachusetts Institute of Technology, 1974.
- Gesthuisen, R.: *Prozessvisualisierung von Polymerisationsprozessen mittels nichtlinearer Zustandsschätzung*. Schriftentum des Lehrstuhls für Anlagensteuerungstechnik. Shaker Verlag, Lehrstuhl für Anlagensteuerungstechnik, Dortmund, 2001.
- Gesthuisen, R. und Kraemer, S.: Modellbasierte Messung der Monomerkonzentration für eine Emulsionspolymerisation - Vergleich Reaktionskalometrie und Zustandsschätzung. In: *Chemie Ingenieur Technik*, Band 74(12):S. 1726–1731, 2002.
- Giesa, H. G.: *Die Bewertung der Verlässlichkeit von Mensch-Maschine-Systemen*, Band 22, 13 von *VDI Fortschritt-Berichte*. VDI Verlag, Düsseldorf, 2003.
- Gill, P. E., Murray, W. und Saunders, M. A.: SNOPT: An SQP Algorithm for Large-Scale Constrained Optimization. In: *SIAM J. OPTIM.*, Band 12(4):S. 979–1006, 2002.
- Gill, P. E., Murray, W. und Saunders, M. A.: User's guide for SNOPT Version 7: Software for Large-Scale Nonlinear Programming. Technischer Bericht, Systems Optimization Laboratory, Stanford University, 2006.
- Gill, P. E., Murray, W., Saunders, M. A. und Wright, M. H.: User's guide for QPSOL (version 3.2): a FORTRAN package for quadratic programming. Technischer Bericht, Department of Operations Research, Stanford University, 1984.

- Gill, P. E., Murray, W., Saunders, M. A. und Wright, M. H.: Some issues in implementing a sequential quadratic programming algorithm. In: *ACM Signum Newsletter*, Band 20(2):S. 13–19, 1985.
- Gill, P. E., Murray, W., Saunders, M. A. und Wright, M. H.: User's Guide For NPSOL 5.0: A Fortran Package for Nonlinear Programming. Technischer Bericht, Systems Optimization Laboratory, Stanford University, 1998.
- Günther, R.: *Modellbasierte Druckregelung an einer Destillationskolonne*. Studienarbeit, Institut für Prozess- und Anlagentechnik, TU-Berlin, 2008.
- Gould, N., Orban, D. und Toint, P.: Numerical methods for large-scale nonlinear optimization. In: *Acta Numerica*, Band 14:S. 299–361, 2005.
- Govatsmark, M. S. und Skogestad, S.: Selection of Controlled Variables and Robust Setpoints. In: *Industrial & Engineering Chemistry Research*, Band 44(7):S. 2207–2217, 2005.
- Grossmann, I. E. und Biegler, L. T.: Part II. Future perspective on optimization. In: *Computers & Chemical Engineering*, Band 28(8):S. 1193–1218, 2004.
- Grossmann, I. E., Halemane, K. P. und Swaney, R. E.: Optimization strategies for flexible chemical processes. In: *Computers & Chemical Engineering*, Band 7(4):S. 439–62, 1983.
- Halemane, K. P. und Grossmann, I. E.: Optimal process design under uncertainty. In: *AIChE Journal*, Band 29(3):S. 425–33, 1983.
- Halvorsen, I.J. und Skogestad, S.: Distillation Theory. In: (Editor-in chief), Ian D. Wilson (Hg.) *Encyclopedia of Separation Science*, Academic Press, S. 1117–1134. 2000.
- Haseltine, E. L. und Rawlings, J. B.: Critical Evaluation of Extended Kalman Filtering and Moving-Horizon Estimation. In: *Industrial & Engineering Chemistry Research*, Band 44(8):S. 2451–2460, 2005.
- Heine, T.: *Modellgestützte Überwachung und Führung von Fed-Batch-Prozessen zur Antibiotikaproduktion*, Band Reihe 8 Nr. 1050 von *VDI Fortschritt-Berichte*. VDI Verlag, Düsseldorf, 2004.
- Heine, T., Kawohl, M. und King, R.: Ein neuer Ansatz zur robusten Trajektorienplanung und robusten nichtlinearen modellprädiktiven Regelung für Prozesse mit Parameterunsicherheiten. In: *at - Automatisierungstechnik*, Band 54(12):S. 614–621, 2006.
- Henrion, R., Li, P., Möller, A., Steinbach, M., Wendt, M. und Wozny, G.: Stochastic Optimization for Chemical Processes under Uncertainty. In: et al., Grötschel (Hg.) *Online Optimization of Large Scale Systems*, Springer, S. 455–476. 2001.

