Abschlussbericht des Forschungsprojektes

# Verbundprojekt: Analyse und Synthese mehrphasiger Reaktionssysteme mit Methoden der Nichtlinearen Dynamik

gefördert mit den Mitteln des BMBF (FKZ:03C0268C/7)

E. Dikow, G. Fernholz, M. Friedrich, K. Klatt, A. Schwarz, C. Willems

Bayer AG, Leverkusen

8. August 2002

# 1 Inhaltsverzeichnis

1	Inł	haltsverzeichnis	_2		
2	Αι	ufgabenstellung	_4		
3	Pr	ojektdurchführung	_4		
4	Αι	usgangssituation und Stand der Technik	_5		
5	Zu	isammenarbeit mit anderen Stellen	_7		
6	Ergebnisse Teilprojekt "Analyse und Synthese nichtlinearer Prozessführungskonzepte für Reaktivrektifikationskolonnen"8				
	6.1	Identifikation eines Beispielprozesses bei der Bayer AG	_ 8		
	6.2	Modellierung des Prozesses	_ 9		
	6.3	Implementierung des Modells in einen dynamischen Prozesssimulato	r 9		
	6.4	Untersuchung der nichtlinearen Dynamik des Prozesses ("Fortsetzungsmethoden")	_ 9		
	6.5	Einführung und Erprobung der Fortsetzungsverfahren bei der Bayer	AG 10		
	6.	5.1 Ausgangssituation	10		
	6. 6	5.2 Konzeption der Schnittstelle	10 10		
	6.6	Festlegung der Anforderungen an eine Regelung	11		
	6.7	Entwurf eines linearen Regelungskonzeptes für den Prozess	12		
	6.	7.1 Auswahl geeigneter Messstellen	12		
	6.	7.2 Festlegung der Regelungsstruktur	13		
	6. 6	7.3 Ausgangspunkt für den Entwurf der linearen Regelung	18 23		
	6.	7.5 Reglerperformance in der nichtlinearen Simulation	32		
	6.	7.6 Zusammenfassung	35		
	6.8	Entwurf einer nichtlinearen Regelung mit Zustandsbeobachter für der Prozess	า 36		
	6.9	Vergleichende Bewertung beider Regelungen hinsichtlich der Regelgüte, Implementierbarkeit und Wirtschaftlichkeit	38		
7	Er Rü	gebnisse Teilprojekt "Periodische Prozessführung von ihrkesselreaktoren"	39		
	7.1	Identifikation geeigneter Modelle von Beispielprozessen bei der Baye AG	r 39		

7.1.1 Beispiel 1	39
7.1.2 Beispiel 2	41 42
7.2 Modellrechnungen zur Optimierung der Prozesse für station kontinuierlichen Betrieb	ären 43
7.3 Periodische Anregung des Prozesses im Modell und Verglei konventioneller Prozessfahrweise	ch mit 44
7.4 Regelungstechnisches Konzept zur Umsetzung der periodis Prozessführung	chen 48
7.5 Numerische Vorabanalyse des potenziellen nichtlinearen Ch eines dynamischen Systems	arakters 49
8 Verwertbarkeit der Ergebnisse	51
8.1 Teilprojekt "Analyse und Synthese nichtlinearer Prozessführungskonzepte für Reaktivrektifikationskolonnen	" 51
8.1.1 Bewertung des Anwendungsbeispiels	51
8.1.2 Prinzipielle Erkenntnisse und neue Fragestellungen	51
8.2 Teilprojekt "Periodische Prozessführung von Ruhrkesselrea	ktoren"_ 53
9 Fortschritte bei anderen Stellen	55
9.1 Teilprojekt "Analyse und Synthese nichtlinearer Prozessführungskonzepte für Reaktivrektifikationskolonnen	" 55
9.2 Teilprojekt "Periodische Prozessführung von Rührkesselrea	ktoren"_ 57
10 Erfolgte und geplante Veröffentlichungen	58
11 Literaturhinweise	58

# 2 Aufgabenstellung

Produktionsprozesse, die mehrere Verfahrensschritte in einem Apparat verschalten, bilden oft mehrphasige Reaktionssysteme. Diese zeichnen sich in der Regel durch ausgeprägte nichtlineare Dynamiken aus. Ziel des Projektes war daher, Methoden der nichtlinearen Dynamik zu nutzen, um solche Prozesse hinsichtlich ihrer Produktivität und Qualität bei gleichzeitiger Berücksichtigung sicherheitstechnischer Schranken zu gestalten und zu führen.

Aufgabenschwerpunkt der Bayer AG war dabei einerseits technisch relevante Beispielprozesse und wirtschaftliche Frageschwerpunkte in das Verbundprojekt einzubringen. Da andererseits die Erkenntnisse aus der nichtlinearen Dynamik bislang nur in beschränktem Maße Eingang in die industrielle Anwendung gefunden haben, war es Aufgabe der Bayer AG, die Ergebnisse mit denen zu vergleichen, die mit den derzeit bei der Bayer AG üblichen Methoden erzielt werden können. Die enge Zusammenarbeit mit den Projektpartnern aus den Hochschulen unterstützt dabei den Transfer der hierzu notwendigen Technologien aus dem Bereich der universitären Forschung in die industrielle Anwendung.

# 3 Projektdurchführung

Bei dem Einsatz der Methoden wurden zwei Schwerpunkte gebildet: Im ersten Schwerpunkt wurden Systeme mit verteilten Parametern untersucht, bei denen Fragestellungen der Systemanalyse sowie der Prozessbeobachtung und –regelung behandelt wurden. Im zweiten Schwerpunkt standen Prozesse mit konzentrierten Parametern im Vordergrund, bei denen die Fragestellungen des ersten Schwerpunkts um Aspekte der periodischen Prozessführungen erweitert wurden. Entsprechend den zwei Schwerpunkten wurde das Forschungsvorhaben parallel in zwei Teilprojekten durchgeführt.

Das Teilprojekt "Analyse und Synthese nichtlinearer Prozessführungsmethoden für Reaktivrektifikationskolonnen", das den ersten Schwerpunkt inhaltlich abdeckt, wurde in den Schritten:

- 1. Identifikation eines Beispielprozesses bei der Bayer AG,
- 2. Modellierung des Prozesses,
- 3. Implementierung des Modells in einen dynamischen Prozesssimulator,
- 4. Untersuchung der nichtlinearen Dynamik des Prozesses ("Fortsetzungsmethoden"),
- 5. Einführung und Erprobung der Fortsetzungsmethoden bei der Bayer AG,
- 6. Festlegung der Anforderungen an eine Regelung,
- 7. Entwurf eines linearen Regelungskonzeptes für den Prozess,
- 8. Entwurf einer nichtlinearen Regelung mit Zustandsbeobachter für den Prozess und
- 9. vergleichende Bewertung beider Regelungen hinsichtlich der Regelgüte, Implementierbarkeit und Wirtschaftlichkeit.

bearbeitet. Die Schritte 1-3, 6, 7 und 9 wurden schwerpunktmäßig bei der Bayer AG, die Schritte 4 und 8 hauptsächlich beim ISR in Stuttgart, der Schritt 5 gemeinsam durchgeführt.

Der zweite Schwerpunkt wurde im Teilprojekt "Periodische Prozessführung von Rührkesselreaktoren" bearbeitet und gliederte sich in folgende Schritte:

- 1. Identifikation geeigneter Beispielprozessen bei der Bayer AG und deren Modellierung.
- 2. Überarbeitung und softwaretechnische Erweiterung der Modelle, so dass dynamische und stationäre Simulationsrechungen sowie Optimierungsrechnungen möglich sind (Implementierung in SpeedUp).
- 3. Modellrechnungen zur Optimierung der Prozesse für stationären kontinuierlichen und absatzweisen Betrieb (Batch).
- 4. Periodische Anregung des Prozesses im Modell durch numerische Realisierung diverser periodischer Anregungsfunktionen.
- 5. Vergleich der Ergebnisse der Simulationsrechnungen für periodische Anregung mit stationärem kontinuierlichen oder absatzweisen Betrieb.
- 6. Regelungstechnische Umsetzung der periodischen Prozessführung.
- 7. Entwicklung und Anwendung einer einfachen Vorgehensweise zur numerischen Vorabanalyse des potenziellen nichtlinearen Charakters eines dynamischen Systems.

Die Schritte eins bis fünf sowie sieben wurden alle bei der Bayer AG bearbeitet. Es stellte sich heraus, dass die regelungstechnische Umsetzung der periodischen Fahrweise (Schritt 6) für die vorliegenden Beispielsysteme nicht sinnvoll ist. Entsprechend wurde ein Antrag auf Kürzung des Projektes beim BMBF eingereicht und bewilligt. Beim Projektpartner an der RWTH Aachen wurden die Grundlagen für ein solches Regelungskonzept erarbeitet und getestet, so dass für zukünftige, geeignetere Anwendungen ein derartiges mathematisches Werkzeug zur Verfügung steht.

Darüber hinaus befasste sich der Projektpartner mit der Entwicklung von Werkzeugen und führte ebenfalls Simulationsstudien mit den Beispielmodellen der Bayer AG durch (Schritte 2 bis 5). Die dabei verwendeten Werkzeuge und Methoden waren jedoch unterschiedlich, so dass die Arbeiten der RWTH Aachen und der Bayer AG sich gegenseitig ergänzten. Konkret wurden durch den Projektpartner grundlegende Untersuchungen mit dem  $\pi$ -Kriterium zur a priori Analyse der periodischen Fahrweise von Modellen durchgeführt. Außerdem wurden Optimierungswerkzeuge entwickelt und eingesetzt, die Periodizitätsbedingungen berücksichtigen können.

# 4 Ausgangssituation und Stand der Technik

Während in der universitären Forschung in den letzten Jahren ein recht umfangreiches Verständnis im Bereich der nichtlinearen Prozessdynamik erarbeitet wurde und Methoden und Werkzeuge zur Nutzung dieses Verständnisses entwickelt wurden (z.B. *Golubitsky und Schaefer 1985, Kienle u.a. 1995 und Seydel 1996*) hat sich diese Technik nicht oder nur sehr langsam in der industriellen Praxis durchgesetzt. Der Einsatz der nichtlinearen Analysemethoden würde eine Abschätzung des technischen und wirtschaftlichen Potenzials erlauben, das durch die Verwendung von nichtlinearen Prozessführungskonzepten genutzt werden könnte. Ist ein entsprechendes Potenzial erkannt worden, so ist der nächste Schritt die Entwicklung einer Prozessführung, die die Effekte der nichtlinearen Dynamik nutzbar macht. Die Ausgangssituation kann somit dadurch charakterisiert werden, dass die Methoden zur

Nutzbarmachung brachliegender wirtschaftlicher und technischer Potenziale vorliegen, hier jedoch eine Lücke zwischen universitärer Forschung und industriellem Durchsetzungsgrad klafft. Diese Lücke zu schließen ist vorrangiges Ziel der Bayer AG in diesem Verbundvorhaben gewesen.

Im Bereich der nichtlinearen Regelung sind etliche Veröffentlichungen über Grundlagen, Verfahren und akademische Anwendungen erschienen (siehe z.B. *Bequette 1991, Engell 1995*), die sich grob in zwei Kategorien einteilen lassen können: geometrische (z.B. *Kravaris und Kantor 1990, Gilles u.a. 1994, Klatt 1995, Allgöwer 1996*) und modellprädiktive Verfahren (z.B. *Mayne und Michalska 1990, Rawlings u.a. 1994, Morari und Lee 1997*). Die dort untersuchten Beispielprozesse zeichneten sich in der Regel durch geringe Modellkomplexität aus. Darüber hinaus waren bei Projektbeginn keine dem Antragsteller bekannten Veröffentlichungen aus dem Bereich der industriellen Anwendung dieser nichtlinearen Methoden erschienen, an Hand derer eine Bewertung der Methoden für den Einsatz an realen Prozessen möglich wäre. Vornehmliches Ziel des Teilprojektes "Analyse und Synthese nichtlinearer Prozessführungsmethoden für Reaktivrektifikationskolonnen" war daher, den Methodentransfer aus der Universität in die industrielle Anwendung an Hand eines konkreten Betriebsprozesses zu unterstützen und an diesem Prozess einen Vergleich zwischen konventionellen linearen Regelungskonzepten und einer nichtlinearen Regelung durchzuführen.

Auch zum Themenbereich "Periodische Prozessführung" existiert eine Vielzahl von Veröffentlichungen sowohl zur Theorie als auch mit experimentellen Daten. Ein detaillierter Überblick zu dem Stand der Wissenschaft zu Projektbeginn findet sich in Kapitel 4 des Abschlußberichtes der RWTH Aachen.

Die Mehrzahl der Veröffentlichungen befaßt sich auch hierbei mit akademischen Beispielprozessen. Aus der industriellen Praxis sind zunächst keine Vorarbeiten im Schrifttum bekannt geworden, die sich mit der erfolgreichen Umsetzung eines Ansatzes zur periodischen Prozessführung befassen würden. Eine Ursache hierfür mag daran liegen, dass für kontinuierlich betriebene Prozesse oftmals keine hinreichend detaillierten kinetischen Ansätze zur modellhaften Beschreibung der Vorgänge bei Auslenkung eines Reaktionssystems aus dem stationären Betriebspunkt vorliegen. Darüber hinaus ist zu den vorliegenden Veröffentlichungen kritisch anzumerken, dass auch die für akademische Beispielprozesse gezeigten Verbesserungen durch periodische Prozessführung meist nicht von einem optimalen –bezüglich eines gewählten Gütekriteriums- Betriebszustand für eine kontinuierliche Fahrweise ausgegangen sind. Die angegebenen Verbesserungen könnten also auch durch eine verbesserte kontinuierliche Betriebsweise erreicht werden. Entscheidend für die Bewertung einer Verbesserung ist somit ein für den stationären Betrieb optimaler Referenzzustand. Dies wurde in den eigenen Untersuchungen berücksichtigt.

# 5 Zusammenarbeit mit anderen Stellen

Das Vorhaben wurde in Zusammenarbeit mit dem

Institut für Systemdynamik und Regelungstechnik Universität Stuttgart Pfaffenwaldring 9 70550 Stuttgart

und dem

Lehrstuhl für Prozesstechnik Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen Turmstr. 46 52056 Aachen

durchgeführt.

Die Schwerpunkte der Kooperationen lagen im Bereich "Analyse und Synthese nichtlinearer Prozessführungskonzepte für Reaktivrektifikationskolonnen" beim ISR in Stuttgart und im Bereich "periodische Prozessführung von Rührkesselreaktoren" beim LPT in Aachen (siehe auch Kapitel "3 Projektdurchführung").

Weitere Zusammenarbeit bei der Softwareanbindung zwischen der gab es Simulationsumgebung gPROMS und den am ISR in Stuttgart entwickelten Fortsetzungsmethoden mit dem

Max-Planck-Institut Dynamik komplexer technischer Systeme Zenit-Gebäude Leipziger Str. 44 D-39120 Magdeburg

und

Process Systems Enterprise Ltd. Bridge Studios 107a Hammersmith Road London W6 9DA United Kingdom

# 6 Ergebnisse Teilprojekt "Analyse und Synthese nichtlinearer Prozessführungskonzepte für Reaktivrektifikationskolonnen"

Die Untersuchungen im Teilprojekt "Analyse und Synthese nichtlinearer Prozessführungskonzepte für Reaktivrektifikationskolonnen" wurden gemäß dem Projektplan (vergl. "3 Projektdurchführung") vorgenommen. Die wesentlichen Vorgehensweisen und Ergebnisse werden im Folgenden zusammengefasst.

