

Prozeßsimulation

Herausgegeben von
Hans Schuler



Weinheim · New York · Basel · Cambridge · Tokyo

This Page Intentionally Left Blank

Prozeßsimulation

Herausgegeben von
Hans Schuler



© VCH Verlagsgesellschaft mbH, D-69451 Weinheim (Bundesrepublik Deutschland), 1995

Vertrieb:

VCH, Postfach 10 11 61, D-69451 Weinheim (Bundesrepublik Deutschland)

Schweiz: VCH, Postfach, CH-4020 Basel (Schweiz)

United Kingdom und Irland: VCH (UK) Ltd., 8 Wellington Court, Cambridge CB1 1HZ (England)

USA und Canada: VCH, 220 East 23rd Street, New York, NY 10010-4606 (USA)

Japan: VCH, Eikow Building, 10-9 Hongo 1-chome, Bunkyo-ku, Tokyo 113, Japan

ISBN 3-527-28635-7

Prozeßsimulation

Herausgegeben von
Hans Schuler



Weinheim · New York · Basel · Cambridge · Tokyo

Dr. Hans Schuler
BASF Aktiengesellschaft
DWL/L – L440
D-67056 Ludwigshafen

Das vorliegende Werk wurde sorgfältig erarbeitet. Dennoch übernehmen Autor und Verlag für die Richtigkeit von Angaben, Hinweisen und Ratschlägen sowie für eventuelle Druckfehler keine Haftung.

Lektorat: Dr. Barbara Böck, Dr. Ulrike Wunsch
Herstellerische Betreuung: Bernd Riedel Dipl.-Wirt.-Ing. (FH)

Die Deutsche Bibliothek – CIP-Einheitsaufnahme

Prozeßsimulation / hrsg. von Hans Schuler. – Weinheim ; New York ; Basel ; Cambridge ; Tokyo : VCH, 1995
ISBN 3-527-28635-7

NE: Schuler, Hans [Hrsg.]

© VCH Verlagsgesellschaft mbH, D-69451 Weinheim (Bundesrepublik Deutschland), 1995

Gedruckt auf säurefreiem und chlorfrei gebleichtem Papier.

Alle Rechte, insbesondere die der Übersetzung in andere Sprachen, vorbehalten. Kein Teil dieses Buches darf ohne schriftliche Genehmigung des Verlages in irgendeiner Form – durch Photokopie, Mikroverfilmung oder irgendein anderes Verfahren – reproduziert oder in eine von Maschinen, insbesondere von Datenverarbeitungsmaschinen, verwendbare Sprache übertragen oder übersetzt werden. Die Wiedergabe von Warenbezeichnungen, Handelsnamen oder sonstigen Kennzeichen in diesem Buch berechtigt nicht zu der Annahme, daß diese von jedermann frei benutzt werden dürfen. Vielmehr kann es sich auch dann um eingetragene Warenzeichen oder sonstige gesetzlich geschützte Kennzeichen handeln, wenn sie nicht eigens als solche markiert sind.

All rights reserved (including those of translation into other languages). No part of this book may be reproduced in any form – by photoprinting, microfilm, or any other means – nor transmitted or translated into a machine language without written permission from the publishers. Registered names, trademarks, etc. used in this book, even when not specifically marked as such, are not to be considered unprotected by law.

Satz: Mitterweyer Werksatz GmbH, G-68723 Plankstadt

Druck: Strauss Offsetdruck, D-69509 Mörlenbach

Bindung: J. Schäffer GmbH & Co. KG, D-67269 Grünstadt

Printed in the Federal Republic of Germany

Vorwort

Die Prozeßsimulation wird heute als ein strategisches Werkzeug der Prozeßentwicklung und Prozeßführung angesehen. Die Simulation als „Experiment am Modell“ birgt ein beträchtliches Potential an Rationalisierung und „Intelligenzverstärkung“, welches sowohl in den Grundlagen als auch in den Anwendungen der Verfahrenstechnik zunehmend genutzt wird. Die Anwendungsbereiche der Prozeßsimulation expandieren stark in Hochschule und Industrie; sie erlangen teilweise eine spürbare ökonomische Bedeutung.

Die Simulation verfahrenstechnischer Prozesse ist bisher noch nicht umfassend beschrieben worden. Diese Lücke schließt die vorliegende Monographie. Führende Fachleute der beteiligten Disziplinen haben sich bereit erklärt, ihr Gebiet in diesem Buch darzustellen. Die unterschiedliche Sichtweise der jeweiligen Thematik ist von ihrem akademischen bzw. industriellen Hintergrund geprägt und ergibt somit ein facettenreiches Bild dieses lebendigen Arbeitsgebietes. Diese Monographie soll als Leitfaden und Orientierungshilfe in dem sich schnell entwickelnden Gebiet der Prozeßsimulation dienen.

Das Buch spricht einen breiten Leserkreis an.

Es ist für Fachleute der Prozeßsimulation von Interesse, da es neueste Entwicklungen enthält. Der Band spricht aber auch Chemiker, Ingenieure und Mathematiker an, welche das Potential der Prozeßsimulation und mögliche Einsatzfälle zu beurteilen haben oder sich auf diesem Wissensgebiet auf dem Laufenden halten wollen. Schließlich kann das Buch zur Begleitung von Vorlesungen der Verfahrenstechnik, der Regelungstechnik oder der Informatik verwendet werden.