- Hilmen, E.-K.: *Separation of Azeotropic Mixtures: Tools for Analysis and Studies on Batch Distillation Operation*. Dissertation, Department of Chemical Engineering, Norwegian University of Science and Technology, 2000.
- Holmström, K., Göran, A. O. und Edvall, M. M.: User's Guide for TOMLAB /NPSOL. Technischer Bericht, TOMLAB home page: <http://tomopt.com>, 2006a.
- Holmström, K., Göran, A. O. und Edvall, M. M.: User's Guide for TOMLAB /SNOPT. Technischer Bericht, TOMLAB home page: <http://tomopt.com>, 2006b.
- Holmström, K., Göran, A. O. und Edvall, M. M.: NLPQL Base Modul - User's Guide for TOMLAB. Technischer Bericht, TOMLAB home page: <http://tomopt.com>, 2007.
- Hong, W., Wang, S., Li, P., Wozny, G. und Biegler, L. T.: A quasi-sequential approach to large-scale dynamic optimization problems. In: *AIChE Journal*, Band 52(1):S. 255–268, 2006.
- Huang, Y., Reklaitis, G. V. und Venkatasubramanian, V.: A Heuristic Extended Kalman Filter Based Estimator for Fault Identification in a Fluid Catalytic Cracking Unit. In: *Industrial & Engineering Chemistry Research*, Band 42(14):S. 3361–3371, 2003.
- Hugo, A.: Limitations of Model Predictive Controllers. In: *Hydrocarbon processing*, Band 79(1):S. 83–88, 2000.
- Ierapetritou, M. G., Acevedo, J. und Pistikopoulos, E. N.: An optimization approach for process engineering problems under uncertainty. In: *Computers & Chemical Engineering*, Band 20(6/7):S. 703–9, 1996.
- IMSL®: Fortran Subroutines for Mathematical Applications, Math/Library Volumes 1 and 2. Technischer Bericht, Visual Numerics, Inc., 1997.
- Julier, S. J. und Uhlmann, J. K.: A New Extension of the Kalman Filter to Nonlinear Systems. In: Kadar, Ivan (Hg.) *SPIE -The International Society for Optical Engineering*. Orlando, FL, 1997, Band 3068 von *Simul. and Controls*, S. 182–193.
- Kawohl, M., Heine, T. und King, R.: Model based estimation and optimal control of fed-batch fermentation processes for the production of antibiotics. In: *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, Band 46(11):S. 1223–1241, 2007.
- Kindsmüller, M. C.: *Trend-Literacy - zur Interpretation von Kurvendarstellungen in der Prozessführung*. Shaker Verlag, Aachen, 2006.
- Kochs, H.-D.: Verlässlichkeitsanalyse mechatronischer Systeme - Mechatronic Dependability Analysis. Mitteilungen Nr. 29 Fachgruppe fehlertolerierende Rechensysteme. GI, VDI/VDE, GMA, ITG. ISSN 0724-5319, 2001.