### 6.1 Identifikation eines Beispielprozesses bei der Bayer AG

Als Beispielprozess wurde eine Reaktivrektifikationskolonne aus einer Produktionsanlage der Bayer AG ausgewählt, in der das schwersiedende Produkt E gemäß dem Reaktionsschema

$$A + E \leftrightarrow B + D \tag{6.1.1}$$

$$A + D \leftrightarrow B + C \tag{6.1.2}$$

aus den Edukten B und C hergestellt wird. Das Anlagenschema der Kolonne ist in Abbildung 6.1.1 wiedergegeben. B und C werden mit dem Feed in die Kolonne gegeben. Das Produkt E wird als Schwersieder mit dem Sumpfprodukt, das Koppelprodukt A als Leichtsieder über Kopf abgezogen.



Abbildung 6.1.1: Schematische Darstellung des Prozesses.

Der Prozess wurde ausgewählt, da auf Grund der ungünstigen Lage der Reaktionsgleichgewichte und der Koppelung zwischen der Reaktion und der Stofftrennung eine ausgeprägte nichtlineare Dynamik des Prozesses erwartet werden kann und somit als für das Forschungsvorhaben besonders geeignet erscheint.

# 6.2 Modellierung des Prozesses

Für die Untersuchungen wurde ein mathematisches Modell des Prozesses entwickelt. Hierzu wurde die Kolonne formal in Bilanzräume wie Kolonnenböden, Verdampfer und Kondensator aufgeteilt. Kern des mathematischen Modells bilden die Differentialgleichungen für Masse und Energie für diese Bilanzräume.

Neben den Differentialgleichungen besteht das Modell aus Korrelationen in Form von algebraischen Gleichungen für die Beschreibung des Phasengleichgewichtes, der Stoffdaten, der Reaktionskinetiken sowie des Hold-ups und der Druckverlustbeziehungen.

Die Parameter für die Stoffdaten und das Phasengleichgewicht wurden aus der Bayer-internen Datenbank entnommen. Die Reaktionskinetiken wurden bereits in einem anderen Projekt bei Bayer vermessen, und wurden dem Projekt zur Verfügung gestellt. Die übrigen Korrelationen und deren Parameter wurden der Literatur entnommen. Insgesamt besteht das Modell aus ca. 5000 Gleichungen, davon etwa 250 Differentialgleichungen.

Um die Preisgabe von Bayer Know-how über den Prozess zu verhindern, sind in den folgenden Kapiteln die numerischen Angaben anonymisiert und physikalischen Einheiten daher nicht aussagekräftig und werden konsequenterweise weggelassen. Bei der Anonymisierung wurde jedoch darauf geachtet, dass die Ergebnisse qualitativ nachvollzogen werden können.

### 6.3 Implementierung des Modells in einen dynamischen Prozesssimulator

Für die Untersuchungen wurde das Prozessmodell in den dynamischen Prozesssimulator speedup implementiert. Speedup wurde bei Bayer genutzt, um das stationäre und dynamische Verhalten sowohl des ungeregelten als auch des geregelten Prozesses zu untersuchen.

### 6.4 Untersuchung der nichtlinearen Dynamik des Prozesses ("Fortsetzungsmethoden")

Ein dem Reglerentwurf vorgelagerter Schritt ist die Untersuchung der nichtlinearen Dynamik des Prozesses. *Jacobsen und Skogestad 1995* haben auf die Bedeutung von Ein-/Ausgangsbifurkationsdiagrammen bei der Beurteilung der Betreibbarkeit der Anlage und ggf. zu erwartenden Beschränkungen in der Reglerperformance hingewiesen. Daher wurde den Projektpartnern der Universität Stuttgart das Prozessmodel zur Analyse der nichtlinearen Prozessdynamik mittels Fortsetzungsmethoden (*Kienle u.a. 1995*) übergeben. Dort erfolgte eine Untersuchung auf mehrfach stationäre Zustände: In der Umgebung des nominalen Arbeitspunktes der Kolonne konnten keine mehrfach stationären Zuständen identifiziert werden. Als Beispiel für die Untersuchung auf mehrfach stationäre Zustände ist in Abbildung 6.4.1 der Verlauf der Schlüsselkomponenten im Kopf und Sumpf der Kolonne in Abhängigkeit von der Heizleistung gezeigt. Nähere Angaben zur Untersuchung der nichtlinearen Prozessdynamik finden sich im Abschlussbericht der Projektpartner vom ISR der Universität Stuttgart.



Abbildung 6.4.1: Bifurkationsdiagramm der Kolonne bezüglich der Stellgröße Heizleistung. Links Komponente C im Kopf, rechts Komponente D im Sumpf. Grau unterlegt: nominaler Arbeitsbereich der Kolonne.

### 6.5 Einführung und Erprobung der Fortsetzungsverfahren bei der Bayer AG

### 6.5.1 Ausgangssituation

Die numerischen Methoden der Fortsetzungsverfahren wurden am ISR in der Simulationsumgebung DIVA umgesetzt (vergl. Abschlussbericht ISR Stuttgart). Diese erlauben die Berechnung stationärer Punkte nichtlinearer dynamischer Modelle in Abhängigkeit eines einzelnen Parameters sowie singulärer Punkte in Abhängigkeit von zwei Parametern. Da DIVA nicht zu den bei Bayer üblichen Simulationswerkzeugen gehört, das Verfahren von Bayer aber als wertvoll erachtet wird, wurde gemeinsam eine softwaretechnische Lösung zur Anbindung der Fortsetzungsverfahren an einen bei Bayer gängigen Simulator entworfen. Von den bei Bayer eingesetzten dynamischen Simulatoren eignet sich insbesondere die Simulationssoftware gPROMS für diesen Zweck, da gPROMS wohl definierte Schnittstellen zur Verfügung stellt, über die die notwendige Information, die von den Fortsetzungsverfahren benötigt wird, abgerufen werden kann. Aufgabe der beschriebenen Schnittstelle ist es, diese Berechnungen auch an in gPROMS formulierten Modellen vornehmen zu können. Die Anbindung erfolgte am MPI in Magdeburg und dem ISR in Stuttgart in enger Zusammenarbeit mit der Firma PSE in London, welche gPROMS entwickelt und vertreibt, und der Bayer AG.

### 6.5.2 Konzeption der Schnittstelle

gPROMS bietet die Möglichkeit, aus einem Modell sogenannte equation set objects (ESO) zu erzeugen. Diese equation set objects sind Softwarekomponenten, die im wesentlichen in der Lage sind, rechte Seiten und partielle Ableitungen für die Modellgleichungen für beliebige Werte der Modellvariablen und ihrer zeitlichen Ableitungen zu ermitteln. DIVA kann diese ESOs an Stelle von in DIVA selber formulierter Modelle verwenden. Die Kommunikation zwischen DIVA und gPROMS (bzw. dem von gPROMS erzeugen ESO) erfolgt nach dem CORBA-Standard mit der frei verfügbaren OMNIORB-Software. Die graphische Darstellung der mit DIVA erzielten Ergebnisse erfolgt in MATLAB.

### 6.5.3 Benutzeraktionen

Der Benutzer hat sein Modell zunächst in gPROMS zu formulieren und auszutesten. Für die Bifurkationsanalyse muß die Variable (bzw. die beiden Variablen), die als Forsetzungsparameter dienen soll, freigegeben werden, so dass ein unterbestimmtes Modell entsteht. Mit dem entsprechenden Kommando in gPROMS wird ein ESO zu dem Modell generiert. Anschließend wird DIVA aufgerufen und die Fortsetzungsrechnung angestoßen und nach deren Beendigung das ESO gelöscht. Schließlich werden die Ergebnisse mit MATLAB graphisch ausgewertet. Die Software steht derzeit auf einem SUN-Rechner zur Verfügung. Eine detaillierte Benutzungsanleitung mit einem DEMO-Beispiel sind verfügbar.

### 6.6 Festlegung der Anforderungen an eine Regelung

Bei der Festlegung der Anforderungen an die Regelung spielen sowohl technische als auch wirtschaftliche Aspekte eine Rolle. So sollte unter wirtschaftlichen Gesichtspunkten das Prozessführungskonzept möglichst einfach sein, um die Kosten der Implementierung und den Wartungsaufwand so gering wie möglich zu halten. Dem steht gegenüber, dass eine hohe Performance oft nur durch komplexe Regelungen, die in Implementierung und Wartung kostenintensiv sind, erreicht werden. Daher muss bei der Entscheidung, welches Regelungskonzept realisiert wird, der Aufwand dem Nutzen in technischer und wirtschaftlicher Hinsicht gegenübergestellt werden.

Zunächst werden alle Forderungen aufgestellt, die man gerne erreichen würde. Im nächsten Schritt wird dann überprüft, mit welchem Aufwand die jeweiligen Ziele erreicht werden können. Dies ermöglicht eine Bewertung (siehe Kapitel 6.9 Vergleichende Bewertung beider Regelungen hinsichtlich der Regelgüte, Implementierbarkeit und Wirtschaftlichkeit), welches das für den Prozess geeignetste Prozessführungskonzept ist.

Beim Entwurf des Prozessführungskonzeptes soll berücksichtigt werden:

- 1. Der geschlossene Kreis muss stabil sein.
- 2. Die Regelung muss robust sein.
- 3. Das Führungsverhalten soll möglichst schnell sein.
- 4. Störungen sollen möglichst schnell ausgeregelt werden.
- 5. Die Sollwerte sollen stationär genau eingeregelt werden.
- 6. Stellgrößenbegrenzungen sollen nicht verletzt werden.
- 7. Die Regelung soll möglichst einfach in das Prozessleitsystem eingebunden werden können.
- 8. Der Regler soll möglichst einfach in der Wartung sein.
- 9. Die Investitionskosten für zusätzliche PLT sollten möglichst gering sein.

Es ist offensichtlich, dass einige der Forderungen nicht gleichzeitig erfüllt werden können: So ist zu erwarten, dass ein Regler mit sehr hoher Performance (z.B. ein nichtlinearer Regler) in der Regel einen höheren Implementierungs- und Wartungsaufwand nach sich zieht als z.B. ein PI-Regler. Neben dem Aspekt, welches Ziel mit welchem Aufwand realisiert werden kann, muss somit die Frage beantwortet werden, welche Ziele priorisiert werden. Diese Gesichtspunkte werden in der Bewertung der unterschiedlichen Regelungskonzepte (vergl. Kapitel 6.9 Vergleichende Bewertung beider Regelungen hinsichtlich der Regelgüte, Implementierbarkeit und Wirtschaftlichkeit) berücksichtigt werden.

### 6.7 Entwurf eines linearen Regelungskonzeptes für den Prozess

Ein wesentliches Ziel dieses Teilprojektes ist die Nutzung von Erkenntnissen der nichtlinearen Dynamik zur optimierten Prozessführung von komplexen verfahrenstechnischen Prozessen, wie der reaktiven Rektifikation. Um die Benefits einer nichtlinearen Regelung beurteilen zu können, ist ein Vergleich zwischen den Ergebnissen klassischer linearen und denen der nichtlinearen Regelungsmethoden Bestandteil des Forschungsvorhabens. In diesem Abschnitt wird ein lineares Regelungskonzept entworfen, das einerseits als Benchmark für die nichtlineare Regelung dient und andererseits eine Beurteilung erlaubt, welche Reglerperformance mit einem linearen Regler zu erreichen ist und auf Grund welcher Anforderungen die Performance limitiert wird. Grundlage für eine Bewertung des nichtlinearen Regelungskonzeptes ist somit eine solide Analyse der Ergebnisse einer linearen Regelung.

Die Entwicklung des linearen Regelungskonzeptes erfolgte in den Schritten:

- 1. Auswahl geeigneter Messstellen.
- 2. Bestimmung einer Regelungsstruktur.
- 3. Entwurf linearer Regler.
- 4. Überprüfung der Regler in der nichtlinearen Simulation.

Dabei können die Erkenntnisse aus der Reglerstrukturauswahl ebenfalls für den nichtlinearen Reglerentwurf genutzt werden. Insbesondere ist die Auswahl der Positionierung der Messstellen unabhängig von der Frage, ob eine lineare oder aber eine nichtlineare Regelung zum Einsatz kommt. Außerdem ist zu erwarten, dass eine Reglerstrukturauswahl, die günstig für die lineare Regelung ist, ebenfalls günstige Voraussetzungen für eine nichtlineare Regelung schafft. Die Analyseergebnisse aus diesem Abschnitt wurden den Projektpartnern vom ISR in Stuttgart als Grundlage für deren nichtlinearen Reglerentwurf zur Verfügung gestellt.

### 6.7.1 Auswahl geeigneter Messstellen

Der erste Schritt in der Entwicklung eines Prozessführungskonzeptes für Destillationskolonnen ist die Auswahl geeigneter Messstellen, die durch den Regler geregelt werden sollen. Da in der bestehenden Anlage keine online Konzentrationsmessungen vorhanden sind und eine Installation derzeit auch nicht in Betracht gezogen wird, soll die Regelung auf Basis von Temperaturmessstellen innerhalb der Kolonne erfolgen. Auswahl der Temperaturmessstellen an Üblicherweise erfolgt die Hand von Sensitivitätsstudien des Temperaturprofils in der Kolonne (Moore 1992).

Dementsprechend wurden mittels des nichtlinearen Modells die Temperaturprofile für die Szenarien

Änderung der Heizleistung um dQ =  $\pm 1$ , Änderung des Rücklaufverhältnisses um dR =  $\pm 1$  und Änderung der Feedmenge um dF =  $\pm 10\%$ 

berechnet. Die sich ergebenden Verschiebungen der Profile sind in Abbildung 6.7.1 dargestellt. Signifikante Änderungen der Temperaturen ergeben sich insbesondere in den

Bereichen der Böden 55-62, 31-43 sowie 2-8. Eine gute Wahl für die Positionen der Temperatursensoren sind die Böden 4, 37 und 60, da dort die Verschiebungen weitestgehend symmetrisch erfolgen.



#### Änderung des Temperaturprofils bei Störungen

Abbildung 6.7.1: Verschiebungen des Temperaturprofils für die untersuchten Szenarien.

### 6.7.2 Festlegung der Regelungsstruktur

Von den drei Temperaturmessstellen können auf Grund der zwei zur Verfügung stehenden Stellgrößen Heizleistung und Rücklaufverhältnis nur zwei als Regelgrößen verwendet werden. Somit sind drei Temperaturpaare als Regelgrößen denkbar. Bei der Auswahl der Paarung war zu berücksichtigen:

- 1. Die Auswahl soll so getroffen werden, dass die Temperaturmessungen möglichst gut mit den Kopf- und Sumpfkonzentrationen korrelieren.
- 2. Die Auswahl soll eine günstige Struktur für den Reglerentwurf liefern.
- 3. Die Zuordnung soll insbesondere für eine dezentrale Regelung günstig sein.

Die Reglerstrukturauswahl erfolgte mittels einer Analyse des steady state RGAs, der frequenzabhängigen RGA-number, der frequenzabhängigen minimal condition number (*Skogestad und Postlethwaithe* 1996) und einer Sensitivitätsanalyse der Messgrößen auf die Konzentration von Verunreinigungen in Kopf und Sumpf.

Um die RGA-number und die minimal condition number berechnen zu können, musste zunächst das nichtlineare differential-algebraische System in ein System linearer gewöhnlicher Differentialgleichungen überführt werden. Hierzu wurde das Control Design Interface von speedup verwendet. Dadurch ergab sich eine Darstellung im Zustandsraum mit ca. 250 Zuständen. Prinzipiell kann für ein so großes Modell eine Analyse und ein Reglerentwurf durchgeführt werden, jedoch ist eine Reduktion auf die wesentliche Dynamik

des Systems sinnvoll, um einerseits numerische Problem zu umgehen und andererseits die Rechenzeit für die einzelnen Schritte zu reduzieren.