Ludwigshafen, September 1994

Hans Schuler

This Page Intentionally Left Blank

Herausgeber- und Autorenverzeichnis

Herausgeber

Dr.-Ing. Hans Schuler
BASF Aktiengesellschaft
DWL/L – L440
67056 Ludwigshafen

Autoren

Kapitel 1

Prof. Dr.-Ing. Wolfgang Marquardt
RWTH Aachen
Lehrstuhl für Prozeßtechnik
Turmstr. 46
52064 Aachen

Kapitel 2

Prof. Dr. Hans Georg Bock
Dr. Johannes P. Schlöder
Dr. Volker Hubertus Schulz
Universität Heidelberg
Interdisziplinäres Zentrum
für Wissenschaftliches Rechnen
Im Neuenheimer Feld 368
69120 Heidelberg

Kapitel 3

Dipl.-Ing. Bernhard Lohe
Prof. Dr.-Ing. Eberhard Futterer
Technische Universität
Hamburg Harburg
Arbeitsbereich Prozeß-,
Anlagen- und Apparatechnik
Denickestr. 15
21073 Hamburg

Kapitel 4

Dipl.-Ing. Andreas Helget
Prof. Dr.-Ing. Ernst Dieter Gilles
Universität Stuttgart
Institut für Systemdynamik
und Regelungstechnik
Pfaffenwaldring 9
70550 Stuttgart

Kapitel 5

Prof. Dr.-Ing. Günter Wozny
Technische Universität Berlin
Institut für Prozeß-
und Anlagentechnik
Straße des 17. Juni 135
10623 Berlin

Kapitel 6

Dr.-Ing. Peter Holl
BASF Aktiengesellschaft
DWL/LM – L 440
67056 Ludwigshafen

Kapitel 7

Dr. Wolfgang Gutermuth
Hoechst AG
Abteilung Prozeßtechnik
Postfach 80 03 20
65931 Frankfurt

Kapitel 8

Dr. Wolfram Kothe
Dr. Peter Kaßler
Dr. Dorothea Schwarz
Hüls AG
ZBIS/SM-B17
Bau 1042, PB 15
Postfach 13 20
45764 Marl

Kapitel 9

Dr. Rainer Perne
Bayer AG
ZF-TPT5
51368 Leverkusen

Kapitel 10

Prof. Dr.-Ing. Andrzej Górak
Universität Dortmund
Fachbereich Chemietechnik
Lehrbereich Thermische
Verfahrenstechnik und Wärme-
und Stoffaustausch
Emil-Figge-Str. 70
44227 Dortmund

Kapitel 11

Prof. Dr.-Ing. Axel Munak
Bundesforschungsanstalt
für Landwirtschaft
Institut für Biosystemtechnik
Bundesallee 50
38116 Braunschweig

Inhalt

Grundlagen und Methoden der Prozeßsimulation

1	Modellbildung als Grundlage der Prozeßsimulation	3
	<i>W. Marquardt</i>	
1.1	Einführung	3
1.2	Modellierung als Systementwicklungsprozeß	5
1.2.1	Der Begriff des Systems	5
1.2.2	Der Begriff des Modells	7
1.2.3	Systementwicklung	9
1.2.4	Modellbildung	10
1.3	Ein systemtechnischer Modellierungsansatz	12
1.4	Definition universeller Modellbausteine	14
1.4.1	Komponenten und Verknüpfungen	15
1.4.1.1	Elementarverknüpfungen	16
1.4.1.2	Elementarkomponenten	18
1.4.1.3	Zusammengesetzte Modellbausteine	19
1.4.2	Das Verhalten von Modellbausteinen	19
1.4.2.1	Modellgleichungen der verallgemeinerten Phasen	20
1.4.2.2	Modellgleichungen der Stromverknüpfungen	23
1.4.2.3	Modellgleichungen zusammengesetzter Modellbausteine	25
1.5	Ablauf der Modellbildung	26
1.5.1	Problemanalyse	27
1.5.2	Ableitung des Prozeßmodells	28
1.5.3	Analytische Vorverarbeitung und Implementierung des Modells	30
1.5.4	Identifikation, Validierung und Anwendung	30
1.6	Zusammenfassung und Ausblick	31
1.7	Literatur	32

2	Numerik großer Differentiell-Algebraischer Gleichungen – Simulation und Optimierung	35
	<i>H. G. Bock, J. P. Schlöder, V. H. Schulz</i>	
2.1	Einführung	35
2.1.1	DAE-Modelle der Verfahrenstechnik	35
2.1.2	Anforderungen an die Numerik	37
2.1.3	Ziele der Numerik von DAE	38
2.2	Standardverfahren für DAE vom Index 1	39
2.2.1	Konvergenz von Diskretisierungsverfahren	39
2.2.2	Index-1-DAE-Löser	40
2.3	Numerische Lösung großer DAE-Systeme mit BDF-Verfahren	40
2.3.1	BDF-Diskretisierung	41
2.3.1.1	Monitorstrategie	42
2.3.2	Konsistente Initialisierung	43
2.3.2.1	Globalisierte Newtonverfahren	44
2.3.2.2	Homotopieverfahren	45
2.3.2.3	Integration bei inkonsistenten Anfangswerten	47
2.3.3	Große dünnbesetzte lineare Gleichungssysteme	47
2.3.3.1	Direkte Lösungsmethoden für dünnbesetzte Matrizen	48
2.3.3.2	Iterative Methoden	48
2.3.4	Fehlerkontrolle und Schrittweitensteuerung	49
2.4	Alternative Diskretisierungsverfahren	51
2.4.1	Semi-implizites Eulerverfahren mit Extrapolation	51
2.4.2	Kollokationsverfahren und Mehrschritt-Kollokation	52
2.4.3	Weitere implizite Runge-Kutta-Verfahren	53
2.5	Allgemeinere Aufgabenstellungen	54
2.5.1	Probleme mit höherem Index	54
2.5.1.1	Indexreduktion	54
2.5.1.2	Das Drift-Problem und die Projektion	55
2.5.1.3	Initialisierung von Aufgaben mit höherem Index	57
2.5.1.4	Lösung von Problemen mit höherem Index ohne Indexreduktion.	57
2.5.1.5	Automatische Indexerkennung	58
2.5.1.6	Integration bei inkonsistenten Anfangswerten	58
2.5.2	Unstetigkeiten und Nichtdifferenzierbarkeiten	59
2.5.3	Natürliche Interpolation	61
2.5.4	Zeitverzögerungen, Delays	62
2.6	Kurveniteration, waveform relaxation	63
2.7	Sensitivitätsanalyse und Gradientenberechnung	65
2.7.1	IND für BDF-Verfahren	66
2.7.2	IND mit adjungierten Systemen	66

