

Ein effizienter Lösungsansatz für die dynamische Simulation und Optimierung*

N.M. Cruz-Bournazou, T. Barz, H. Arellano-Garcia, G. Wozny

Institut für Prozess- und Verfahrenstechnik, TU Berlin, 10623 Berlin

Trotz signifikanter Fortschritte in den letzten Jahren und der Entwicklung neuer Softwarewerkzeuge bereitet die robuste numerische Lösung der dynamischen Simulation und Optimierung häufig Schwierigkeiten. Die hochdimensionalen Systeme aus der Prozess- und Verfahrenstechnik benötigen hierfür besondere Ansätze für die Lösung solcher Probleme. Es existieren zwar einige effiziente Methoden, aber diese sind zumeist für eine bestimmte Art von dynamischen Modellgleichungen oder für eine spezielle Anwendung, etwa an Parameterschätzprobleme oder optimale Versuchsplanung adaptiert bzw. eingeschränkt. Die meist zu behandelnden Probleme sind jedoch als ein vollständig implizites DAE-System definiert. Sie erfordern zudem für die Formulierung bzw. Lösung von Optimierungsproblemen: Simulationsstudien, Sensitivitätsanalysen sowie geeignete Startwerte.

In diesem Beitrag wird ein effizienter Lösungsansatz für eine systematische Reduktion des Rechenaufwands durch eine Integration der Modellgleichungen zusammen mit ihren Sensitivitäten vorgestellt. Der Hauptvorteil stellt u.a. die allgemeine Schnittstelle für die Definition von dynamischen Prozessmodellen dar, die einem voll impliziten System mit einem Index von beliebiger Ordnung entspricht. Der entwickelte Löser basiert auf der orthogonalen Kollokation mit finiten Elementen. Eine interne numerische Differentiation ermöglicht die effiziente Berechnung der dynamischen Sensitivitäten für die Lösung von Optimierungsproblemen. Der entwickelte Solver zeigt sich robust im Vergleich zu anderen kommerziell verfügbaren Solvern. Darüber hinaus hat sich die Version *Sparse Solver* als besonders effizient bei der Lösung von PDE-Problemen erwiesen. Die Leistungsfähigkeit des entwickelten Lösungsansatzes wird an folgenden Anwendungen erläutert:

- Minimale Zeit und optimale Steuerungsstrategie für ein Multikomponenten-Destillationskolonnen-Modell unter Produktwechsel-Bedingungen
- Parameterschätzung für die Adsorptionsisotherme in einer chromatographischen Säule
- Optimale Versuchsplanung für ein Fed-Batch-Reaktor

**Danksagung*: Die Arbeit wird von der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) im Rahmen des Transregio-Sonderforschungsbereiches SFB/TR 63 InPROMPT „Integrierte chemische Prozesse in flüssigen Mehrphasensystemen“ gefördert.