Das hier verwendete Verfahren beruht auf einer Frequenzgang-Approximation. Das Modell reduzierter Ordnung soll in einem bestimmten Frequenzbereich den Frequenzgang des ursprünglichen Modells möglichst gut approximieren. Details über das Verfahren finden sich in *Fernholz* 2000, *Müller* 1996 sowie *Sanathanan und Koerner* 1963. Das Approximationsverfahren wird ebenfalls für den Reglerentwurf in Kapitel 6.7.3 angewendet. Dort findet sich auch eine kurze Darstellung des Verfahrens.

Für jeden Übertragungspfad müssen die Ordnungen der Zähler- und Nennerpolynome der Übertragungsfunktion vorgegeben werden. Das Verfahren bestimmt anschließend automatisch die optimalen Polynomkoeffizienten. Um eine möglichst gute Approximation zu gewährleisten, werden die Ordnungen sukzessiv erhöht, bis eine ausreichende Genauigkeit erreicht ist. Die Ergebnisse der Approximationen und die gewählten Ordnungen sind in Tabelle 6.7.1 und Abbildung 6.7.2 dargestellt.

Eingang/Ausgang	Heizleistung	Rücklaufverhältnis
T auf Boden 4	$\frac{5}{5}$	$\frac{5}{5}$
T auf Boden 37	$\frac{2}{3}$	$\frac{5}{5}$
T auf Boden 60	$\frac{3}{4}$	$\frac{2}{3}$

 Tabelle 6.7.1: Ordnungen der Zähler- und Nennerpolynome der Übertragungsfunktionen des reduzierten Modells.

Der Vergleich der Approximationen in Abbildung 6.7.2 zeigt, dass für die gewählten Ordnungen die Frequenzgänge des ursprünglichen Systems mit großer Genauigkeit approximiert werden können. Durch die Ordnungsreduktion konnte die Anzahl der Zustände von 248 auf 25 verringert werden. Der Vergleich der Sprungantworten des ursprünglichen und des reduzierten Modells in Abbildung 6.7.3 bestätigt die Beobachtung aus dem Frequenzbereich, dass die Dynamiken beider Modelle gut übereinstimmen.

Im folgenden wird das ordnungsreduzierte Modell für die Untersuchungen zur Reglerstrukturauswahl und nachfolgend für den Reglerentwurf eingesetzt.



Abbildung 6.7.2: Frequenzgänge des ursprünglichen (rot) und des approximierten Modells (grün).

#### Step Response



Abbildung 6.7.3: Vergleich der Sprungantworten des ursprünglichen (rot) und des reduzierten Modells (grün).

Die großen Peaks für die Paarung der Temperaturen 4 und 37 in Abbildung 6.7.4 zeigen, dass diese Auswahl für den Reglerentwurf ungünstig ist. Die RGA-number für die verbleibenden beiden Paare verläuft ähnlich und ist in beiden Fällen für alle Frequenzen hinreichend klein.

Temperaturpaare	Böden 4 und 37		Böden 4 und 60		Böden 37 und 60	
RGA im stationären	3.29	-2.29	1.19	-0.19	1.30	-0.30
Zustand	-2.29	3.29	-0.19	1.19	-0.30	1.30

Tabelle 6.7.2: RGA im stationären Zustand für die Temperaturpaare.

Die Analyse der RGA für den stationären Fall für die Temperaturpaare auf den Böden 4 und 60 sowie 37 und 60 in Tabelle 6.7.2 zeigt, dass die Temperatur auf dem 60. Boden stets mit dem Rücklaufverhältnis und die zweite Temperatur mit der Heizleistung geregelt werden sollte (RGA-Elemente auf der Hauptdiagonale dicht bei 1). Die negativen Nebendiagonalelemente der RGAs zeigen in beiden Fällen, dass eine umgekehrte Zuordnung der Stell- und Messgrößen zu Instabilitäten beim Ausfall eines Reglers bei Verwendung eines dezentralen Reglers führen würden und somit zu vermeiden sind. Da in beiden Fällen die Hauptdiagonalelemente dicht bei 1 liegen (1.19 und 1.30), kann eine weitere Auswahl auf Grund der RGA-Analyse nicht getroffen werden.

Nach *Skogestadt und Postlethwaite 1996* sollen Paarungen von Mess- und Stellgrößen vermieden werden, die negative Elemente in der RGA-Matrix für stationäre Werte aufweisen. Günstig sind Paarungen, die im Bereich der Bandbreite des geschlossenen Kreises kleine RGA-number Werte besitzen. Da die Bandbreite des geschlossenen Kreises noch nicht bekannt ist, wird der gesamte relevante Frequenzbereich betrachtet.



Abbildung 6.7.4: RGA-number für alle Temperaturpaare

Ein weiteres Kriterium bei der Wahl der Reglerstruktur ist die Konditionszahl. Sie ist ein Maß für die Richtungsabhängigkeit der Verstärkung des Systems. Große Konditionszahlen (größer 50) können ein Indikator für Probleme beim Reglerentwurf sein, während kleine Konditionszahlen (kleiner 5) darauf hindeuten, dass die Mehrgrößeneffekte von Modellunsicherheiten nicht problematisch sein werden (*Skogestadt und Postlethwaite 1996*). Da die Konditionszahl von der Skalierung des Systems abhängt, kann die minimale Konditionszahl des Systems betrachtet werden. Die minimale Konditionszahl berücksichtigt die günstigste Skalierung des Systems und ist somit skalierungsunabhängig. Die frequenzabhängigen minimalen Konditionszahl in beiden Fällen klein ist, gibt auch dieses Kriterium keinen weiteren Hinweis auf eine günstige Wahl der zweiten Temperaturmessstelle.

$\frac{dx_3^{Kondensator}}{dT_4^{Boden}} = -0,0217$	$\frac{dx_3^{Kondensator}}{dT_{37}^{Boden}} = 0,0132$
$\frac{dx_4^{Sumpf}}{dT_4^{Boden}} = -0,00125$	$\frac{dx_4^{Sumpf}}{dT_{37}^{Boden}} = 4,25 \cdot 10^{-5}$



Für die Auswahl zwischen den Temperaturmessstellen auf dem 4. und 37. Boden wird abschließend die stationäre Abhängigkeit zwischen der Änderung der Temperaturen und der Komponente 3 im Kondensator sowie der Komponente 4 im Sumpf betrachtet<sup>1</sup>. Die Ergebnisse sind in Tabelle 6.7.3 wiedergegeben. Für beide Schlüsselkomponenten ist die

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Das formale mathematische Vorgehen ist, dass die algebraischen Zustände, die den beiden Temperaturen auf den Böden entsprechen, zu Modelleingängen werden. Gleichzeitig werden die beiden Stellgrößen Heizleistung und Rücklaufverhältnis, die zuvor Modelleingänge waren, algebraische Zustände. Für dieses neue System wird dann die stationäre Verstärkung berechnet.

Sensitivität gegenüber Änderungen der Temperatur auf dem vierten Boden größer als gegenüber einer Temperaturänderung auf dem 37. Boden. Daher wird die Temperatur auf dem 4. Boden als zweite Messgröße ausgewählt.



Abbildung 6.7.5: Minimale Konditionszahl für beide Systeme.

Neben der Auswahl der Reglerstruktur zeigen die Untersuchungen in diesem Abschnitt, dass eine lineare Regelung des Systems aussichtsreich scheint. Stationäres RGA, RGA-number und die minimale Konditionszahl zeigen, auch frequenzabhängig, für die Regelung des Prozesses sehr günstige Werte. Die Kopplungen im ausgewählten Zweigrößensystem sind, insbesondere in den Übertragungspfaden von der Verdampferleistung zu den Temperaturen (vergl. Abbildung 6.7.2 und Abbildung 6.7.3), ausgeprägt, so dass eine gute Entkoppelung voraussichtlich nur mit einem Mehrgrößenregler realisierbar ist.

Da die Analyse jedoch auf einer Linearisierung des nichtlinearen Modells am Arbeitspunkt beruht, ist auf Grund der Ergebnisse keine Aussage möglich, wie weit die Nichtlinearität des Systems die lineare Regelbarkeit des Systems nachteilig beeinflusst. Insbesondere aus Sicht der industriellen Anwendung wäre hier ein Screeningtool zur Quantifizierung der nichtlinearen Effekte im geschlossenen Kreis sehr hilfreich, um die Notwendigkeit einer nichtlinearen Regelung schon vor dem Reglerentwurf beurteilen zu können. Zwar erlaubt die Untersuchung der Robustheit des linearen Systems (vergl. Kapitel 6.7.3) eine Abschätzung, wie der geschlossenen Kreis auf Modellunsicherheiten, und eine Nichtlinearität kann als Modellunsicherheit gesehen werden, reagiert, jedoch fehlt in der Analyse der direkte Bezug zu den Nichtlinearitäten des zu untersuchenden Prozesses.

### 6.7.3 Ausgangspunkt für den Entwurf der linearen Regelung

Die Analysen im vorhergehenden Abschnitt haben gezeigt, dass eine lineare Regelung des linearisierten Systems aussichtsreich erscheint. Offen ist jedoch, wie gravierend sich die Nichtlinearität auf den geschlossenen Kreis auswirkt. Eine Beurteilung, ob sich die Nichtlinearität des Prozesses nachteilig auf die Regelgüte ausgewirkt hat, kann somit nur im Nachhinein ein Vergleich zwischen einer linearen und einer nichtlinearen Regelung des Prozesses zeigen. Daher ist es notwendig, einen "best möglichen" linearen Regler zu entwerfen und kritisch zu beurteilen, um diesen dann als Benchmark gegen die Nichtlineare Regelung zu setzen. Der Vergleich erlaubt dann eine Entscheidung, welchen Benefit eine nichtlineare Regelung des Prozesses bringt.

Für den Reglerentwurf müssen zunächst die Anforderungen an den Regelkreis festgelegt werden. Für den Prozess werden für die Stellgrößenbegrenzungen und die Modellunsicherheiten (siehe Forderungen 5. und 2. in Kapitel 6.6 "Festlegung der Anforderungen an eine Regelung") folgende Bedingungen festgelegt:

- Die maximale Heizleistungsänderung beträgt ±5.
- Die maximale Änderung im Rücklaufverhältnis beträgt ±5.
- Der Regelkreis soll robust gegenüber Verzögerungen in den Stellgrößen (Unsicherheit im Streckeneingang) sein, die durch ein Verzögerungsglied 1. Ordnung modelliert werden können. Die Zeitkonstante im Falle der Heizleistung soll 20 Minuten, im Falle des Rücklaufverhältnisses 5 Minuten betragen.

Um den Forderungen nach einem möglichst einfachen, kostengünstigen und gut wartbaren Regler (Forderungen 7.-9. in Kapitel 6.6) nachzukommen, wird ein Reglerentwurfsverfahren verwendet, das es erlaubt, die Komplexität des Reglers vorzugeben und automatisch die optimalen Parameter für diese Struktur berechnet. So kann beurteilt werden, welche Regelgüte mit einem komplexen Regler erreicht werden kann, inwieweit dieser Regler durch einen einfacheren Regler ersetzt werden kann und welche Einbußen in der Regelgüte dabei in Kauf genommen werden müssen. Die Regelgüte wurde hinsichtlich des Führungsverhaltens, der Störungsunterdrückung und der Robustheit beurteilt. Das Verfahren zur Untersuchung der Robustheitseigenschaften des geschlossenen Kreises wurde *Skogestad und Postlethwaite 1996* entnommen. Im Folgenden werden die wichtigsten Grundlagen über die Robustheitsanalyse und das Reglerentwurfsverfahren zusammengefasst, um die Ergebnisse des Reglerentwurfs im nächsten Kapitel nachvollziehbar zu machen.

Für eine gegebene Regelstrecke und einen Regler wird die Untersuchung der Robustheit in den Schritten

- Bestimmung der Modellunsicherheiten der Regelstrecke,
- Festlegung eines Maßes für die zur erreichende Regelgüte,
- Nachweis der nominalen Stabilität des Regelkreises,
- Nachweis der nominalen Performance des Regelkreises,
- Nachweis der robusten Stabilität des Regelkreises und
- Nachweis der robusten Performance des Regelkreises

durchgeführt. Die nominalen Eigenschaften beziehen sich auf den Fall, dass die Regelstrecke und das für die Untersuchung benutzte Modell exakt übereinstimmen. Die Robustheitsuntersuchungen berücksichtigen, dass die Regelstrecke im Rahmen der Modellunsicherheiten von dem Modell abweichen darf. Die für die Untersuchungen verwendete Struktur des geschlossenen Regelkreises ist in Abbildung 6.7.6 dargestellt. Auf die einzelnen Elementes wird in den folgenden Abschnitten eingegangen.



Abbildung 6.7.6: Darstellung des geschlossenen Regelkreises für die Robustheitsuntersuchungen.

#### Modellunsicherheit:

Das für die nominalen Untersuchungen verwendete Modell der Strecke ist das Element G in Abbildung 6.7.6. Die Elemente der Übertragungsfunktion G ergaben sich aus der Ordnungsreduktion. Die Modellunsicherheit wurde hier als Eingangsunsicherheit über das Element  $W_I$  berücksichtigt. Diese Struktur ist insbesondere für Unsicherheiten geeignet, die durch vernachlässigte Dynamiken von Stellgliedern entstehen. Dies trifft für die Kolonne zu, da hier die Robustheit gegenüber Verzögerungen in der Heizleistung und des Rücklaufverhältnisses untersucht wurden.

Die Übertragungfunktion  $W_I$ , die die Verzögerungsglieder 1. Ordnung mit den Zeitkonstanten von 20 und 5 Minuten enthält ist

$$W_I = diag\left(\frac{-0.3333s}{0.3333s+1}, \frac{-0.8333s}{0.8333s+1}\right).$$
(6.7.1)

#### Maß für die Regelgüte:

Um die nominale und die robuste Performance des geschlossenen Kreises testen zu können, muss ein Maß für die Performance eingeführt werden. Die Gewichtungsfunktion  $W_P$  in Abbildung 6.7.6 wird hierzu spezifiziert. Welche Wahl für  $W_P$  im einzelnen sinnvoll ist, wurde im Zusammenhang mit dem Reglerentwurf untersucht. In der Regel wurde hier eine diagonal besetzte Matrix der Form

$$W_P = diag \left( w_p^{11}(s), w_p^{22}(s) \right).$$
(6.7.2)

verwendet.

#### Nachweis der nominalen Stabilität:

Der Nachweis der nominalen Stabilität wird durch Bestimmung der Lage der Pole der Übertragungsfunktionen

$$S = (I + KG)^{-1}, SG, KS, T = KG(I + KG)^{-1}.$$
(6.7.3)

geführt. G ist das Modell der Regelstrecke, K der Regler. Für die Terme S und T beschreiben das Störgrößen- und Führungsverhalten. Haben alle Pole negative Realteile, so ist die nominale Stabilität des geschlossenen Kreises gesichert.

#### Nachweis der nominalen Performance:

Die nominale Performance des Regelkreises ist sichergestellt, wenn für den maximalen Singulärwert  $\sigma$  der mit W<sub>P</sub> gewichteten Sensitivitätsfunktion S (vergl. Gl. (6.7.3)) die Bedingung

$$\overline{\sigma} \left( W_P \left( I + KG \right)^{-1} \right) \le 1. \tag{6.7.4}$$

für alle Frequenzpunkte  $\omega$  erfüllt ist und das System nominal stabil ist (Bedingung (6.7.3)).