2.8	Optimierungsprobleme in der Verfahrenstechnik	69
2.8.1	Parameterschätzung	70
2.8.2	Prozeßoptimierung	70
2.8.3	Numerische Behandlung von Optimierungsproblemen der Verfahrenstechnik.	71
2.8.3.1	Black-Box-Ansätze	71
2.8.3.2	Der Randwertproblemansatz	72
2.8.3.3	Parametrisierung der Steuerungen	72
2.8.3.4	Diskretisierung der DAE mit Mehrziel- oder Kollokationsverfahren	73
2.8.3.5	Verallgemeinerte Gauß-Newton-Verfahren zur Parameterschätzung	74
2.8.3.6	Verfahren der Sukzessiven Quadratischen Programmierung zur Prozeßoptimierung	76
2.8.3.7	Effizienz und Parallelisierung	77
2.9	Literatur	77
3	Stationäre Flowsheet-Simulation.	81
	<i>B. Lohe, E. Futterer</i>	
3.1	Einsatz der stationären Prozeßsimulation	81
3.2	Aufbau	83
3.2.1	Modelle für Grundoperationen.	85
3.2.2	Stoffdatenmodelle und Datenbanken.	86
3.2.3	Lösungsansätze	88
3.2.3.1	Sequentiell modular.	88
3.2.3.2	Simultan oder gleichungsorientiert	92
3.2.3.3	Zweistufig	93
3.2.4	Programmfunktionen	95
3.2.4.1	Massen- und Energiebilanzen.	95
3.2.4.2	Kostenschätzung	96
3.2.4.3	Parameterstudien und Optimierung.	97
3.2.4.4	Schnittstellen und benutzerdefinierte Routinen	98
3.2.4.5	Integration mit anderen Programmsystemen	100
3.2.4.6	Weitere Programmfunktionen	101
3.3	Verfügbare Programme.	102
3.4	Hardware	102
3.5	Zukünftige Entwicklung	103
3.6	Literatur	105