- Kochs, H.-D. und Petersen, J.: Verlässlichkeit mechatronischer Systeme - Dependability of Mechatronic Systems. Mitteilungen Nr. 30, Fachgruppe fehlertolerierende Rechensysteme. GI, VDI/VDE, GMA, ITG, ISSN 0724-5319, 2002.
- Komischke, T. und Burmester, M.: User-Centered Standardization of Industrial Process Control User Interfaces. In: *International Journal of Human-Computer Interaction*, Band 12(3,4):S. 375–386, 2001.
- Kroll, A.: Trainingssimulation für die Prozessindustrien: Status, Trends und Ausblick - Teil 1. In: *atp - Automatisierungstechnische Praxis*, Band 45(2):S. 50–57, 2003a.
- Kroll, A.: Trainingssimulation für die Prozessindustrien: Status, Trends und Ausblick - Teil 2. In: *atp - Automatisierungstechnische Praxis*, Band 45(3):S. 55–60, 2003b.
- Leineweber, D. B., Bauer, I., Bock, H. G. und Schlöder, J. P.: An efficient multiple shooting based reduced SQP strategy for large-scale dynamic process optimization. Part 1: theoretical aspects. In: *Computers & Chemical Engineering*, Band 27(2):S. 157–166, 2003a.
- Leineweber, D. B., Schafer, A., Bock, H. G. und Schlöder, J. P.: An efficient multiple shooting based reduced SQP strategy for large-scale dynamic process optimization Part II: software aspects and applications. In: *Computers & Chemical Engineering*, Band 27(2):S. 167–174, 2003b.
- Li, P.: *Entwicklung optimaler Führungsstrategien für Batch-Destillationsprozesse*, Band Reihe 3 Nr. 560 von *VDI Fortschritt-Berichte*. VDI Verlag, Düsseldorf, 1998.
- Li, P.: *Prozessoptimierung unter Unsicherheiten*. Oldenbourg Verlag, 2007.
- Loeblein, C. und Perkins, J. D.: Structural design for on-line process optimization: I. Dynamic economics of MPC. In: *AIChE Journal*, Band 45(5):S. 1018–1029, 1999a.
- Loeblein, C. und Perkins, J. D.: Structural design for online process optimization: II. Application to a simulated FCC. In: *AIChE Journal*, Band 45(5):S. 1030–1040, 1999b.
- Löwe, K., Li, P. und Wozny, G.: Entwicklung und experimentelle Validierung einer optimalen Anfahrstrategie für hochrein trennende Bodenkolonnen. In: *Chemie-Ingenieur-Technik*, Band 72(3):S. 215–219, 2000.
- Manhartsberger, M. und Musil, S.: *Web Usability: Das Prinzip des Vertrauens*. Galileo Press, Bonn, 2001.
- Martin, G. D. und Dittmar, R.: Einfache Methoden zur Vorabschätzung des Nutzens von Advanced-Control-Funktionen. In: *atp - Automatisierungstechnische Praxis*, Band 47(12):S. 32–39, 2005.

- MATLAB®: Online Dokumentation von MATLAB®. MathWorks, Inc.: <http://www.mathworks.com/access/helpdesk/help/helpdesk.shtml>, 2007.
- Maybeck, P. S.: *Stochastic models, estimation, and control*, Band 141 von *Mathematics in Science and Engineering*. Academic Press, New York, 1979.
- Mitchell, W., Shook, D. und Shah, S. L.: A Picture Worth a Thousand Control Loops: An Innovative Way of Visualizing Controller Performance Data. Technischer Bericht, Matrikon Inc., 2007.
- Nagy, Z. K. und Braatz, R. D.: Robust nonlinear model predictive control of batch processes. In: *AIChE Journal*, Band 49(7):S. 1776–1786, 2003.
- Nagy, Z. K., Franke, R., Mahn, B. und Allgöwer, F.: Real-time implementation of nonlinear model predictive control of batch processes in an industrial framework. In: Biegler, L., Allgöwer, F. und Findeisen, R. (Hg.) *Assessment and Future Directions of Nonlinear Model Predictive Control*, Springer, Berlin/Heidelberg, Band 358 von *Lecture Notes in Control and Information Sciences*, S. 465–472. 2007.
- Narasimhan, S. und Jordache, C.: *Data Reconciliation and Gross Error Detection: An Intelligent Use of Process Data*. Gulf Publishing Company, Houston , Texas, 2000.
- Nielsen, J.: *Usability Engineering*. Academic Press Limited, Boston, 1993.
- Nimmo, I.: The Safety Issues of Batch (and other) Controls. In: *World Batch Forum*. Atlantic City, N.J., 2005.
- Nocedal, J. und Wright, S. J.: *Numerical Optimization*. Springer Series in Operations Research and Financial Engineering, New York, zweite Auflage, 1999.
- Nohr, M. und Boll, M.: Controller Performance Assessment Eine Möglichkeit zur Verbesserung der Prozessführung. In: *Chemie Ingenieur Technik*, Band 75(12), 2003.
- Nöth, G. und Pickhardt, R.: Anlagenoptimierung durch Performance Monitoring und Alarm Mangement. In: *atp - Automatisierungstechnische Praxis*, Band 47(9), 2005.
- Pfeiffer, B.-M.: Advanced Process Control mit SIMATIC PCS 7. 2005a. Vortrag beim PLT-Sommerkolloquium, RWTH Aachen, Juni 2005.
- Pfeiffer, B.-M.: Control Performance Monitoring mit einer Kombination aus stochastischen und deterministischen Merkmalen. VDI Berichte Nr. 1883, 2005b, S. 411–419.
- Prekopa, A.: *Stochastic Programming*. Kluwer, Dordrecht, 1995.
- Qin, S. J. und Badgewell, T. A.: A Survey of Industrial Model Predictive Control Technology. In: *Control Engineering Practice*, Band 11(7):S. 733–764, 2003.