#### Nachweis der robusten Stabilität:

Für die robuste Stabilität muss für den strukturierten Singulärwert  $\mu_{\Delta}^{stab}$  die Bedingung

$$\mu_{\Delta}^{stab} = \mu_{\Delta}^{stab} \left( -W_I K G \left( I + K G \right)^{-1} \right) < 1$$
(6.7.5)

für alle Frequenzen  $\omega$  erfüllt sein und die nominale Stabilität des Systems nachgewiesen sein (Bedingung (6.7.3)). Ist diese Bedingung erfüllt, so ist der geschlossene Kreis für alle Modelle

$$G_P = G(I + W_I \Delta_I), \|\Delta_I\|_{\infty} \le 1$$
(6.7.6)

stabil. Da die Unsicherheiten in den beiden Stellgrößen im untersuchten Fall unkorreliert sind, brauchten hier nur diagonal besetzter Matrizen  $\Delta_I$  berücksichtigt werden. Der strukturierte Singulärwert  $\mu_{\Delta}^{stab}$  ist im Falle diagonal besetzte Matrizen  $\Delta_I$  stets kleiner oder gleich dem Wert im Falle einer voll besetzten Matrix. Eine voll besetzte Matrix würde somit ggf. zu einer zu konservativen Abschätzung führen.

#### Nachweis der robusten Performance:

Um robuste Performance garantieren zu können, muss das System zunächst nominal stabil sein (Bedingung (6.7.3)). Zusätzlich muss für den strukturierten Wert  $\mu_{\Delta}^{rob}$  die Bedingung

$$\mu_{\Delta}^{rob} = \mu_{\Delta}^{rob} \left[ \begin{bmatrix} -W_I K G (I + KG)^{-1} & -W_I K (I + GK)^{-1} \\ -W_P G (I + KG)^{-1} & -W_P (I + GK)^{-1} \end{bmatrix} \right] < 1$$
(6.7.7)

für alle Frequenzen ω erfüllt sein.

#### Auswertung der Stabilitäts- und Robustheitsbedingungen:

Der Nachweis für nominale Stabilität (Bedingung (6.7.3)) kann für die Darstellung von Strecke und Regler im Zustandsraum oder als Übertragungsfunktion erfolgen. Eine analytische Lösung der Bedingungen (6.7.4), (6.7.5) und (6.7.7) ist jedoch in der Regel nicht möglich. Die Auswertung der Bedingungen erfolgte daher numerisch im Frequenzbereich. Alle Berechnungen wurden in Matlab durchgeführt.

#### **Reglerentwurf durch Frequenzgang-Approximation mit FASTER:**

Während zunächst die Methoden zur Robustheitsanalyse eingeführt wurden, wird im folgenden das eingesetzte Reglerentwurfsverfahren vorgestellt. Der Reglerentwurf von

Reglern durch Frequenzgang-Approximation wurde von *Engell 1988* für den Eingrößenfall und später von *Engell und Müller 1993* und *Müller 1996* für den Mehrgrößenfall vorgeschlagen. Die Grundidee des Verfahrens setzt beim Standardregelkreis (vergl. Abbildung 6.7.7) an. Ziel des Verfahrens ist es, einen Regler C(s) zu finden, der die Strecke G(s) so regelt, dass das Führungsverhalten des geschlossene Kreises gemäß dem Wunschverhalten T<sub>0</sub>(s) reagiert.



Abbildung 6.7.7: Schema eines Standardregelkreises

Im Folgenden wird zunächst das Verfahren für den Eingrößenfall beschrieben. Anschließend eine kurze Einführung in den Mehrgrößenfall gegeben. Der Mehrgrößenfall ist hinsichtlich der numerischen Berechnung erheblich komplizierter, so dass an dieser Stelle nur das Prinzip dargestellt wird. Die numerischen Grundlagen finden sich in *Müller 1996*. Der Frequenzgang  $T(j\omega)$  des Übertragungsverhaltens vom Sollwert r zur Regelgröße y ist gegeben durch

$$T(j\omega) = \frac{Y(j\omega)}{R(j\omega)} = \frac{G(j\omega)C(j\omega)}{1 + G(j\omega)C(j\omega)}.$$
(6.7.8)

Löst man (6.7.8) nach C(j $\omega$ ) auf und ersetzt T(j $\omega$ ) durch das Wunschverhalten T<sub>0</sub>(j $\omega$ ), so lässt sich der Frequenzgang C<sub>0</sub>(j $\omega$ ) eines Reglers berechnen, der die Strecke exakt kompensiert:

$$C_0(j\omega) = \frac{T_0(j\omega)}{G(j\omega)[1 - T_0(j\omega)]}.$$
(6.7.9)

Beim Entwurf wird nun ein Regler gesucht, dessen Frequenzgang C(j $\omega$ ) den des exakt kompensierenden Reglers C<sub>0</sub>(j $\omega$ ) möglichst gut approximiert. Dazu wird der Regler durch eine rationale Übertragungsfunktion (6.7.10) parameterisiert

$$C(s) = \frac{B(s)}{A(s)} = \frac{\sum_{i=0}^{m} b_i s^i}{\sum_{j=0}^{n} a_j s^j}.$$
(6.7.10)

Die Parameter  $a_j$  und  $b_i$  der Übertragungsfunktion des Reglers werden durch Lösen des Optimierungsproblems (6.7.11) bestimmt. Hierbei wird der Betrag der mit g(j $\omega$ ) gewichteten quadratischen relativen Abweichung zwischen dem Frequenzgang C<sub>0</sub>(j $\omega$ ) des exakt kompensierenden Reglers und dem des zu realisierenden Reglers C(j $\omega$ ) minimiert.

$$\min_{a_j, b_l} \sum_{l} \left| g_l(j\omega_l) \frac{A(j\omega_l)C_0(j\omega_l) - B(j\omega_l)}{B(j\omega_l)} \right|^2$$
(6.7.11)

Die Gewichtung  $g(j\omega)$  sollte so gewählt werden, dass die Approximation insbesondere in dem Bereich gut ist, der für das Führungsverhalten des geschlossenen Regelkreises entscheidend ist. Die bestmögliche Approximation der Sprungantwort des geschlossenen Kreises ergibt sich bei Verwendung der Gewichtung (6.7.12) (*Müller 1996*) wobei S<sub>0</sub>(j $\omega$ ) der Störfrequenzgang des mit C<sub>0</sub> geschlossenen Kreises ist:

$$g_{l}(j\omega) = \frac{|T(j\omega_{l})| S_{0}(j\omega_{l})|}{\omega_{l}}$$
(6.7.12)

Zur Lösung des nichtlinearen Optimierungsproblems (6.7.11) wird ein iterativer Ansatz von *Sanathanan und Koerner 1963* verwendet.

Beim Entwurf eines Reglers mit dem hier vorgestellten Verfahren müssen zwei Entscheidungen getroffen werden:

- Das Wunschverhalten des geschlossenen Kreises muß ausgewählt werden.
- Die Ordnungen n und m der Polynome der Reglerübertragungsfunktion in (6.7.10) müssen vorgegeben werden.

Die Ordnungen n und m können in einem iterativen Verfahren einfach bestimmt werden (z.B. durch sukzessive Erhöhung bis der Approximationsfehler klein genug ist) oder sind bereits durch eine Vorauswahl des Reglers (z.B. PI- oder PID-Regler) vorgegeben. Die Auswahl des Wunschverhaltens  $T_0(j\omega)$  ist somit im Entwurfsverfahren entscheidend. Hierbei müssen das Verhalten der zu regelnden Strecke (z.B. Nullstellen in der rechten Halbebene, instabile Pole) und Beschränkungen für die Stellgröße beachtet werden. Auf die Auswahl eines geeigneten Wunschverhaltens wird daher im Folgenden im Zusammenhang mit dem jeweiligen Entwurfsproblem eingegangen.

Bei Erweiterung auf den Mehrgrößenfall muss analog zum Eingrößenfall ein Wunschverhalten für das Führungsverhalten vorgegeben werden, wobei nur die Diagonalelemente spezifiziert werden. Folglich wird im Entwurfsschritt ein Regler berechnet, der den geschlossenen Kreis zu entkoppeln versucht.

Das hier beschriebene Reglerentwurfsverfahren wurde vom Lehrstuhl für Anlagensteuerungstechnik der Universität Dortmund entwickelt und als FASTER Toolbox in Matlab umgesetzt.

### 6.7.4 Ergebnisse des linearen Reglerentwurfes

#### Vorgehen:

Im ersten Schritt des linearen Reglerentwurfes wurde ein möglichst guter Regler entworfen, wobei die Komplexität des Reglers keine Rolle spielte. Hierdurch sollte festgestellt werden, welche Regelgüte mit der linearen Regelung unter Berücksichtigung der Spezifikationen und der Robustheit erreicht werden kann.

Ziel des Reglerentwurfes ist es, einerseits zu bestimmen, welche Elemente  $c_{ij}(s)$  des Reglers (vergl. Abbildung 6.7.8) benötigt werden, andererseits die Ordnung der Regler sowie die Parameter der Übertragungsfunktionen zu bestimmen.



Abbildung 6.7.8: Schematische Darstellung des Regelkreises.

#### Vorgabe des Wunschverhaltens des geschlossenen Regelkreises:

Wie bereits im vorhergehenden Kapitel erwähnt, wird bei dem hier verwendeten Reglerentwurfsverfahren versucht, den geschlossenen Kreis zu entkoppeln. Dementsprechend müssen die Hauptdiagonalelemente der Übertragungsfunktionsmatrix des Wunschverhaltens  $T_0(s)$  vorgegeben werden. Für den Zweck des Reglerentwurfes für die Kolonne wurde das Wunschverhalten über die Anstiegszeit und das Überschwingen vorgegeben. Über die Anstiegszeit wird die Schnelligkeit, über das Überschwingen die Dämpfung des geschlossenen Kreises vorgegeben. In der Regel entspricht die Vorgabe eines maximalen Überschwingens von 10% einer ausreichenden Dämpfung. Die Anstiegszeit kann über die Stellgrößenbegrenzungen abgeschätzt werden (*Müller 1996*). Die Ergebnisse mit den zu Beginn des Kapitels 6.7.3 eingeführten Stellgrößenbegrenzungen sind in Tabelle 6.7.4 zusammengestellt.

Regelgröße	Stellgrößengegrenzung	min. Anstiegszeit
Temperatur auf Boden 4	±5GJ/h (Heizleistung)	0,32h
Temperatur auf Boden 60	±5 (Rücklaufverhältnis)	0,014h

Tabelle 6.7.4: Abschätzung der minimalen Anstiegszeit aus der Stellgrößenbeschränkung.

Vergleicht man diese minimalen Anstiegszeiten mit denen der Hauptdiagonalelemente des offenen Kreises in Tabelle 6.7.5 so zeigt sich, dass der geschlossenen Kreis bei Berücksichtigung der Stellgrößenbegrenzungen in der ersten Regelgröße maximal um einen Faktor von ca. 20, in der zweiten Regelgröße um einen Faktor von ca. 50 beschleunigt werden kann.

Regelgröße	Anstiegszeit
Temperatur auf Boden 4	5,2h
Temperatur auf Boden 60	0,7h

 Tabelle 6.7.5: Anstiegszeiten der Hauptdiagonalelemente des offenen Kreises.

In der Praxis stellt eine Verringerung der Anstiegszeit um einen Faktor von ca. 10 jedoch bereits erhebliche Anforderungen an die Genauigkeit des Modells. Daher werden die

Anstiegszeiten zunächst auf 0,3h und 0,1h festgelegt (vergl. Tabelle 6.7.6). Probleme durch die Stellgrößengbegrenzung können durch die Abschätzung der minimalen Anstiegszeit weitestgehend ausgeschlossen werden.

Regelgröße	Anstiegszeit
Temperatur auf Boden 4	0,3h
Temperatur auf Boden 60	0,1h

Tabelle 6.7.6: Festlegung der gewünschten Anstiegszeiten des geschlossenen Kreises.

Im Folgenden werden die Ergebnisse des linearen Reglerentwurfes vorgestellt. Um das Vorgehen des zuvor beschriebenen Verfahrens zum Reglerentwurf und der Robustheitsanalyse zu demonstrieren, werden die Ergebnisse für den ersten Entwurf detailliert aufgeführt. Die Ergebnisse der nachfolgenden Entwürfe wurden durch ein analoges Vorgehen erzielt und werden nur in Bezug auf ihre wesentlichen Ergebnisse dargestellt.

#### Ergebnisse für den ersten Reglerentwurf:

Für das vorgegebenen Wunschverhalten des geschlossenen Kreises wurde ein Mehrgrößenregler entworfen. Eine gute Approximation des idealen Reglers konnte durch Vorgabe einer Zähler- und Nennerordnung von jeweils drei für alle Elemente der Matrix der Übertragungsfunktionen des Reglers erzielt werden. Um stationäre Genauigkeit des geschlossenen Kreises sicherzustellen, wurde in allen Elementen des Reglers ein I-Anteil vorgesehen.

Mit dem Regler wurde anschließend eine Robustheitsanalyse durchgeführt. Hierfür musste zunächst die Gewichtung  $W_P(j\omega)$  der Regelgüte in Gleichung (6.7.2) festgelegt werden. Dies geschah an Hand des im Reglerentwurf verwendeten Wunschverhaltens des geschlossenen Kreises und Überlegungen im Eingrößenfall.

Im Eingrößenfall ist die nominale Performance des geschlossenen Kreises garantiert, wenn für die Sensitivitätsfunktion  $S(j\omega)$  und die Gewichtung  $W_P(j\omega)$  gilt:

$$\left|S(j\omega)\right| \le \frac{1}{W_P(j\omega)} \tag{6.7.13}$$

Für die Analyse der Robustheit muss  $W_P$  somit so gewählt werden, dass die Bedingung (6.7.13) im nominalen Fall erfüllt ist. Da der Regler die Strecke weitestgehend entkoppelt, können für die Auswahl von  $W_P$  die Ergebnisse des Eingrößenfalls verwendet werden. Der Verlauf des Betrages von S und der gewählten Gewichtungen  $W_P$  als Funktionen der Frequenz sind in Abbildung 6.7.9 dargestellt.



Abbildung 6.7.9: Verlauf der Beträge von  $S(j\omega)$  und  $1/W_P(j\omega)$ .

Mit dieser Wahl von  $W_P(j\omega)$  konnte die Robustheitsanalyse durchgeführt werden. Die Ergebnisse sind in Abbildung 6.7.10 zusammengefasst.

Die Auswertung des Kriteriums (6.7.3) zeigt, dass der Regelkreis nominal stabil ist. Die Auswertung des Kriteriums (6.7.4) ergibt, dass der Regelkreis ebenfalls das Kriterium auf nominale Performance erfüllt (vergl. Abbildung 6.7.10 links oben). Dies ist insofern nicht verwunderlich, da der Regler die Strecke sehr gut entkoppelt und der Verlauf von  $W_P(j\omega)$  gerade so gewählt wurde, dass die Bedingung auf nominale Performance im Eingrößenfall erfüllt ist. Die Auswertung von Gleichung (6.7.5) zur Überprüfung auf robuste Stabilität (Abbildung 6.7.10 links unten) zeigt, dass der Kreis auch für alle Modelle, die innerhalb der gewählten Modellunsicherheit  $W_I(j\omega)$  (vergl. Gleichung (6.7.1)) liegen, stabil ist. Dabei ist die Stabilitätsreserve gering (ca. 2dB). Die Auswertung von Gleichung (6.7.7) (Abbildung 6.7.10 rechts unten) ergibt, dass die Anforderungen an die Performance unter der Berücksichtigung der Modellunsicherheiten nicht gewährleistet werden können.