XII Inhaltsverzeichnis

4 Dynamische Prozeß- und Anlagensimulation 109
A. Helget, E. D. Gilles

4.1 Einführung 109

4.2 Dynmische Simulation in der verfahrenstechnischen Planung . . . 110

4.3 Simulationstechnik 112

4.3.1 Prozesse und Anlagen 112

4.3.2 Ein Anlagensimulator 114

4.3.3 Erweiterung der Funktionalität des Anlagensimulators durch eine
Echtzeit – Simulationsumgebung 118

4.4 Modelle, Modellbildung und Modellbibliotheken 121

4.4.1 Modellentwicklung bei der dynamischen Anlagensimulation . . . 122

4.4.2 Weiterführende Systematisierung der Modellierung 129

4.5 Numerische Methoden zur Behandlung der Modellgleichungen . . 133

4.6 Zukunftsweisende Anwendungen 138

4.7 Zusammenfassung und Ausblick 147

4.8 Literatur 148

Prozeßsimulation als Werkzeug der Verfahrensingenieure

5 Simulation in der Verfahrensentwicklung 155
G. Wozny

5.1 Einführung 155

5.2 Anwendungen 158

5.2.1 Entwicklung neuer Verfahren – Fallbeispiele 158

5.2.1.1 Entwicklungsbegleitende Prozeßsimulation 159

5.2.1.1.1 Auslegung Grundoperationen 160

5.2.1.1.2 Energetische Analyse 162

5.2.1.1.3 Kostenprogramm 164

5.2.1.1.4 Polymerisations – Simulator 166

5.2.2 Optimierung bestehender Anlagen 169

5.2.2.1 Vorgehensweise 169

5.2.2.2 Meßwertvalidierung 170

5.2.2.2.1 Grundlagen 171

5.2.2.2.2 Anwendungsbeispiel 172

5.2.2.3 Anlagenoptimierung 173

5.2.2.3.1	Modellentwicklung, Modellvalidierung – Batchreaktor	176
5.2.2.3.2	Verfahrensoptimierung	178
5.2.2.4	Upgrade Prozeßautomatisierung	178
5.2.2.4.1	Fallbeispiel – Regelungsstruktur	183
5.2.2.4.2	Fallbeispiel – IMC Regelung	186
5.2.2.4.3	Fallbeispiel – Anfahren	193
5.2.3	Manage Know How	198
5.2.3.1	Beratungssysteme – Expertensysteme.	199
5.2.3.2	Fallbeispiel – Automatisierungskonzept	199
5.3	Zusammenfassung	200
5.4	Literatur	200
6	Simulation in der Prozeßführung.	203
	<i>P. Holl</i>	
6.1	Aufgaben der Prozeßführung	203
6.2	Simulatoren zur Unterstützung der Prozeß- und Betriebsführung.	204
6.2.1	Schulungs-Simulatoren	204
6.2.2	Trainings-Simulatoren	205
6.2.3	Prädiktive Simulatoren	208
6.2.4	Simulatoren zur Entwicklung und Erprobung von Steuerstrategien.	209
6.2.5	Simulatoren zur Operatorberatung	210
6.2.6	Prozeßführungssimulatoren	211
6.2.7	Simulatoren zur Interpretation vergangener Prozeßzustände	211
6.3	Aufbau von Prozeßführungssimulatoren	212
6.3.1	Betriebsarten und Funktionen von Prozeßführungssimulatoren	212
6.3.2	Simulatorsteuerung	215
6.3.3	Bedienoberfläche.	217
6.3.4	Realisierungsvarianten	217
6.4	Beispiele	221
6.5	Entwicklungstendenzen.	229
6.6	Literatur	230

Erfahrungen mit kommerziellen Simulationswerkzeugen

7	Stand, Probleme und zukünftige Weiterentwicklung von kommerziellen Simulationsprogrammen aus Sicht der Anwender	235
	<i>W. Gutermuth</i>	
7.1	Einführung	235
7.2	Prozeßsimulatorelemente	236
7.2.1	Stoffsysteme	236
7.2.2	Unit-Operation-Modelle	240
7.2.2.1	Überblick	240
7.2.2.2	Black-Box-Modelle	240
7.2.2.3	Flasch-Heater-Modelle	241
7.2.2.4	Mehrstufen-Modelle	241
7.2.2.5	Druckänderungsmodelle	242
7.2.2.6	Reaktoren	242
7.2.2.7	Zusammenfassung	243
7.2.3	Generelle Simulatorfähigkeiten	245
7.2.3.1	Sequencing und Tearing	245
7.2.3.2	Konvergenz	247
7.2.3.3	Feedforward- und Feedback-Controller	248
7.2.3.4	Optimierung	249
7.2.3.5	Schnittstellen	249
7.2.4	Benutzeroberfläche	250
7.2.4.1	Eingabe	251
7.2.4.2	Grafik	252
7.2.4.3	Ausgabe	253
7.2.4.4	Interaktive Simulation	254
7.2.5	Zusatzprogramme	254
7.3	Zusammenfassung	255
7.4	Literatur	257
8	Praxiserfahrung mit der dynamischen Anlagensimulation am Beispiel SPEEDUP	259
	<i>W. Kothe, P. Kaßler, D. Schwarz</i>	
8.1	Wissenswertes zu SPEEDUP	259
8.2	Gründe für die Beschaffung	259
8.3	SPEEDUP – ein dynamischer Simulator	262
8.4	Integration von SPEEDUP in der Hüls-CAPE Umgebung	265

8.5	Anwendungen von SPEEDUP in der Praxis	269
8.5.1	Kolonnen	269
8.5.1.1	Batchdestillation	269
8.5.1.2	Regelverhalten	270
8.5.2	Reaktion	272
8.5.2.1	Kinetik und Gleichgewicht einer Gasreaktion	272
8.5.3	Rohrleitungen	274
8.5.3.1	Zufrieren einer Rohrleitung	274
8.5.3.2	Leckerkennung und -ortung	276
8.5.4	Behälter	278
8.5.4.1	Sicherheitsanalyse	278
8.5.5	Leitstandskopplung und Trainingsimulator	282
8.6	Systementwicklung von SPEEDUP – vom theoretischen Hochschulprogramm zum Problemlöser für die industrielle Praxis	284
8.7	Heutiger und zukünftiger Einsatz von SPEEDUP	289
9	Erfahrungen mit einem regelungstechnisch orientierten Simulationswerkzeug	291
	<i>R. Perne</i>	
9.1	Einführung	291
9.2	Charakterisierung des verwendeten Simulationswerkzeuges	293
9.3	Regelungstechnische Anwendungen	296
9.3.1	Prozeßanalyse mit Hilfe von Modellbildung und Simulation	296
9.3.1.1	Einleitung	296
9.3.1.2	Modellierung	296
9.3.1.3	Simulation	299
9.3.1.4	Resultate	305
9.3.2	Entwurf eines modellgestützten Zustandsreglers am Prozeßsimulator	306
9.3.2.1	Einleitung	306
9.3.2.2	Aufgabenstellung und Lösungsansatz	306
9.3.2.3	Test und Projektierung des MZR	309
9.3.2.4	Beispiele	311
9.3.3	Test einer Fuzzy-Regelung in der Computersimulation	328
9.3.3.1	Aufgabenstellung	328
9.3.3.2	Fuzzy Control	330
9.3.3.3	Lösungskonzept	338
9.3.3.4	Resultate	343
9.4	Zusammenfassung und Bewertung	344
9.5	Literatur	344