- Raghunathan, A. U., Soledad, D. M. und Biegler, L. T.: An MPEC formulation for dynamic optimization of distillation operations. In: *Computers & Chemical Engineering*, Band 28(10):S. 2037–2052, 2004.
- Reinig, G., Dittmar, R. und Göttmann, O.: INTERKAMA 1999: Produkte im Bereich Advanced Process Control. In: *Atp - Automatisierungstechnische Praxis*, Band 42(4):S. 46–57, 2000.
- Reinig, G. und Mahn, B.: Praxisorientierte Evaluierung gehobener Regelungsstrategien für Verfahrenstechnische Anlagen. In: *At - Automatisierungstechnik*, Band 48(8), 2000.
- Repke, J.-U., Forner, F. und Klein, A.: Trennung homogener azeotrope mittels zweidruckrektifikation - eine analyse des betriebsverhaltens. In: *Chemie Ingenieur Technik*, Band 77(6):S. 763–771, 2005.
- Rix, A.: *Modellierung und Prozessführung wärmeintegrierter Destillationskolonnen*, Band Reihe 3 Nr. 549 von *VDI Fortschritt-Berichte*. VDI Verlag, Düsseldorf, 1998.
- Rooney, W. C. und Biegler, L. T.: Optimal process design with model parameter uncertainty and process variability. In: *AIChE Journal*, Band 49(2):S. 438–449, 2003.
- Sahinidis, N. V.: Optimization under uncertainty: state-of-the-art and opportunities. In: *Computers & Chemical Engineering*, Band 28(6-7):S. 971–983, 2004.
- Sakizlis, V., Perkins, J. D. und Pistikopoulos, E. N.: Recent advances in optimization-based simultaneous process and control design. In: *Computers & Chemical Engineering*, Band 28(10):S. 2069–2086, 2004.
- Santos, L. O., Afonso, P. A. F. N. A., Castro, J. A. A. M., Oliveira, N. M. C. und Biegler, L. T.: On-line implementation of nonlinear MPC: an experimental case study. In: *Advanced Control of Chemical Processes, a Proceedings Volume from the IFAC Symposium, Pisa, Italy, June 14-16, 2000*, Band 3:S. 707–712, 2001.
- Satriadarma, B.: *Predictive Functional Control an einer Destillationskolonne*. Diplomarbeit, Institut für Prozess- und Anlagentechnik, TU-Berlin, 2007.
- Schaich, D. und Friedrich, M.: Operator-Training Simulation (OTS) in der chemischen Industrie - Erfahrungen und Perspektiven. In: *Atp - Automatisierungstechnische Praxis*, Band 45(2):S. 38–48, 2003.
- Schei, T.S. und Singstad, P.: Nonlinear model predictive control of a batch polymerization-process. In: *American Control Conference*. 1998, Band 6, S. 3381 – 3385.
- Schittkowski, K.: NLPQL: A FORTRAN subroutine solving constrained nonlinear programming problems. In: *Annals of Operations Research*, Band 5(6):S. 485–500, 1985.