Diese Ergebnisse können auch an Hand der Simulationsergebnisse des linearen Systems bestätigt werden. Die Antworten des nominalen Regelkreises bei Sprüngen in den Sollwerten in Abbildung 6.7.11 und Abbildung 6.7.12 zeigt, dass die Spezifikationen sehr gut eingehalten werden. Die Anstiegszeiten passen, das Überschwingen ist jeweils kleiner als 10%, die Stellgrößenbegrenzungen werden nicht verletzt und die Entkopplung ist sehr gut.



Abbildung 6.7.10: Robustheitsanalyse des geschlossenen Regelkreises.



**Abbildung 6.7.11:** Antwort des nominalen Regelkreises bei Sprung von 1°C im Sollwert von T4 nach 1h.



**Abbildung 6.7.12:** Antwort des nominalen Regelkreises bei Sprung von 1°C im Sollwert von T60 nach 1h.

Werden jedoch die Verzögerungen in den Stellgrößen berücksichtigt, bleibt der geschlossenen Kreis wie erwartet zwar stabil, jedoch zeigt sich eine nicht akzeptable Neigung zur Oszillation (vergl. Abbildung 6.7.13 und Abbildung 6.7.14).



Abbildung 6.7.13: Antwort des Regelkreises bei Sprung von 1°C im Sollwert von T4 nach 1h bei Berücksichtigung der Verzögerungen in den Stellgrößen.



Abbildung 6.7.14: Antwort des Regelkreises bei Sprung von 1°C im Sollwert von T60 nach 1h bei Berücksichtigung der Verzögerungen in den Stellgrößen.

Somit zeigt der entworfene Mehrgrößenregler sehr gute Eigenschaften im nominalen Fall, ist jedoch nicht robust gegenüber den zu berücksichtigenden Modellunsicherheiten. Die Ursache hierfür liegt in den bei den gewünschten Bandbreiten des Regelkreises bereits beträchtlichen Modellunsicherheiten durch die Verzögerungen in den Stellgrößen. Für beide Regelgrößen ist bei der Bandbreite die Betragsabsenkung ca. 6dB und die Phasendrehung  $-60^{\circ}$  (vergl. Tabelle 6.7.7).

Regelgröße	Bandbreite $\omega_b$	Betragsabsenkung	Phasendrehung
Temperatur T4	5 rad/h	6dB	-60°
Temperatur T60	20 rad/h	6dB	-60°

Tabelle 6.7.7: Abweichungen vom nominalen Modell durch die Unsicherheit bei der gewünschten Bandbreite des geschlossenen Kreises.

Da mit steigender Frequenz die Modellunsicherheit zunimmt und somit die Robustheit abnimmt, besteht hier ein Konflikt zwischen möglichst hoher Bandbreite und guter Robustheit. Dieser Zusammenhang ist allgemein bekannt. Ein Ausweg aus dieser Situation besteht nur darin, die Bandbreite soweit zu verringern bis die Modellunsicherheit so klein ist, dass die Robustheitsanforderungen eingehalten werden können. Daher wurde iterativ Reglerentwurf und Robustheitsanalyse wiederholt, bis ein linearer Regler entworfen gefunden wurde, der die Robustheitskriterien bei maximaler Bandbreite einhält.

#### Ergebnisse der weiteren Iterationen:

Zunächst wurde die Bandbreite deutlich verringert (Anstiegszeiten 5h und 1h). Hierfür konnte ein Regler entworfen werden, der die Kriterien der Robustheitsanforderung erfüllt. Die Zähler- und Nennerordnungen der Reglerübertragungsfunktionen mussten dabei auf jeweils drei gesetzt werden. Im nächsten Schritt wurde untersucht, wieweit sich die Reglerperformance verschlechtert, wenn an Stelle von linearen Reglern höherer Ordnung ausschließlich PI-Regler verwendet werden sollen. Für die im letzten Schritt verwendeten Anstiegszeiten konnte zwar ein Mehrgrößenregler entworfen werden, der die Kriterien der nominalen und robusten Stabilität (Gleichungen (6.7.3) und (6.7.5)) sowie der nominalen Performance (Gleichung (6.7.4)) jedoch verletzte dieser das Kriterium für robuste Performance (Gleichung (6.7.6)) leicht. Die Simulationen der Sprungantworten des geschlossenen Kreises für den Fall, dass die Verzögerung in den Stellgrößen berücksichtigt werden, zeigten jedoch, dass der Unterschied im Führungsverhalten zwischen dem PI-Reglern und den Reglern höherer Ordnung vernachlässigbar ist und in beiden Fällen eine leichte Kopplung zwischen den Regelgrößen auftritt. Dies bedeutet, dass die konkrete Modellunsicherheit im Hinblick auf die in der Robustheitsanalyse berücksichtigten Modellunsicherheiten nicht den ungünstigsten Fall darstellt.

Eines der Ergebnisse des vorherigen Reglerentwurfes war, dass im Falle der Berücksichtigung der Verzögerungen in den Stellgrößen keine vollständige Entkopplung zwischen den Regelkreisen erreicht werden kann. Daher wurde nachfolgend ein dezentraler PI-Regler entworfen mit denselben Spezifikationen für die Anstiegszeiten wie im Falle des voll besetzten Reglers. Ziel ist es, zu prüfen, ob die Robustheit der Regelung durch eine dezentrale Regelung verbessert werden kann und wie stark die Kopplung zwischen den Kreisen sein wird. Die Untersuchungen in Kapitel 6.7.2 haben gezeigt, dass die gewählte Regelungsstruktur im Hinblick auf eine dezentrale Regelung günstig ist und somit gute Aussichten auf Erfolg hat. Die Robustheitsanalyse der dezentralen PI-Regelung zeigte, dass alle Kriterien (Gleichungen (6.7.3)-(6.7.6)) erfüllt sind. In der linearen Simulation des geschlossenen Kreises zeigte sich, dass zwar Kopplungen zwischen den beiden Regelkreisen auftreten, die Unterschiede zwischen der Regelung des nominalen Modell und des Modells mit Berücksichtigung der Verzögerungen in den Stellgrößen vernachlässigbar sind. Da der dezentrale Regler noch deutliche Stabilitäts- und Robustheitsreserven zeigte (\sigma<sub>max</sub>=-3,1dB,  $\mu_{max}^{stab}$ =-15dB,  $\mu_{max}^{perf}$ =-3dB), bestand die Möglichkeit, die Bandbreite des Reglers für diese Struktur zu erhöhen, ohne dass Probleme in der Robustheit zu erwarten waren.

Im weiteren Verlauf des Reglerentwurfes wurde die Bandbreite so lange erhöht, bis eine weitere Steigerung entweder zu Robustheitsproblemen oder aber zu einem unbefriedigendem nominalen Verhalten führten. Die besten Ergebnisse wurden für Anstiegszeiten im Wunschverhalten von 2h für die Temperatur T4 und 0,5h für die Temperatur T60 erzielt. Eine weitere Steigerung der Bandbreite führte zu Problemen in der robusten Performance. Probeweise wurde die Ordnung des Reglers erhöht, um zu überprüfen, ob die robuste Performance durch einen komplexeren linearen Regler verbessert werden konnte. Dies war jedoch nicht möglich.

Der Vergleich der Ergebnisse des Entwurfes mit dezentralem Regler mir denen für einen voll besetzten Regler zeigte, dass eine bessere nominale Entkopplung nur unter Inkaufnahme schlechterer Robustheit erreicht werden kann. Im letzten Entwurfsschritt wurde daher untersucht, ob durch eine teilweise Besetzung der Nebendiagonalelemente des Reglers die Entkopplungseigenschaften verbessert werden können unter gleichzeitiger Beibehaltung einer guten Robustheit. Für einen 2x2 Regler bestehen offensichtlich zwei Möglichkeiten die Nebendiagonalelemente zu besetzen. Einerseits kann das (2,1)-Element besetzt werden, mit dem die Temperatur auf dem Boden 4 über das Rücklaufverhältnis geregelt wird, andererseits das (1,2)-Element zur Regelung der Temparatur auf Boden 60 durch die Heizleistung. Der Reglerentwurf ergab, dass bei der Einsatz eines PI-Reglers auf dem Element  $c_{21}(s)$  zu einer Verletzung des Kriteriums auf robuste Performance (Gleichung (6.7.6)) führt. Demgegenüber führte die Besetzung des Elementes  $c_{12}(s)$  zu einer besseren Entkopplung bei gleichzeitig guten Robustheitseigenschaften.

#### Zusammenfassung:

Die wesentlichen Ergebnisse des linearen Reglerentwurfes und der Robustheitsanalyse sind:

- Ein entkoppelnder Regler mit maximaler Bandbreite lässt sich nur durch einen voll besetzten Mehrgrößenregler höherer Ordnung erreichen. Die maximale Bandbreite ergibt sich durch die Stellgrößenbegrenzung. Mit einem voll besetztem PI-Regler lassen sich die Anforderungen an einen Regler mit hoher Bandbreite nicht realisieren.
- 2. Der entworfene Mehrgrößenregler zeigt sehr gute nominale Eigenschaften, ist jedoch nicht robust gegenüber den betrachteten Modellunsicherheiten. Obwohl die zur Verfügung stehende Stellenergie eine hohe Bandbreite zulässt, kann diese aus Robustheitsgründen nicht realisiert werden.
- 3. Für eine reduzierte Bandbreite kann mit einem voll besetztem Mehrgrößenregler ein sehr gutes nominales Führungsverhalten erreicht werden bei gleichzeitiger Sicherstellung der Robustheit. Im nominalen Fall können die beiden Regelgrößen vollständig entkoppelt werden. Werden die Verzögerungen in den Stellgrößen berücksichtigt, bleibt die Entkopplung sehr gut, wenn auch nicht vollständig.
- 4. Wird die Ordnung der zu verwendenden Regler auf die PI-Struktur beschränkt, kann der Kreis im Nominalfall trotzdem noch gut entkoppelt werden. Im Vergleich zum Regler höherer Ordnung verschlechtert sich das Führungsverhalten kaum. Jedoch kann die robuste Performance nicht mehr garantiert werden. Für den Fall der Verzögerungen in den Stellgrößen verschlechtert sich die Performance jedoch nur unwesentlich. Die bessere Entkopplung durch die Verwendung eines Reglers höherer Ordnung kommt nur im nominalen Fall zum Tragen.
- 5. Wird anstelle eines voll besetzten PI-Reglers eine dezentrale Struktur gewählt, können beide Regelkreise nicht mehr ganz entkoppelt werden. Die Robustheitsanalyse zeigt jedoch, dass der dezentrale Regler deutlich robuster als der voll besetzte PI-Regler und auch robuster als der voll besetzte Regler höherer Ordnung ist. Die bessere Entkopplung durch einen voll besetzten Regler geht somit zu Lasten der Robustheit.
- 6. Da die dezentrale Struktur günstigere Robustheitseigenschaften zeigt, wurde die zu erreichende Bandbreite angehoben und ein neuer dezentraler PI-Regler entworfen. Dieser zeigte gute nominale Eigenschaften und erwies sich als robust. Da dieser Regler die höchste Bandbreite bei gleichzeitig guter Robustheit erreicht, wird dieser für die Untersuchungen am nichtlinearen Modell ausgewählt. Dabei wird die verbleibende Kopplung der beiden Regelkreise in Kauf genommen, da diese einerseits noch mäßig ist und andererseits eine gewisse Kopplung bei allen anderen Reglern im Falle der Verzögerung in den Stellgrößen auftrat. Eine geringe Verschlechterung der Entkopplungseigenschaften wird somit als Preis für die höhere Bandbreite und bessere Robustheit in Kauf genommen.
- 7. Durch Besetzung des (2,1)-Nebendiagonalelementes im Regler kann die Entkopplung im nominalen Fall und auch bei Modellunsicherheiten im Vergleich

zum dezentralen Regler verbessert werden. Zusätzlich ergibt sich eine leichte Verbesserung der Robustheit. Daher wird dieser Regler ebenfalls für die Erprobung am nichtlinearen Prozessmodell ausgewählt.

### 6.7.5 Reglerperformance in der nichtlinearen Simulation

Abschließend werden der diagonal besetzte Regler (im Folgenden "diagonaler Regler" genannte) und der Regler mit zusätzlichem PI-Regler auf dem Element  $c_{21}(s)$  (im folgenden "triangularer Regler" genannt) am nichtlinearen Prozessmodell mit Berücksichtigung der Verzögerungen in den Stellgrößen getestet. Untersucht werden das Führungsverhalten und die Störgrößenunterdrückungseigenschaften des geschlossenen Kreises.

#### Führungsverhalten:

Für die Untersuchung des Führungsverhaltens wurden verschiedene Simulationsstudien durchgeführt. Als typisches Beispiel ist hier ein Sprung im Sollwert von T4 um  $\pm 1$  wiedergegeben. Neben den Ergebnissen der nichtlinearen Simulation sind gleichzeitig die Simulationen des linearen geschlossenen Kreises dargestellt, um den Effekt der Nichtlinearität des Prozesses zu quantifizieren.

Die Simulation der Erhöhung des Sollwertes für T4 in Abbildung 6.7.15 zeigt, dass beide Regler die Temperatur gemäß des Wunschverhaltens anheben. Betrachtet man den Verlauf der zweiten Regelgröße T60, so ist die Entkopplung des triangularen besser als die des diagonalen Reglers. Der Unterschied zwischen der Simulation des linearen und des nichtlinearen Modell ist in diesem Fall gering.



Abbildung 6.7.15: Führungsverhalten am linearen und nichtlinearen Modell mit Berücksichtigung der Stellgrößenverzögerung bei einem Sollwertsprung von T4 um +1 nach 1 Stunde.

Deutlicher tritt das nichtlineare Prozessverhalten in der Simulation für die Verringerung des Sollwertes T4 in Abbildung 6.7.16 zu Tage. Für keinen der beiden Reglern zeigt der geschlossene Kreis das spezifizierte Überschwingen von 10% und das Einlaufen in den Sollwert erfolgt etwas langsamer als im linearen Fall. Auch für diesen Fall sind die Entkopplungseigenschaften des triangularen Reglers besser als die des diagonalen. Den Unterschied zwischen dem linearen und dem nichtlinearen Modell erkennt man ebenfalls in den Differenzen zwischen den stationäre Werten der nichtlinearen und der linearen Simulation der Stellgrößen.



Abbildung 6.7.16: Führungsverhalten am linearen und nichtlinearen Modell mit Berücksichtigung der Stellgrößenverzögerung bei einem Sollwertsprung von T4 um -1 nach 1 Stunde.

#### Störgrößenunterdrückungseigenschaften:

Die Eigenschaften beider Regler bei der Unterdrückung von Einflüssen auf Grund von Störungen wurde durch Simulationen der Szenarien

- 1. die Feedmenge erhöht sich um 10%,
- 2. die Feedmenge verringert sich um 10%,
- 3. das Kondensat verläßt den Kondensator mit einer Unterkühlung von 10,
- 4. die Feedzusammensetzung ändert sich

untersucht. In allen Fällen konnten beide Regler die Störungen ausregeln. Als Beispiel ist die Simulation des Szenarios 1 in Abbildung 6.7.17 wiedergegeben. Mit beiden Reglern kann die Störung in den Sollwerten ausgeregelt werden, wobei die Unterschiede zwischen den Reglern vernachlässigbar sind. Für die anderen drei Szenarien ist das Verhalten des geschlossenen Kreises ähnlich.