Simulation spezieller Prozesse

10	Simulation thermischer Trennverfahren fluider Vielkomponentengemische.	349
	<i>A. Górak</i>	
10.1	Einführung	349
10.2	Modellierung thermischer Trennverfahren	351
10.3	Mathematische Modelle thermischer Trennverfahren	355
10.3.1	Stoffaustauschmodell	359
10.3.2	Stofftransport in Vielkomponentengemischen.	363
10.3.3	Modell der theoretischen Stufe	366
10.3.4	Short-Cut-Methoden	368
10.3.5	„Black-Box-Modell“	369
10.4	Methoden zur Lösung der Modellgleichungen	370
10.4.1	Systeme nichtlinearer algebraischer Gleichungen	371
10.4.2	Differential-algebraische Gleichungssysteme	376
10.5	Simulation der Kolonnenauslegung	376
10.5.1	Trennsequenz	377
10.5.2	Trennschärfe, Kolonnendimensionierung	378
10.5.2.1	Phansengleichgewichte	378
10.5.2.2	Stoffwerte	381
10.5.2.3	Korrekturfaktoren für die Abweichung vom Gleichgewichtszustand	382
10.5.2.4	Sensitivität der Rechenergebnisse auf fehlerhafte Simulationsparameter	385
10.5.2.5	Betriebsparameter	387
10.5.3	Dynamische Simulation thermischer Trennverfahren	387
10.5.4	Vergleich der Modelle.	388
10.6	Ausblick	395
10.7	Literatur	399
10.8	Verzeichnis der Formelzeichen	407
11	Simulation bioverfahrenstechnischer Prozesse	409
	<i>A. Munack</i>	
11.1	Einführung	409
11.2	Aufstellung mathematischer Modelle für die Simulation bioverfahrenstechnischer Prozesse	410

11.2.1	Grundlegende Bilanzen	410
11.2.2	Wachstumskinetiken	412
11.2.3	Produktbildung	414
11.2.4	Strukturierte und segregierte Modelle	415
11.2.5	Gastransport	415
11.2.6	Gesichtspunkte für die Simulation bioverfahrenstechnischer Prozesse	417
11.3	Identifikation unbekannter Modellparameter	419
11.3.1	Einführung in die Problemstellung und einige Lösungsmethoden	419
11.3.2	Ermittlung der erreichbaren Genauigkeit der Parameter- schätzung	422
11.3.3	Bewertung des Informationsgehalts von Messungen und daraus abgeleitete Versuchsplanung	426
11.3.4	Entwurf eines optimierten Eingangsgrößenverlaufs zur Parameterschätzung	428
11.3.5	Sensorauswahl und -positionierung für einen Blasensäulen- Bioreaktor	436
11.3.5.1	Beschreibung des Systems und seiner Modellierung	436
11.3.5.2	Formulierung der zu lösenden Instrumentierungsprobleme	440
11.3.5.3	Ergebnisse zur Sensorauswahl und -positionierung	441
11.4	Einsatz von Simulationsmodellen für die Prozeßführung	445
11.4.1	Wirkungsweise und Eigenschaften des OLFO-Algorithmus.	446
11.4.2	Studie zur erforderlichen Modellgüte für das OLFO-Verfahren	450
11.4.3	Ermittlung der on-line Identifizierbarkeit von Prozeßparametern	453
11.5	Schlußbewertung	455
11.6	Literatur	455
	Verzeichnis der verwendeten Abkürzungen und Warenzeichen	458
	Register	464

This Page Intentionally Left Blank

Einleitung

Die Prozeßsimulation hat sich zu einem wichtigen, in manchen Anwendungen sogar zu einem unentbehrlichen Werkzeug des Verfahreningenieurs entwickelt. Die Simulation als „Experiment am Modell“ birgt für die wissenschaftliche und technische Erkenntnis und für viele praktische Anwendungen ein beträchtliches Potential an Rationalisierung und an „Intelligenzverstärkung“, welches in immer stärkerem Maße genutzt wird.

In der Simulation lassen sich Untersuchungen an verfahrenstechnischen Prozeßmodellen schnell, billig und bequem durchführen. An realen Prozessen wären diese Untersuchungen zeitraubend, aufwendig, schwierig, gefährlich oder schlicht unmöglich. Diese Vorteile der Simulation seien an einigen Beispielen belegt:

- Das Verhalten eines Prozesses bei verschiedener Apparateabmessung kann in der Simulation oft durch Wiederholung der Rechnung mit anderen Parametern untersucht werden. Die Untersuchung in der Realität würde beträchtliche Investitionen, Umbauten etc., erfordern.
- Die Simulation durchgehender Reaktionen dient zur Entwicklung sicherer Betriebsbedingungen. Die Durchführung entsprechender Versuche an realen Prozessen verbietet sich von selbst.
- Die in der Simulation bereitgestellten Informationen müßten an realen Prozessen mit aufwendiger Meßtechnik erschlossen werden. Viele Modellinformationen lassen sich mit wirtschaftlichem Aufwand meßtechnisch nicht erschließen. Dies gilt insbesondere bei dynamischen, transienten Übergangszuständen.

Diese Vorteile der Simulationstechnik werden heute in allen Phasen des Lebenszyklus von Prozessen genutzt. Simulationen werden in der Verfahrensentwicklung und Auslegung, in der Planung bis zur Prozeßführung durchgeführt. In den einzelnen Phasen haben Simulationstechniken jedoch einen unterschiedlichen Entwicklungs- und Einsatzstand erreicht. Während für das Prozeßdesign inzwischen leistungsfähige Simulatoren verfügbar sind, steht der Einsatz in der Prozeßführung erst in den Anfängen.