- Schittkowski, K.: Mathematische Grundlagen von Optimierungsverfahren. Vorlesungsskript, Mathematisches Institut, Universität Bayreuth, 2007.
- Schuler, H.: Automation in Chemical Industry. In: *At - Automatisierungstechnik*, Band 54(8):S. 363–371, 2006.
- Schwarm, A. T. und Nikolaou, M.: Chance-constrained model predictive control. In: *AIChE Journal*, Band 45(8):S. 1743–1752, 1999.
- Sharma, S.: *Theoretical & experimental studies on a high pressure column for the separation of an azeotropic mixture*. Masterarbeit, Institut für Prozess- und Anlagentechnik, TU-Berlin, 2007.
- Sheridan, T. B.: Supervisory control. In: Salvendy, G. (Hg.) *Handbook of Human Factors & Ergonomics*, Wiley, New York, NY, S. 1295–1327. 1997.
- Skogestad, S.: Near-optimal operation by self-optimizing control: from process control to marathon running and business systems. In: *Computers & Chemical Engineering*, Band 29(1):S. 127–137, 2004.
- Sloley, A. W.: Effectively Control Column Pressure. In: *Chem. Eng. Prog.*, Band 97(1):S. 38–48, 2001.
- Sommerville, I.: *Software Engineering*. Addison Wesley, fünfte Auflage, 1996.
- SOP der Zweidruckkolonne: *Betriebsanweisung der LP und HP Kolonne*. Institut für Prozess- und Anlagentechnik, TU-Berlin, 2006.
- Srinivasan, B., Bonvin, D., Visser, E. und Palanki, S.: Dynamic optimization of batch processes II. Role of measurements in handling uncertainty. In: *Computers & Chemical Engineering*, Band 27(1):S. 27–44, 2003a.
- Srinivasan, B., Palanki, S. und Bonvin, D.: Dynamic optimization of batch processes I. Characterization of the nominal solution. In: *Computers & Chemical Engineering*, Band 27(1):S. 1–26, 2003b.
- Stein, O., Oldenburg, J. und Marquardt, W.: Continuous reformulations of discrete-continuous optimization problems. In: *Computers & Chemical Engineering*, Band 28(10):S. 1951–1966, 2004.
- Sygnarowicz, P.: *Analytical and experimental studies on column pressure control*. Masterarbeit, Institut für Prozess- und Anlagentechnik, TU-Berlin, 2006.
- Ted Su, H.: Operation-Oriented Advanced Process Control. In: *IEEE International Symposium on Intelligent Control*. Taipei, Taiwan, 2004, S. 252–257.

- Thanedar, P. B., Arora, J. S., Tseng, C. H., Lim, O. K. und Park, G. J.: Performance of some SQP Algorithms on Strucural Design Problems. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Band 23:S. 2187–2203, 1986.
- Timpe, K.-P., Jürgensohn, T. und Kolrep, H.: Technisches Versagen und menschliche Zuverlässigkeit: Bewertung der Verlässlichkeit in Mensch-Maschine-Systemen. In: *Mensch-Maschine-Systemtechnik*, Timpe, K.-P. and Jürgensohn, T. and Kolrep, H., Düsseldorf, S. 63–106. 2002.
- Urbas, L.: *Entwicklung und Realisierung einer Trainings- und Ausbildungsumgebung zur Schulung der Prozessdynamik und des Anlagenbetriebs im Internet*, Band Reihe 10 Nr. 614 von *VDI Fortschritt-Berichte*. VDI Verlag, Düsseldorf, 1999.
- Valappil, J. und Georgakis, C.: A Systematic Tuning Approach for the Use of Extended Kalman Filters in Batch Processes. In: *American Control Conference*. San Diego, California, 1999.
- Valappil, J. und Georgakis, C.: Systematic estimation of state noise statistics for extended Kalman filters. In: *AIChE Journal*, Band 46(2):S. 292–308, 2000.
- VDI 4004, Blatt 1-4: *Zuverlässigkeitskenngrößen - Übersicht*. Berlin: Beuth Verlag, 1986.
- VDI/VDE 3542, Blatt 2: *Sicherheitstechnische Begriffe für Automatisierungssysteme Quantitative Begriffe und Definitionen*. Berlin: Beuth Verlag, 2000.
- VDI/VDE 3542, Blatt 4: *Sicherheitstechnische Begriffe für Automatisierungssysteme Zuverlässigkeit und Sicherheit komplexer Systeme (Begriffe)*. Berlin: Beuth Verlag, 2000.
- VDI/VDE 3699, Blatt 1: *Prozeßführung mit Bildschirmen: Grundlagen und Begriffe*. Berlin: Beuth Verlag, 2005.
- VDI/VDE 3699, Blatt 4: *Prozeßführung mit Bildschirmen: Kurven*. Berlin: Beuth Verlag, 1997.
- VDI/VDE 3699, Blatt 6: *Prozeßführung mit Bildschirmen: Bedienverfahren und Bediengeräte*. Berlin: Beuth Verlag, 2002.
- Venkatasubramanian, V., Rengaswamy, R., Yin, K. und Kavuri, S. N.: A review of process fault detection and diagnosis Part I: Quantitative model-based methods. In: *Computers & Chemical Engineering*, Band 27(3):S. 293–311, 2003.
- Wendt, M.: *Untersuchungen zur stochastischen Online Optimierung kontinuierlicher Destillationsprozesse unter Unsicherheiten*. Dissertation, Institut für Prozess- und Anlagentechnik, TU-Berlin, 2005.