Abbildung 6.7.17: Störgrößenunterdrückung am nichtlinearen Modell: Erhöhung der Feedmenge um 10%

Neben der Frage, wie gut der Effekt von Störungen in den Temperaturen T4 und T60 unterdrückt werden kann, ist entscheidend, welchen Effekt die Temperaturregelung auf die Schlüsselkomponenten in Kopf und Sumpf der Kolonne hat. Abbildung 6.7.18 zeigt den Verlauf der Schlüsselkomponente 4 im Sumpf der Kolonne für die vier Störszenarien. Beide Regler können in allen Fällen die Konzentration auf den ursprünglichen Wert zurückbringen. Die Regelung der anderen Schlüsselkomponente im Kopf der Kolonne zeigt ein ähnliches Verhalten.



Abbildung 6.7.18: Effekt der Temperaturregelung auf die Konzentration der Komponente 4 im Sumpf für die gewählten Störungen.

### 6.7.6 Zusammenfassung

Ausgangspunkt für den Reglerentwurf war ein nichtlineares Prozessmodell der Reaktivrektifikationskolonne in Form eines differential-algebraischen Gleichungssystems. Dieses Prozessmodell wurde benutzt um

- an Hand einer Sensitivitätsanalyse geeignete Temperaturmessstellen für die Regelung auszuwählen,
- ein lineares Modell am Betriebspunkt zu erzeugen und
- die entworfenen Regler zu testen.

Die Sensitivitätsanalyse lieferte drei Temperaturmessstellen innerhalb der Kolonne, die für die Regelung geeignet sind. Für diese drei Temperaturen als Prozessausgänge und die Verdampferleistung und das Rücklaufverhältnis als Prozesseingänge wurde ein lineares Modell für die Reglerstrukturauswahl und den Reglerentwurf berechnet. Durch ein Ordnungsreduktionsverfahren im Frequenzbereich wurde das lineare Modell von der Ordnung 248 auf 25 reduziert, ohne dass es zu nennenswerten Approximationsfehlern im Zeit- und Frequenzbereich kam. Die Reglerstrukturauswahl und der Reglerentwurf konnte anschließend mit Hilfe des ordnungsreduzierten linearen Modells durchgeführt werden.

Bei der Reglerstrukturauswahl wurden aus den drei Temperaturmessstellen die zwei ausgewählt, die

- möglichst gut mit den Kopf- und Sumpfkonzentrationen korrelieren,
- den Reglerentwurf möglichst einfach gestalten und
- eine dezentrale Regelungsstruktur begünstigen.

Durch eine Untersuchung der Relative-Gain-Arrays, der frequenzabhängigen Relative-Gain-Array-Number, der minimalen Konditionszahl sowie des stationären Zusammenhangs zwischen den Temperaturen auf den jeweiligen Böden und den Anteilen der Schlüsselkomponenten im Kopf und Sumpf wurden die Temperaturen auf den Böden 4 und 60 für die Regelung ausgewählt.

Die Anforderungen an den zu entwerfenden Regler waren:

- Einhaltung der Stellgrößenbeschränkungen,
- stationär genaues Ausregeln von Störungen,
- stationär genaues Führungsverhalten,
- gute Entkopplung der beiden Regelkreise,
- möglichst hohe Bandbreite (schnelle Regelung) und
- Sicherstellung der Robustheit bei Modellunsicherheiten.

Für den Entwurf der unterschiedlichen Regler wurde das Programm FASTER eingesetzt. Die Analyse der Regelung auf Robustheit wurde nach *Skogestadt und Postlethwaite 1996* durchgeführt. Dabei zeigte sich:

- Auch unter Berücksichtigung der Stellgrößenbeschränkungen kann eine hohe Bandbreite des geschlossenen Kreises erreicht werden (schnelle Regelung). Die zur Verfügung stehende Stellenergie reicht somit aus, den geschlossenen Kreis deutlich schneller als den offenen zu machen.
- Die Regelung mit hoher Bandbreite ist jedoch nicht robust. Eine robuste Regelung kann nur garantiert werden, wenn die Bandbreite verkleinert wird. Die erreichbare Bandbreite ist somit nicht durch die Stellgrößenbegrenzung sondern durch die Robustheitsanforderungen eingeschränkt.
- Eine dezentrale Regelung kann bei gleicher Robustheit auf höhere Schnelligkeit getrimmt werden als ein voll besetzter Regler. Auch bei dezentraler Regelung kann eine gute Entkopplung der Regelkreise erreicht werden. Eine leichte Verbesserung der Entkopplung bei gleichzeitig guter Robustheit und Schnelligkeit kann durch Ergänzung eines zusätzlichen Reglers auf einem Nebendiagonalelement der Reglermatrix des Mehrgrößenreglers erreicht werden.
- Eine gute Performance konnte bereits durch Verwendung von PI-Reglern in der Matrix der Mehrgrößenreglern erzielt werden. Durch den Einsatz von Reglern höherer Ordnung konnte weder die Robustheit noch die Bandbreite verbessert werden.
- Die Simulation des nichtlinearen Modells mit den entworfenen Reglern zeigte, dass die zuvor aufgestellten Anforderungen eingehalten werden konnten.

# 6.8 Entwurf einer nichtlinearen Regelung mit Zustandsbeobachter für den Prozess

Der Entwurf einer nichtlinearen Regelung mit Zustandsbeobachtung erfolgte am ISR in Stuttgart. Eine detaillierte Beschreibung des Entwurfsverfahrens findet sich im Abschlussbericht des ISR Stuttgart zum Forschungsvorhaben.

Um den sich im nächsten Abschnitt anschließenden Vergleich zwischen der linearen und der nichtlinearen Regelung zu motivieren, sind in Abbildung 6.8.1 und Abbildung 6.8.2 beispielhaft Führungs- und Störgrößenverhalten der linearen und der nichtlineare Regelung gegenübergestellt. Im Führungsverhalten in Abbildung 6.8.1 zeigt der nichlineare Regler ein deutlich schnelleres Erreichen des Sollwertes und ein sehr gut entkoppelndes Verhalten. Vergleicht man die Störgrößenunterdrückungseigenschaften in Abbildung 6.8.2, so reduziert der nichtlineare Regler sowohl die maximale Abweichung vom Nominalwert als auch die Dauer, in der die Abweichung auftritt, erheblich. Der nichtlineare Regler zeigt somit insgesamt eine deutlich bessere Performance in der nichtlinearen Simulation als der lineare Regler.



Abbildung 6.8.1: Vergleich des Führungsverhaltens der linearen und der nichtlinearen Regelung.



Abbildung 6.8.2: Vergleich der Störgrößenunterdrückungseigenschaften der linearen und der nichtlinearen Regelung hinsichtlich des Verlaufes der Schlüsselkomponente im Sumpf.

### 6.9 Vergleichende Bewertung beider Regelungen hinsichtlich der Regelgüte, Implementierbarkeit und Wirtschaftlichkeit

Die Simulationsstudien beider Regelungskonzepte haben gezeigt, dass die nichtlineare Regelung mit Zustandsbeobachter im Vergleich zum robusten, linearen Regler ein schnelleres Führungs- und Störgrößenunterdrückungsverhalten aufweist. Hierfür sind mehrere Gründe verantwortlich: Zunächst berücksichtigt der nichtlineare Regler die nichtlineare Dynamik des Prozesses explizit, während die Performance des linearen Reglers zwangsläufig mit der Abweichung des Prozesses vom nominalen linearen Prozessmodell abnimmt. Ein weiterer Aspekt bei der Bewertung der Performance beider Regler ist die Robustheit. Während im linearen Reglerentwurf die Robustheit explizit berücksichtigt und somit garantiert wurde, ist im nichtlinearen Fall die Robustheit ausschließlich in Simulationsstudien nachgewiesen worden. Die Untersuchungen der Robustheit im linearen Fall haben gezeigt, dass die erreichbare Bandbreite durch die Robustheitsanforderungen begrenzt ist. Tendenziell führt der Nachweis der Robustheit der Regelung mit dem hier verwendeten Verfahren zu einer konservativen Abschätzung, so dass für die berücksichtigten Modellunsicherheiten ggf. ein schnellerer linearer Regler entworfen werden könnte. Im linearen Fall treten neben den Modellunsicherheiten durch die Verzögerungen in den Stellgrößen noch Modellfehler auf Grund des nichtlinearen Verhaltens des Prozesses auf. Da die nichtlineare Regelung das nichtlineare Verhalten berücksichtigt, sind hier natürlich keine Einschränkungen der Schnelligkeit der Regelung hinsichtlich der Robustheit zu erwarten. Da an Hand der Simulationen nicht geklärt werden kann, welche Modellunsicherheiten dominieren, kann eine endgültige Bewertung beider Regelungskonzepte nur an Hand von Ergebnissen an der realen Anlage erfolgen. Die bessere Performance des nichtlinearen Reglers in der Simulation deutet aber auf ein Potential hin, dessen Nutzung in Betracht gezogen wird.

Hinsichtlich der Implementierbarkeit und der Wirtschaftlichkeit der Regelungskonzepte ist der lineare Regler klar im Vorteil. Da er aus drei PI-Reglern besteht, kann er einfach in jedes herkömmliche Prozessleitsystem implementiert werden. Demgegenüber besteht der nichtlineare Regler aus einer eigenen Software, die nicht direkt in ein PLS integriert werden kann. Dementsprechend muss ein zusätzlicher Rechner in die PLS-Architektur integriert und eine Schnittstelle zwischen den Systemen hergestellt werden. Unter den Kostenaspekten ist dabei die Anschaffung des PCs sicherlich zu vernachlässigen. Entscheidender hier ist der Aufwand für die Einrichtung der Schnittstelle zwischen dem PC und dem PLS, Installation und Prüfung der Software für den Beobachter und den Regler sowie die Wartung des Reglers im Betrieb. Die Ergebnisse in der Simulation zeigen jedoch ein gutes Potential zur Verbesserung der Regelung. so dass im Anschluss an das Projekt die Umsetzungsmöglichkeiten mit dem Betrieb diskutiert werden wird.

# 7 Ergebnisse Teilprojekt "Periodische Prozessführung von Rührkesselreaktoren"

Die Untersuchungen im Teilprojekt "Periodische Prozessführung von Rührkesselreaktoren" wurden gemäß dem Projektplan (vergl. "3 Projektdurchführung") vorgenommen. Die wesentlichen Vorgehensweisen und Ergebnisse werden im Folgenden beispielhaft zusammengefasst.

Grundsätzlich geht es in diesem Teilprojekt um die Auswahl und Berechnung periodischer Anregungsfunktionen (*Stankiewicz und Kuczynski 1995*). Ziel ist dabei die Verbesserung wirtschaftlich bedeutsamer Kriterien wie Ausbeute oder Selektivität nach dem algorithmischen Ansatz durch Formulierung eines Optimierungsproblemes. Als periodisch zu variierende Steuerfunktionen kommen im wesentlichen Zulauf- bzw. Ablaufmengenströme oder ggf. Temperaturen in Frage. Auf die Auswahl dieser Funktionen und deren Parameter wird eingegangen. Als industrielle Prozessbeispiele der Bayer AG wurden einphasige Reaktionssysteme herangezogen, die ein besonders hohes nichtlineares Potenzial versprechen, weil komplexe Reaktionsmechanismen mit zahlreichen Zwischenprodukten vorliegen. Die Modelle liegen als differential-algebraische Gleichungssysteme vor. Darüber hinaus soll eine mögliche Vorabbeurteilung des Verbesserungspotenzials von Prozessbeispielen durch periodische Anregung untersucht werden (z.B. Fourier-Analyse).

### 7.1 Identifikation geeigneter Modelle von Beispielprozessen bei der Bayer AG

Zur Erprobung der Auswirkungen einer periodischen Prozeßführung auf Bayer-relevante Prozesse wurden drei Beispielprozesse ausgewählt und modelliert. Die ausgewählten Modelle wurden teilweise erweitert und so überarbeitet, dass Simulationen sowohl im stationären als auch im dynamischen Modus durchgeführt werden konnten. Anschließend erfolgte eine Optimierung für den stationären kontinuierlichen und den normalen Batch-Betrieb. Dazu wurde für jeden Prozess ein Gütekriterium definiert, das als Zielfunktion für die Optimierung diente.

### 7.1.1 Beispiel 1

Beispiel 1 ist eine mehrstufige Reaktion, bei der eins der Zwischenprodukte über eine reversible Reaktion zu unerwünschten Abfallprodukten weiter reagieren kann. Beispiel 1 soll hier exemplarisch dargestellt und ein mögliches Gütekriterium für eine solche Reaktion erläutert werden.

Bei diesem Beispiel handelt es sich um eine Reaktion, in der Reaktand  $R_1$  in einzelnen Stufen mit insgesamt drei Molen  $R_2$  reagiert, woraus das Zielprodukt  $P_1$  entsteht. Dabei kann eins der Zwischenprodukte (ZP<sub>1</sub>) in einer reversiblen Reaktion (7.1.5) zu einem Nebenprodukt NP<sub>2</sub> führen, welches zu einer Reihe von Abfallprodukten weiter reagieren kann. Das recht komplexe Reaktionsschema sieht folgendermaßen aus:

$$\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2 \xrightarrow{\mathrm{OH}^-} \mathbf{ZP}_1 \tag{7.1.1}$$

$$ZP_1 + R_2 \xrightarrow{OH^-} ZP_2 \tag{7.1.2}$$

$$ZP_2 + R_2 + NP_4 \xrightarrow{OH^-} P_1 + NP_1$$
(7.1.3)

$$NP_1 + 0.5 NP_5 \longrightarrow 0.5 P_2 + NP_4$$
(7.1.4)

 $ZP_1 \xrightarrow{OH^-} NP_2 + NP_4$  (7.1.5)

$$P_1 + 2R_2 + NP_2 + NP_4 \xrightarrow{OH^-} NP_1 + W_5$$
(7.1.6)

 $2 R_2 + NP_2 + NP_4 \longrightarrow W_6 \tag{7.1.7}$ 

$$2 R_2 + NP_2 + NP_3 + NP_4 \xrightarrow{OH^-} NP_1 + W_2$$
(7.1.8)

$$3 R_2 + NP_2 + NP_3 + NP_4 \xrightarrow{OH^-} NP_1 + W_4$$
(7.1.9)

$$P_1 + 3R_2 + NP_2 + NP_4 \xrightarrow{OH^-} NP_1 + W_1$$
(7.1.10)

$$ZP_1 + R_2 + NP_4 \xrightarrow{OH^-} NP_1 + W_3$$
(7.1.11)

$$2 R_2 + NP_4 \xrightarrow{OH^-} NP_1 + NP_3$$
(7.1.12)

 $NPfest_5 \xrightarrow{} NP_5 + 2 OH^-$ (7.1.13)

Dabei repräsentiert Reaktion (7.1.13) das Fällungsgleichgewicht für den Feststoff Npfest<sub>5</sub> entsprechend dem Löslichkeitsprodukt.