Der Fortschritt in der Prozeßsimulation wird von verschiedenen aktiven Entwicklungslinien beeinflusst:

- Die Entwicklung der Rechnertechnologie bringt immer leistungsfähigere Prozessoren hervor. Die Lösung einer exponentiell steigenden Anzahl von mathematischen Instruktionen pro Zeiteinheit wird auf immer billigeren Rechnern möglich. Die Rechenleistung erlaubt die Lösung auch hochdimensionaler Probleme.
- Die Entwicklung von Simulatoren wird durch neue Ansätze der Programmierung und der Datenstrukturierung wesentlich gefördert. Diese Ansätze erlauben die Implementierung einer anwendergerechten Simulatorfunktionalität, die sich in den Erfahrungen mit dem Umgang mit Simulationsprogrammen herausgebildet hat.
- Der Entwicklung der Numerik entspringen neue leistungsfähige Algorithmen, welche eine zuverlässige und effiziente Lösung auch schlechtbestimmter Gleichungssysteme erlauben.
- Die Entwicklung der Modellierung hat durch die Systematisierung der Methodik und durch Fortschritte in einigen Basisdisziplinen zu einer verbesserten mathematischen Beschreibung einiger Prozesse geführt.
- Auch bei den Anwendungen ist eine Systematisierung und Strukturierung des Simulatoreinsatzes zu beobachten. Bei der Apparateauslegung, aber auch bei der modellgestützten Prozeßführung, sind in den letzten Jahren deutliche Fortschritte erzielt worden.

Das Zusammenwirken dieser aktiven Entwicklungslinien hat deutliche Fortschritte in den Grundlagen und Anwendungen der Prozeßsimulation bewirkt. Die Simulation verfahrenstechnischer Prozesse ist damit ein Gebiet, in dem verschiedene Disziplinen intensiv zusammenwirken. Die Prozeßsimulation entwickelt sich aus den einzelnen Disziplinen und ihrem Zusammenspiel. Diese enge Verflechtung tritt auch in den einzelnen Beiträgen dieses Buches auf: Einige Themen werden in mehreren Beiträgen behandelt – sie müssen auch aus verschiedenen Blickwinkeln beleuchtet werden.

Die Monographie hat folgende Schwerpunkte:

A. Grundlagen und Methoden der Prozeßsimulation

In diesem Schwerpunkt sind die Grundlagen der Modellierung und der Numerik dargestellt. Diese Themen sind die Basis jeder Simulation, sie werden in praktisch allen anderen Beiträgen wieder aufgenommen. In dem Schwerpunktthema sind weiterhin Kapitel über die stationäre und dynamische Prozeßsimulation aufgenommen. Diese Beiträge geben eine Orientierung für die beiden wichtigsten Arten der Prozeßsimulation.

B. Prozeßsimulation als Werkzeug der Verfahrensingenieure

Die Beiträge dieses Schwerpunktthemas gehen auf die wichtigsten Anwendungen der Prozeßsimulation in der Arbeit der Verfahrensingenieure ein. Die Anwendungsgebiete reichen von der Verfahrensentwicklung, der Auslegung bis in den Betrieb der Anlagen. In den verschiedenen Kapiteln kommt die enge Verbin-

derung von Prozeßentwicklung und Prozeßführung zum Ausdruck. Dies äußert sich in einer engen Verzahnung von Verfahrens- und Automatisierungstechnik bei der Bearbeitung von Prozeßsimulationen.

C. Erfahrungen mit kommerziellen Simulationswerkzeugen

Prozeßsimulationen werden heute häufig mit käuflichen Programmpaketen durchgeführt. Diese Programmpakete sind für die Anwender eine große Erleichterung, erlauben sie doch Problemlösungen ohne Programmierarbeiten durchführen zu müssen. Allerdings besitzen diese Simulatoren noch nicht die Entwicklungsreife, die eine problemlose Anwendung auch von Nicht-Fachleuten erlauben würde. In dieser Themengruppe schildern erfahrene Praktiker aus der Simulatoren einsetzenden chemischen Industrie ihre Erfahrungen mit kommerziellen Simulationspaketen. Neben den stationären und den dynamischen Prozeßsimulatoren werden auch regelungstechnische Simulationspakete beschrieben. Diese Klasse von Simulatoren besitzt bei der Auslegung von Regelungssystemen eine steigende Bedeutung.

D. Simulation spezieller Prozesse

Beiträge über die Simulation spezieller Prozesse ergänzen die bisherigen eher allgemeineren Ausführungen. Ein Kapitel geht auf die Simulation thermischer Trennverfahren ein, das „Arbeitspferd“ der Prozeßsimulation. Auf diesem Anwendungsgebiet liegen bereits umfangreiche Erfahrungen vor, so daß dieses Spezialgebiet als Gradmesser für den Erfolg der Methodenanwendung gelten kann. Ein weiterer Beitrag befaßt sich mit Anwendungen der Simulationstechnik auf biotechnologische Prozesse. Biotechnologische Prozesse treffen auf ein wohlentwickeltes Instrumentarium der Modellierung und Simulation. Das Kapitel geht auf biotechnologische Fragestellungen ein, die mit der Simulationstechnik angegangen wurden.

This Page Intentionally Left Blank

Grundlagen und Methoden der Prozeßsimulation

This Page Intentionally Left Blank

1 Modellbildung als Grundlage der Prozeßsimulation

W. Marquardt

1.1 Einführung

Modellbildung und Simulation werden in der Verfahrenstechnik in vielfältiger Weise eingesetzt. Für die stationäre Auslegung neuer oder für die Verbesserung bestehender Anlagen verwendet man heute routinemäßig kommerziell verfügbare Programmsysteme, mit denen sich sowohl die stationäre Simulation als auch eine rigorose Optimierung des Betriebspunktes durchführen lassen. Die Simulation des dynamischen Prozeßverhaltens wird meist nur in ausgesuchten Anwendungsfällen herangezogen. Als Beispiele sind die Auslegung und Führung von Batchprozessen, der Entwurf und die Analyse von Regelsystemen, das An- und Abfahren oder die Analyse des Anlagenverhaltens nach einer Betriebsstörung zu nennen. In den letzten Jahren haben Trainingssimulatoren für die Aus- und Weiterbildung von Bedienpersonal stark an Bedeutung gewonnen, um trotz einer stetig wachsenden Anlagenkomplexität den hohen Anforderungen an Sicherheit, Umweltverträglichkeit und Produktqualität genügen zu können. Die prozeßbegleitende Simulation eines detaillierten dynamischen Prozeßmodells im Rahmen modellgestützter Konzepte zur Überwachung und Führung von Prozessen wird bisher noch selten, aber mit deutlich zunehmender Tendenz industriell eingesetzt.