- Wendt, M., Li, P. und Wozny, G.: Batch distillation optimization with a multiple time-scale sequential approach for strong nonlinear processes. In: *Computer-Aided Chemical Engineering*, Band 8(European Symposium on Computer Aided Process Engineering-10, 2000):S. 121–126, 2000.
- Wendt, M., Li, P. und Wozny, G.: Nonlinear Chance-Constrained Process Optimization under Uncertainty. In: *Industrial & Engineering Chemistry Research*, Band 41(15):S. 3621–3629, 2002.
- Wickens, C. D. und Hollands, J. G.: *Engineering Psychology and Human Performance*. Prentice Hall, 3 Upper Saddle River, NJ, 2000.
- Willis, M. J. und Tham, M. T.: Advanced Process Control. <http://www.lorien.ncl.ac.uk/ming/advcontrl/apc.htm>, 1994.
- Wittenberg, C.: Benutzeranforderungen für den Einsatz von mobilen Endgeräten in der Industrieautomatisierung. In: *At - Automatisierungstechnik*, Band 52(3):S. 136–146, 2004.
- Wozny, G.: Persönliche Mitteilungen. 2007.
- Wozny, G., Fieg, G., Jeromin, L., Koehne, M. und Guelich, H.: Design and analysis of a state observer for the temperature front of a rectification column. In: *Chemical Engineering & Technology*, Band 12(5):S. 339–44, 1989.
- Wozny, G. und Jeromin, L.: Dynamische Prozesssimulation in der industriellen Praxis. In: *Chemie Ingenieur Technik*, Band 63(4):S. 313–26, 1991.

Im Rahmen dieser Arbeit betreute Studien- und Diplomarbeiten

Sygnarowicz, P. (2006), Analytical and experimental studies on column pressure control, Masterarbeit, Institut für Prozess- und Anlagentechnik, TU-Berlin.

Gorne-Zoppi, D. (2007), Modelling of a Distillation Column for the separation of an Homogeneous Azeotropic Mixture, Masterarbeit, Institut für Prozess- und Anlagentechnik, TU-Berlin.

Sharma, S. (2007), Theoretical & experimental studies on a high pressure column for the separation of an azeotropic mixture, Masterarbeit, Institut für Prozess- und Anlagentechnik, TU-Berlin.

Satriadarma, B. (2007), Predictive Functional Control an einer Destillationskolonne, gefördert und betreut durch die Degussa GmbH, Diplomarbeit, Institut für Prozess- und Anlagentechnik, TU-Berlin.

Günther, R. (2008), Analytische Untersuchungen zur linearen modellbasierten prädiktiven Regelung am Beispiel der Druckregelung an einer Destillationskolonne, Studienarbeit, Institut für Prozess- und Anlagentechnik, TU-Berlin.