Die beobachteten zeitlichen Änderungen der Konzentrationen  $\underline{c}$  werden durch das Gleichungssystem

$$\underline{\dot{c}} = \underline{\Delta} \cdot \underline{r}$$
 (Batch-Betrieb) (7.1.14)

beziehungsweise

$$\underline{\dot{c}} = \underline{\underline{\Delta}} \cdot \underline{\underline{r}} + \dot{V}(t) \cdot (\underline{\underline{c}}_{zu} - \underline{\underline{c}}) \qquad \text{(kontinuierlicher Betrieb)} \tag{7.1.15}$$

mit folgenden kinetischen Ansätzen für die Reaktionsraten r(j) mit den Geschwindigkeitskoeffizienten k(j) beschrieben:

$r(1) = k(1) \cdot [R_1] \cdot [R_2] \cdot [OH^-]$	(7.1.16)
$r(2) = k(2) \cdot [\mathbb{ZP}_1] \cdot [\mathbb{R}_2] \cdot [\mathbb{OH}^-]$	(7.1.17)
$r(3) = k(3) \cdot [\mathbb{ZP}_2] \cdot [\mathbb{R}_2] \cdot [\mathbb{OH}^-]$	(7.1.18)
$r(4) = k(4) \cdot [NP_1]$	(7.1.19)
$r(5) = k(5) \cdot [\mathbb{ZP}_1] \cdot [\mathrm{OH}^-]$	(7.1.20)
$r(-5) = k(-5) \cdot [\text{NP}_2] \cdot [\text{NP}_4] \cdot [\text{OH}^-]$	(7.1.21)
$r(6) = k(6) \cdot [NP_2] \cdot [P_1] \cdot [R_2] \cdot [OH^-]$	(7.1.22)
$r(7) = k(7) \cdot [NP_2] \cdot [NP_1] \cdot [OH^-]$	(7.1.23)
$r(8) = k(8) \cdot [NP_2] \cdot [NP_3] \cdot [OH^-]$	(7.1.24)
$r(9) = k(9) \cdot [NP_2] \cdot [NP_3] \cdot [R_2] \cdot [R_2] \cdot [OH^-]$	(7.1.25)
$r(10) = k(10) \cdot [NP_2] \cdot [P_1] \cdot [NP_3] \cdot [R_2] \cdot [OH^-]$	(7.1.26)
$r(11) = k(11) \cdot [\text{ZP}_1] \cdot [\text{OH}^-]$	(7.1.27)
$r(12) = k(12) \cdot [R_2] \cdot [R_2] \cdot [OH^-]$	(7.1.28)

Dabei werden Konzentrationen in eckigen Klammern angegeben, <u>c</u> ist der Vektor der Konzentrationen, <u>A</u> die stöchiometrische Matrix. Dieses Gleichungssystem (für die Reaktionen 7.1.1 bis 7.1.12) gilt nur unter der Einschränkung, dass die Konzentration von R<sub>2</sub> nicht vernachlässigbar klein wird. Dies ist in dem beschriebenen Prozeß auf Grund des vorgegebenen Einsatzkonzentrationsverhältnisses von R<sub>1</sub> zu R<sub>2</sub> von 1:3.15 zu jedem Zeitpunkt gewährleistet. Es sei an dieser Stelle darauf hingewiesen, dass es sich bei dem beschriebenen Modell nicht um ein die Elementarreaktionen beschreibendes Modell handelt, sondern dass lediglich die Effektivkinetik beschrieben wird!

Das Modellbeispiel 1 enthält insgesamt 91 Gleichungen, davon 19 Differentialgleichungen (Stoffmengen der relevanten Reaktanden und eine Massenbilanzgleichung) mit 160 Variablen bzw. Parametern.

Im modellhaften kontinuierlichen stationären Betrieb läuft die Reaktion in einem ideal durchmischten Rührkessel ab. Der Dosierstrom besteht aus R<sub>1</sub>, R<sub>2</sub>, NP<sub>4</sub>, und NPfest<sub>5</sub>.

Für die Optimierung des stationär betriebenen kontinuierlichen Prozesses ist ein Gütekriterium notwendig, das eine Objektivierung des Simulationsergebnisses ermöglicht. In

diesem Beispiel wurde als Gütekriterium Q das Verhältnis aus Molenfluß  $\overset{\bullet}{N}$  des Produktes P<sub>1</sub> und Reaktand R<sub>1</sub> geteilt durch die Verweilzeit  $\tau_{res}$  gewählt:

$$Q = N_{P_1} / N_{R_1} / \tau_{\rm res}$$
(7.1.29)

Dies Gütekriterium ist somit ein Maß dafür, welcher Umsatz (bezogen auf den teureren Reaktanden  $R_1$ ) pro Zeiteinheit erreicht werden kann.

#### 7.1.2 Beispiel 2

Modellbeispiel 2 beschreibt einen Polymerisationsprozess, bei dem ein Monomer mit zwei aktiven Endgruppen mit einem Reaktanden in Folge- und Parallelreaktionen zu Polymeren unterschiedlicher Kettenlänge und mit unterschiedlichen Endgruppen reagieren kann. Auf einige Einzelheiten von Beispiel 2 wird ebenfalls noch kurz eingegangen, da hierfür in Abschnitt 7.3 auch Ergebnisse angeführt werden:

In einer Grundreaktion (7.1.30) reagiert Endgruppe A mit Reaktand E zu Endgruppe B und Nebenprodukt N, in einer weiteren Grundreaktion (7.1.31) Endgruppe A mit Endgruppe B zu Q (Kettenverlängerung) und Nebenprodukt N:

$$\mathbf{R}_0 A + E \longrightarrow \mathbf{R}_0 B + N \tag{7.1.30}$$

$$\mathbf{R}_1 B + \mathbf{R}_2 A \longrightarrow \mathbf{R}_1 Q \mathbf{R}_2 + N \tag{7.1.31}$$

Im Reaktor werden Monomere ARA mit zwei reaktiven Endgruppen A mit einer Lösung von E umgesetzt. Dadurch können Moleküle ARB, BRB, ARQRA, ARQRB, BRQRB, ARQRQRA, ARQRQRB, BRQRQRB usw. entstehen, wobei Moleküle mit mehr als 3 Einheiten R entsprechend ihrer Endgruppen in Summenmolekülen zusammengefaßt werden. Die kinetischen Ansätze aller Reaktionen sind in Form 2. Ordnung (jeweils 1. Ordnung bezüglich der beteiligten Edukte). Die Abhängigkeit von der Temperatur ist durch die

Verwendung der Struktur eines Arrhenius-Ansatzes berücksichtigt. Zielmolekül ist Zwischenprodukt BRQRB. Als Gütefunktional wird das molare Verhältnis von Zielprodukt BRQRB zu ARA definiert.

$$Q = N_{BRQRB} / N_{ARA} \tag{7.1.32}$$

Für die periodische Prozessführung stehen neben der Temperatur die Zulaufrate des Monomers ARA und die des Reaktanden E (in Lösung) zur Verfügung. Die Reaktion wird im Überschuss von E durchgeführt. Diese Größe wird variiert, die Temperatur wird aus weiter unten erläuterten Gründen (Abschnitt 7.3) konstant gehalten. Als weitere Einschränkung ist Modell 2 nur in einem engen Temperaturbereich gültig.

Das Modell 2 enthält insgesamt 183 Gleichungen, davon 20 Differentialgleichungen (Stoffmengen der relevanten Reaktanden) mit 285 Variablen bzw. Parametern.

#### 7.1.3 Beispiel 3

Bei der Modellreaktion 3 handelt sich um eine Vernetzungsreaktion, bei der in einem Lösungsmittel  $R_3$  gelöstes Polymer  $R_1$  (genau genommen bezeichnet  $R_1$  eine Wiederholeinheit des Polymeren) mit einem Vernetzer  $R_2$  reagiert. In einer Nebenreaktion zerfällt der Vernetzer zu einem toxischen Nebenprodukt N. Die Reaktionen, die als irreversibel angesehen werden können, lassen sich durch folgendes Schema beschreiben:

$$\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2 \to \mathbf{I} + \mathbf{W}_1 \tag{7.1.33}$$

$$2I \rightarrow I + P_1 + W_2 \tag{7.1.34}$$

$$R_2 \rightarrow W_1 + N \tag{7.1.35}$$

$$\mathbf{R}_1 + \mathbf{N} \to \mathbf{I} \tag{7.1.36}$$

$$R_1 + R_3 \rightarrow 0.5W_3 + P_2$$
 (7.1.37)

Hierbei sind  $W_1$ ,  $W_2$  und  $W_3$  Abfallprodukte und I ist ein Zwischenprodukt.  $P_1$  ist kein Produkt im eigentlichen Sinne, sondern bezeichnet die Anzahl der Vernetzungsstellen, während  $P_2$  einen Zähler für neu entstandene Endgruppen darstellt. Die Reaktionsgeschwindigkeiten der einzelnen Schritte lassen sich durch die folgenden Gleichungen beschreiben:

$$r(1) = k(1) \cdot [R_1] \cdot [R_2]$$
(7.1.38)

$$r(2) = k(2) \cdot [I]^2$$
(7.1.39)

$$r(3) = k(3) \cdot [R_2]$$
(7.1.40)  
$$r(4) = k(4) \cdot [R_1] \cdot [N_1]$$
(7.1.41)

$$r(4) = k(4) \cdot [R_1] \cdot [N]$$
(7.1.41)

$$r(5) = k(5) \cdot [R_1] \cdot [R_3]$$
(7.1.42)

Als Gütefunktion wird die Konzentration an dem toxischen Nebenprodukt N herangezogen, die minimiert werden muß, wobei die Vernetzung, ausgedrückt durch die Konzentrationsdifferenz  $[P_1] - [P_2]$ , einen vorgegebenen Wert erreichen muß. Trotz einer recht unterschiedlichen Grundstruktur des Gesamtmodells im Vergleich zu Modell 1 waren die Ergebnisse der Simulations- und Optimierungsrechnungen mit diesem Modell denen für Modell 1 sehr ähnlich. Da sich aus diesem Grund aus den Ergebnissen keine weiteren allgemein interessierenden Erkenntnisse ergaben, beschränken sich die in den folgenden Abschnitten dargestellten Ergebnisse auf die Modellbeispiele 1 und 2.

### 7.2 Modellrechnungen zur Optimierung der Prozesse für stationären kontinuierlichen Betrieb

Sehr wichtig für eine sinnvolle Bewertung der periodischen Anregung eines Prozess im Vergleich zu stationärem Betrieb ist die Optimierung des Prozesses für die stationäre Betriebsweise. Dabei sind neben dem Gütekriterium zusätzlich prozessbedingte Einschränkungen zu beachten, die sich z.B. aus Sicherheitsbetrachtungen, apparativen Gesichtspunkten oder der weiteren Prozesskette ergeben. Bei Beispiel 1 war als Einschränkung im Prozeß ein minimaler Umsatz vorgegeben von 75% bezogen auf den Reaktanden R<sub>1</sub>, d.h.

$$N_{P_i}/N_{R_i} \ge 0.75$$
. (7.2.1)

Die Optimierung des stationären kontinuierlichen Prozesses unter Variation der Verweilzeit und Reaktionstemperatur führte zu einem Optimum von Q = 0.375 /h bei einer Verweilzeit von 2 Stunden und einer Reaktionstemperatur von 88°C. (Noch höhere Verweilzeiten führen zwar zu einem noch höheren Wert für Q, jedoch unter Verletzung der Nebenbedingung

• • (7.2.2) 
$$N_{P_1} / N_{R_1} < 0.75$$
,

d.h. das Produkt fällt in einer so geringen Konzentration an, dass die Aufarbeitung unwirtschaftlich wird.)

In den Simulationsrechnungen für Modellbeispiel 2 wurde zunächst der Einfluß der Zulauf-/Ablaufströme und der Temperatur auf den optimalen stationären Betriebspunkt untersucht. Dabei ergaben sich für einen weiten Bereich von Temperaturen zugehörige Zulaufraten mit jeweils sehr ähnlichen Zahlenwert des Gütekriteriums am optimalen stationären Betriebspunkt, so dass für weitere Rechnungen die Temperatur festgelegt und nur die Zulaufrate variiert wurde (siehe Abbildung 7.3.1).



Abbildung 7.2.1 Normierte Darstellung des optimalen Bereichs von Zulaufraten für unterschiedliche Temperaturen beim stationären Betrieb für Modellbeispiel 2. Die Abweichungen am jeweiligen Optimum des Gütekriteriums sind geringer als 0,5% über den dargestellten Bereich.

Prinzipiell verringert sich bei erhöhter Temperatur die benötigte Zulaufrate von Reaktand E für den optimalen stationären Betrieb. Der numerische Wert der Zielfunktion Q am stationären Optimum in Modellbeispiel 2 beträgt 0,1165 (bei Variation des Molenstroms der Lösung von Reaktand E). Diese Zahl wird damit als Referenzwert für die periodische Anregung (siehe Abbildung 7.3.4.) herangezogen.

### 7.3 Periodische Anregung des Prozesses im Modell und Vergleich mit konventioneller Prozessfahrweise

Die periodische Anregung eines Prozesses kann grundsätzlich auf sehr unterschiedliche Weise erfolgen. Zum einen können hierbei die physikalischen Eingangsgrößen, die im Prozeß periodisch variiert werden, unterschieden werden. Zum anderen sind die durch mathematische Funktionen beschriebenen Formen der zeitlichen Veränderung dieser Eingangsgrößen bzw. die Kombination der Veränderung dieser Größen (s.u.) zu unterschieden.

Als physikalische Eingangsgrößen sind die Temperatur, Zulauf- und Ablaufströme sowie die Zulaufkonzentrationen variierbar. Aus industrieller Sicht ist eine periodische Variation der Temperatur mit geringer Periodenlänge schwieriger zu realisieren (Trägheit des Wärmeübertragungssystems z.B. über die Reaktorwände). Für die Beispielmodelle der Bayer AG liegt ein enger Gültigkeitsbereich bezüglich der Temperatur vor, so dass eine Variation der Temperatur nur in recht begrenztem Umfang zulässig ist.

Werden Zulauf- und Ablaufströme unabhängig voneinander variiert, verändert man auf diese Weise das mittlere Reaktionsvolumen, was zu einer geringeren mittleren Auslastung der Anlage führen kann. Dabei würde das Gütekriterum Q geringere Zahlenwerte annehmen, was dem Optimierungsziel widerspräche. Dies gilt natürlich nur, wenn nicht gleichzeitig die spezifische Ausbeute so gesteigert werden kann, dass dieser Effekt überkompensiert wird. Da dies im Allgemeinen nicht der Fall ist, ist es dann günstiger, beide Ströme so miteinander gekoppelt zu variieren, dass das zur Verfügung stehende Reaktorvolumen optimal genutzt wird.

Auch bei der Form der periodischen Anregung gibt es mehrere Möglichkeiten, z.B. kann sie in Form einer Sinusschwingung (Abbildung 7.3.1) oder einer Rechteckfunktion (Abbildung 7.3.2) erfolgen.



Abbildung 7.3.1: Formen sinusförmiger periodischer Anregung.

### Rechteckförmige Anregung



Grenzfall: repeated Batch



Zugrundeliegende Idee für Verwendung einer rechteckförmigen Funktion ist die damit verbundene sehr sensitive, pulsartige dynamische Anregung eines System (Pulsfunktionen sind informationsreichere Testsignale als zum Beispiel sinusförmige Anregungen, da ein breiteres Frequenzspektrum angeregt wird). In der Bioverfahrenstechnik wird zum Beispiel die Pulsantwort eines kontinuierlichen Fermentationsprozesses nach einer langen stationären Betriebsphase aufgenommen, um dadurch einen maximalen Informationsgehalt über das dynamische Verhalten des Systems zu erzielen (*Schwarz 1993*). Die Auswertung der Fisher-Informationsmatrix (*Goodwin und Payne 1977*) lieferte dieses Ergebnis für den Vergleich unterschiedlicher Formen von Testfunktionen (im genannten Beispiel sollten durch geeignete dynamische Experimente Parameter eines metabolische strukturierten Modells mit möglichst engen Vertrauensintervallen geschätzt werden. Dabei ergab sich eine ganz bestimmte Kombination von Amplitude und Periode mehrerer Pulse für einen zuvor festgelegten Beobachtungszeitraum).