Allgemein gewinnen modellgestützte Techniken für Auslegung und Führung verfahrenstechnischer Prozesse und damit auch die Prozeßsimulation als ein wesentliches Hilfsmittel immer mehr an Bedeutung. Die konsequente Nutzung von Simulationstechniken wird als ein entscheidender Beitrag zur Verbesserung eines Verfahrens in einem umfassenden Sinne und zur Sicherung der Wettbewerbsfähigkeit einer Produktion angesehen [1].

Grundlage einer jeden Prozeßsimulation ist die Verfügbarkeit eines ausreichend genauen mathematischen Modells zur Beschreibung der wesentlichen Prozeßeigenschaften. Solche Modelle sind häufig jedoch nicht vorhanden. Dies gilt in besonderem Maße für die dynamische aber auch für die stationäre Simulation, wenn eine detaillierte Betrachtung einer Prozeßstufe erwünscht ist. In diesen Fällen ist vor Beginn der Simulationsstudie ein mathematisches Prozeßmodell zu entwickeln. Die heute gebräuchlichen Simulationssysteme, die alle ausreichende

Hilfsmittel für die Implementierung eines Modells bereitstellen, bieten hierbei kaum Unterstützung [2, 3].

Die verfahrenstechnische Modellierung hat eine lange Tradition (vgl. z. B. [4]); trotzdem stehen bis heute keine anerkannten, allgemeingültigen Methoden zur Ableitung eines hinreichend genauen und konsistenten Modells bei gleichzeitiger Minimierung des Arbeitsaufwands zur Verfügung. Zwangsläufig ist die Prozeßmodellierung daher häufig mit einem hohen Aufwand verbunden [5], der im industriellen Umfeld nur dann aufgebracht wird, wenn der zu erwartende (materielle oder auch ideelle) Gewinn a priori entsprechend hoch eingeschätzt wird. Eine weitere Ursache liegt in der Vielfältigkeit verfahrenstechnischer Prozesse und der dabei ablaufenden physikalisch-chemisch-biologischen Vorgänge, die in vielen Fällen noch nicht in dem Maße aufgeklärt und verstanden sind, wie es für eine (detaillierte) mathematische Modellierung erforderlich wäre. Daher wird Prozeßmodellierung in den Unternehmen meist von einer kleinen Zahl von Experten durchgeführt, die sowohl über gute Kenntnisse in der Verfahrenstechnik, der Systemtheorie und der angewandten Mathematik als auch über umfangreiche Modellierungserfahrungen verfügen.

Obwohl Modellbildung neben profundem Sachwissen auch Kreativität und Intuition erfordert und damit auch als eine Kunst angesehen werden kann [6], soll im Rahmen dieses Beitrags der Versuch unternommen werden, den Modellierungsvorgang als solchen zu systematisieren. Dabei kann und soll nicht das Ziel verfolgt werden, zu einem starren Modellierungsalgorithmus zu kommen, der für die Kreativität des Modellierers keinen Raum mehr läßt. Vielmehr wird eine Richtlinie für die Modellbildung angestrebt, die dem Bearbeiter unabhängig von der konkreten Modellierungsaufgabe den methodischen Zugang zur Problemlösung erleichtert.

Die vorgeschlagene Vorgehensweise basiert auf der Einsicht, daß es sich bei der Modellbildung um die Entwicklung eines Systems (des mathematischen Modells also) im Sinne der Systemtechnik handelt [7–10]. Damit bieten sich auch die dort vorgeschlagenen Techniken als Ausgangspunkt für die Entwicklung einer Modellierungsmethodik an. Im zweiten Abschnitt wird zunächst der Zusammenhang zwischen Modell und System einerseits und zwischen Systementwicklung und Modellierung andererseits aufgezeigt. Im folgenden Abschnitt wird zur Motivation der wesentlichen Elemente eines systemtechnisch begründeten Modellierungsansatzes ein Beispiel eingeführt. Die wesentlichen Modellbausteine, aus denen sich jedes Prozeßmodell aufbauen läßt, werden in Abschnitt 4 dargestellt. Schließlich widmet sich der letzte Abschnitt dem Aufbau eines mathematischen Prozeßmodells durch Aggregation und schrittweise Verfeinerung der definierten Modellbausteine.

1.2 Modellierung als Systementwicklungsprozeß

Um die Analogie zwischen der Erstellung eines Modells und der Entwicklung eines Systems aufzuzeigen, sind zunächst die Begriffe System und Modell sowie Systementwicklung und Modellierung näher zu charakterisieren. Detailliertere Ausführungen sind den Monographien [7–15] zu entnehmen.

1.2.1 Der Begriff des Systems

Stellvertretend für die zahlreichen Definitionen eines Systems, welche die relevanten charakterisierenden Aspekte mit unterschiedlicher Gewichtung betonen, sei hier die in DIN 19226 (Regelungs- und Steuerungstechnik) niedergelegte Definition angegeben:

Ein System . . . ist eine abgegrenzte Anordnung von aufeinander einwirkenden Gebilden. Solche Gebilde können sowohl Gegenstände als auch Denkmethode und deren Ergebnisse . . . sein. Diese Anordnung wird durch eine Hüllfläche von ihrer Umgebung abgegrenzt oder abgegrenzt gedacht. Durch die Hüllfläche werden Verbindungen des Systems mit seiner Umgebung geschnitten. Die mit diesen Verbindungen übertragenen Eigenschaften und Zustände sind die Größen, deren Beziehungen untereinander das dem System eigentümliche Verhalten beschreiben. Durch zweckmäßiges Zusammenfügen und Unterteilen von solchen Systemen können größere und kleinere Systeme entstehen.

Abhängig von der Art der Elemente eines Systems lassen sich abstrakte (oder konzeptionelle) und reale Systeme unterscheiden. Abstrakte Systeme wie beispielsweise eine Sprache, ein Gleichungssystem oder ein technisches Regelwerk bestehen aus Konzepten (im Sinne von gedanklichen Konstrukten), während reale Systeme aus Objekten (im Sinne von abgrenzbaren materiellen Einheiten) aufgebaut sind. Eine andere wichtige Klassifizierung wird von Patzak [8] mit den Begriffen Aufbau- und Ablaufsystem vorgenommen. Unter einem Aufbausystem versteht man ein reales oder abstraktes System, wenn im Sinne einer statischen Betrachtungsweise lediglich der durch Elemente und deren Verknüpfungen gekennzeichnete Systemaufbau wiedergegeben wird. Dagegen spricht man von Ablaufsystemen, wenn die Systemelemente Operationen entsprechen, die in einer bestimmten Reihenfolge abzuarbeiten sind. Im Fall eines Batchprozesses wäre die Anlage als ein reales Aufbausystem zu klassifizieren, während es sich bei den Rezepturen um abstrakte Ablaufsysteme handelt.

Die Wahl der Systemgrenze und die damit verbundene Zuordnung von Gebilden zu System oder Umgebung erlaubt einerseits die gewollte Ausgrenzung sol-

cher Gebilde, die für die mit der Systemfestlegung verfolgten Absichten unwesentlich sind. Andererseits kann durch diese Wahl aber auch eine Abgrenzung zwischen beschreibbaren (oder beeinflussbaren) und zwischen nicht beschreibbaren (oder nicht beeinflussbaren) Teilen eines betrachteten Gegenstandsbereichs vorgenommen werden.

Jedes System kann in Teilsysteme zerlegt (Dekomposition) oder aber zusammen mit anderen Systemen zu einem größeren System zusammengefügt (Aggregation) werden (vgl. Abb. 1-1). Diese häufig über mehrere Hierarchieebenen hinweg vorgenommene zielorientierte Strukturierung endet bei nicht weiter zerlegbaren elementaren Systemen (oder Elementen im engen Sinne). Die elementaren Systeme und deren Eigenschaften legen die Granularität eines Systems fest. Der Wahl der Granularität und der hierarchischen Ebenen kommt eine große Bedeutung zu. Eine zu feine Granularität erhöht den Aufwand und reduziert die Übersichtlichkeit der Systembeschreibung. Eine zu grobe Granularität dagegen limitiert deren Anwendungsmöglichkeiten bei der Bearbeitung konkreter Aufgabstellungen. Somit ist ein Kompromiß gesucht, der zwischen der Ausdrucksstärke der Systembeschreibung und des mit ihrer Verwendung verbundenen Aufwandes abwägt. Ähnliche Überlegungen gelten für Zahl und Art der eingeführten hierarchischen Ebenen. Sie werden gerade so festgelegt, daß bestimmte, für die Bearbeitung einer speziellen Fragestellung erforderlichen Aspekte eines Systems offengelegt werden, während alle anderen verborgen bleiben.

Jedem elementaren System werden zur näheren Kennzeichnung Attribute (Eigenschaften) zugeordnet, die Werte aus einem vorgegebenen Definitionsbereich annehmen können. Neben metrisch skalierten Definitionsbereichen sind

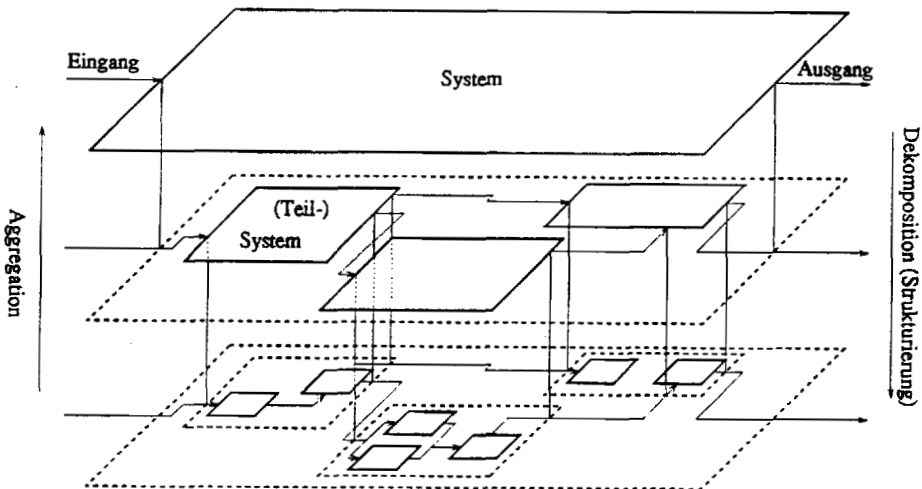


Abb.1-1. Der hierarchische Aufbau von Systemen.