Nach der rechteckförmigen (pulsartigen) Zugabe einer großen Stoffmenge erfolgt der weitere Betrieb bei reduzierter konstanter Zulaufrate bis zum nächsten "Puls", so dass im zeitlichen Mittel die gleiche Stoffmenge wie bei konstanter Zulaufrate in den Reaktor gegeben wird. Zur numerischen Realisierung in SpeedUp wurden die Flanken des Rechtecksignals mit geeigneten kubischen Funktionen approximiert. In Abbildung 7.3.1 und Abbildung 7.3.2 sind unterschiedliche Anregungsformen für eine periodische Prozessführung schematisch dargestellt. Diese sind gekennzeichnet durch den Funktionstyp (z.B. sinusförmig, rechteckförmig oder auch konstant), die Periodenlänge, die Amplitude bzw. die zugegebene Stoffmenge. Durch Kombination verschiedener Funktionen für die Zulauf- bzw. Ablaufrate können beliebige Formen für den Zeitverlauf des Reaktorfüllvolumens erzielt werden.

Da bei einer Rechteckfunktion bezüglich des Gütekriteriums sensitivere Effekte zu erwarten sind als bei Anregung durch die glattere Sinusfunktion, wurde ein Großteil der Simulationen mit Rechteckfunktionen durchgeführt. Dabei wurde die Funktion derart gewählt, dass genau dann Stoff zugegeben wird, wenn direkt zuvor abreagiertes Stoffgemisch dem Reaktor entnommen wurde. Dann wird wie angegeben das Reaktorvolumen optimal ausgenutzt. Als Grenzfall einer der Verweilzeit entsprechenden Periodenlänge ergibt sich ein repeated Batch-Prozess, da dann der gesamte Reaktorinhalt ausgetauscht wird. Bei Beispiel 1 wurde die Pulsbreite auf 0,5 Minuten gesetzt und ist damit vernachlässigbar gegenüber der mittleren Verweilzeit im Reaktor von 2h. Bei den Simulationsrechnungen wurden die mittlere Verweilzeit und die Temperatur konstant gehalten (Verweilzeit: 2h, Reaktionstemperatur: 88°C).

Abbildung 7.3.3 zeigt für dieses Beispiel die Änderung des Gütekriteriums mit der Zeitdauer einer Periode,  $\tau_{per}$ . Die Simulation mit  $\tau_{per} = 0$  entspricht dem kontinuierlich betriebenen stationären Rührkesselreaktor und  $\tau_{per} = 2h$  einem Batchbetrieb als repeated Batch. Es ist deutlich erkennbar, dass die periodisch gepulste Fahrweise einen Vorteil gegenüber der Fahrweise mit kontinuierlicher Dosierung aufweist, der repeated Batch aber den günstigsten Fall darstellt. Die beobachtete Erhöhung des Gütekriteriums für den gepulsten Fall resultiert demnach nur daraus, dass sich die Fahrweise mit periodisch angeregter Dosierung der Batch-Fahrweise annähert, bis sie schließlich in eine Batch-Fahrweise übergeht.



**Abbildung 7.3.3:** Veränderung des Gütekriteriums Q mit der Periodendauer  $\tau_{per}$ . Erläuterungen siehe Text.

Nicht beantwortet werden kann die interessante Frage, ob der in Abbildung 7.3.3 aufgezeigte Übergang zwischen kontinuierlicher und absatzweiser Prozessführung einen allgemeinen Fall darstellt. Nicht ausgeschlossen werden kann für andere nichtlineare Systeme daher die Möglichkeit einer optimalen Anregungsperiode für eine periodische Prozessführung, welche weder dem Batch- noch dem Konti-Betrieb entspricht.

Für Modellbeispiel 2 ergaben sich durch eine periodische Fahrweise keine Verbesserungen bei rechteckförmiger Anregung bei konstantem Füllstand des Reaktors, dagegen eine sehr geringe Verbesserung bei sinusförmiger Variation der Zulaufrate der Lösung von Reaktand E. Für beide Anregungsformen wurden zahlreiche Simulationsrechnungen mit unterschiedlichen Amplituden und Periodendauern durchgeführt. Durch eine sinusförmige Anregung wird der Zahlenwert des Gütekriteriums im besten Fall allerdings um lediglich etwa 1% gegenüber dem optimalen stationären Betrieb erhöht (Abbildung 7.3.4). Die Amplitude entsprach in diesem Beispiel der des Optimalwerts für den stationären Betrieb, d.h. die Zulaufrate bewegt sich sinusförmig zwischen Null und dem zweifachen des stationären Optimalwerts (maximale Amplitude für sinusförmige Anregung). Bei geringeren Amplituden ergeben sich noch geringere Verbesserungen.



Abbildung 7.3.4: Gütekriterium in Abhängigkeit der Periodendauer der sinusförmigen Variation der Zulaufrate von Reaktand E für Modellbeispiel 2.

Zur Veranschaulichung sind die Zeitverläufe der Konzentrationen von E, von Monomer ARA, von Zielprodukt BRQRB sowie von Zwischenprodukten ARB und ARQRB (Vorstufen des Zielproduktes) für die optimale sinusförmige Anregung in Abbildung 7.3.5 dargestellt. Erkennbar ist eine Phasenverschiebung der gezeigten Größen im eingeschwungenen Zustand: die Konzentration des Zielprodukts BRQRB erreicht etwas später als die von Reaktand E ihr Maximum. Die Konzentration von ARA ist dann am größten, wenn die Konzentration von E gering ist. Die Periodendauer bei dieser optimalen Anregung entspricht interessanterweise etwa der Verweilzeit von ARA von 5000 s. Qualitativ schwingen alle Zustandsgrößen, auch die hier nicht gezeigten, mit gleicher Periodendauer wie die Anregungsperiode mehr oder weniger phasenverschoben mit. Aus der grafischen Darstellung allein kann bei dieser geringen Verbesserung von 1% jedoch nicht auf die zu Grunde liegenden dynamischen Eigenschaften des Systems geschlossen werden.

Im Batch-Betrieb sind dagegen Zahlenwerte des Gütekriteriums von 325% im Vergleich zum sinsuförmig optimierten periodischen Betrieb erreichbar, so dass die Batch-Fahrweise reaktionstechnisch weitaus günstiger ist. Falls betriebliche Gründe gegen eine Batch-Fahrweise sprechen, ist eine kontinuierlich betriebene Rührkesselkaskade oder falls möglich ein Rohrreaktor der periodischen Fahrweise mit einem Reaktionsgefäß vorzuziehen.



Abbildung 7.3.5: Zeitverläufe wichtiger Zustandsgrößen für Modellbeispiel 2 (Polymerisationsreaktion) bei sinusförmiger Anregung durch Variation der Zulaufrate von Reaktand E. Hierbei wird das Füllvolumen auf einen konstanten Wert geregelt.

### 7.4 Regelungstechnisches Konzept zur Umsetzung der periodischen Prozessführung

Die in Abschnitt 7 vorgestellten Ergebnisse zeigen, dass eine technische Umsetzung der periodischen Anregung in Form einer Regelung für die untersuchten Beispielmodelle nicht sinnvoll ist. Demzufolge ist eine Abschätzung der technischen Realisierbarkeit einer solchen periodischen Fahrweise nicht notwendig. Eine entsprechende Mittelkürzung im Rahmen des Arbeitspaketes (s. Abschnitt 3) wurde beantragt und bewilligt. Die nicht einfachen regelungstechnischen Grundlagen für ein solches Konzept wurden vom Projektpartner an der RWTH Aachen entwickelt und getestet und stehen für zukünftige Anwendungen zur Verfügung.

### 7.5 Numerische Vorabanalyse des potenziellen nichtlinearen Charakters eines dynamischen Systems

Das  $\pi$ -Kriterium kann als Screeningmethode zur schnellen Beurteilung des Potenzials eines nichtlinearen Systems bezüglich periodischer Anregung eingesetzt werden. Als Ergebnis wird damit im positiven Fall auch eine Information über Amplitude und Frequenz einer z.B. sinusförmigen Anregung gegeben. Für die rechteckförmige Anregung ist die Implementierung eines derartigen Softwarewerkzeugs aufwendig.

Wärend der Projektpartner an der RWTH Aachen mit der Entwicklung und Implementierung des  $\pi$ -Kriteriums befasst war, wurden bei der Bayer AG zusätzlich numerische Fourier-Analysen zur Vorabbeurteilung des potenziellen nichtlinearen Charakters der betrachteten Modelle eingesetzt. Hierbei wurde die Systemantwort z.B. auf eine sinusförmige Anregung nach dem Einschwingen numerisch aufgezeichnet. Die Auswertung durch schnelle Fourier-Transformation (FFT) erfolgte unter Verwendung der Software Origin 5.0 nach der Methode von Hamming.

Werden verschiedene Amplituden und Frequenzen bei der Anregung getestet, kann durch die jeweilige Auftragung von Amplitude und Phasenverschiebung über der Anregungsfrequenz eine Beurteilung des potenziellen nichtlinearen Verhaltens eines dynamischen Systems vorgenommen werden. Diese Vorgehensweise ist in der Literatur bekannt (z.B. *Oppenheim u.a.* 1999). Sind keine Nebenpeaks oder sonstige auffällige Bereiche im Frequenzspektrum vorhanden, verhält sich das System näherungsweise linear. Eine periodische Prozessführung erscheint dann wenig erfolgversprechend.

Diese Vorgehensweise wurde auf einen Teil der hier untersuchten Prozessmodelle und zwar auf Beispielmodelle 1 und 2 angewandt. Für eine sinusförmige Anregungsform wurden Amplitude und Periode variiert, jeweils die Systemantwort numerisch aufgezeichnet und durch schnelle Fourier-Transformation ausgewertet. Dabei zeigte sich in allen Fällen ein qualitativ lineares Systemverhalten, d.h. es waren keine auffälligen Bereiche im Frequenzspektrum zu erkennen. Für das Modellbeispiel 2 ist eine solche Auswertung in Abbildung 7.5.1 aufgetragen. Dargestellt ist eine Fourieranalyse des Ausgangssignals für eine sinusförmige Variation von Zulauf- und Ablaufrate bei konstantem Füllvolumen des Modellbeispiels 2 mit einer Anregungsfrequenz von 2·10<sup>-4</sup>Hz bei einer Amplitude, die der Zulaufrate am optimalen stationären Betriebspunkt entspricht (Amplitude und Periode wurden so ausgewählt, daß sie einem optimalen periodischen Betrieb bei sinusförmiger Anregungsform entsprechen). Man erkennt, dass der Prozess sich für diese Anregung qualitativ linear verhält, da kaum andere Frequenzanteile im Ausgangsspektrum zu finden sind. Entsprechende Ergebnisse wurden auch bei anderen Amplituden und Perioden sowie bei Untersuchung der anderen Modellbeispiele erzielt. Es zeigte sich also in allen betrachteten Fällen ein qualitativ lineares Systemverhalten.



**Abbildung 7.5.1:** Fourieranalyse des Ausgangssignals für eine sinusförmige Anregung des Modellbeispiels 2 mit einer Anregungsfrequenz von 2·10<sup>-4</sup> Hz berechnet durch schnelle Fourier-Transformation.

Dies bestätigt die durch Simulation periodischer Anregungsformen erzielten Ergebnisse. Für zukünftige Anwendungen kann die Fourier-Analyse bereits zur einfachen Vorab-Beurteilung von Prozessmodellen eingesetzt werden. Die etwas aufwendigere Anwendung des  $\pi$ -Kriteriums würde im qualitativ linearen Fall zu den gleichen Ergebnissen führen (siehe Abschlussbericht des Projektpartners an der RWTH Aachen).

# 8 Verwertbarkeit der Ergebnisse

### 8.1 Teilprojekt "Analyse und Synthese nichtlinearer Prozessführungskonzepte für Reaktivrektifikationskolonnen"

Bei den Arbeiten im Gebiet der Analyse und Synthese nichtlineare Prozessführungskonzepte für die reaktive Rektifikation sind sowohl die konkreten Ergebnisse für den untersuchten Prozess als auch die eher prinzipiellen Erkenntnisse und neuen Fragestellungen, die sich aus dem Beispiel ableiten lassen, interessant.

### 8.1.1 Bewertung des Anwendungsbeispiels

Für den konkreten Prozess haben die Arbeiten im Bereich des linearen und nichtlineare Reglerentwurfes die Grenzen der linearen Regelung und das Verbesserungspotential durch eine nichtlineare Regelung aufgezeigt und einen Weg aufgewiesen, dieses Potential zu nutzen. Zwar sind die im Zeitraum des Vorhabens durchgeführten Arbeiten auf Ebene der Simulation durchgeführt worden, so dass bei der Umsetzung sicherlich noch Bedarf bei der Feineinstellung des Beobachters und des nichtlinearen Reglers zu erwarten sind, jedoch haben die Simulationsstudien bereits die Grenzen und Möglichkeiten der unterschiedlichen Konzepte aufgezeigt. Über eine praktische Implementierung der Regelungskonzepte wird im Anschluss an das Forschungsvorhaben gemeinsam mit den Mitarbeitern der Bayer AG aus dem Produktionsbetrieben entschieden werden.

### 8.1.2 Prinzipielle Erkenntnisse und neue Fragestellungen

Als nützlich wird sich in Zukunft das im Zusammenhang mit der Untersuchung der Kolonne am ISR entwickelte und der Bayer AG zur Verfügung gestellte Tool zur Untersuchung von Prozessen auf mehrfach stationäre Zustände ("Fortsetzungsmethoden") erweisen. Mit Hilfe dieses Tools können an Hand der Prozessmodelle mehrfach stationäre Zustände bereits erkannt und entsprechend bei der Auslegung der Anlage oder dem Entwurf eines Regelungskonzeptes berücksichtigt werden.

Entscheidend sind aber insbesondere die Erkenntnisse und Fragestellungen, sich aus der Untersuchung des Beispieles ableiten lassen. So zeigen die Ergebnisse, dass der Prozess sehr wohl mittels einer linearen Regelung geregelt werden kann, obwohl auf Grund der starken Verkopplung der Reaktionen mit der Stofftrennung starke nichtlineare dynamische Effekte vermutet werden konnten. Aus Sicht der Regelung ist das dynamische Verhalten dieser Kolonne vergleichbar dem einer herkömmlichen Rektifikationskolonne ohne Reaktion. Durch die Regelung wird der Prozess stets in der Nähe seines Arbeitspunktes gehalten. In der Umgebung des Arbeitspunktes scheinen die Nichtlinearitäten durch die Kopplung zwischen Reaktion und Stofftrennung nicht so stark ausgeprägt zu sein, als dass sie zu einem Versagen der linearen Regelung führen. Entscheidend ist somit nicht die Frage, ob diese Verkopplung zu einem stark nichtlinearen Verhalten im offenen Kreis führt, sondern ob sie im geschlossenen Kreis zum Tragen kommt. Losgelöst vom hier betrachteten Prozess ist die verallgemeinerte Frage, wie analysiert werden kann, wie stark sich die nichtlineare Dynamik, die sich in der Analyse des Verhaltens eines Prozesses im offenen Kreis zeigt, im geschlossenen Kreis auswirkt. Die Notwendigkeit einer nichtlinearen Regelung ergibt sich somit nicht so sehr aus der Analyse des offenen, sondern aus der des geschlossenen Kreises. Während die in diesem Forschungsvorhaben eingesetzten Methoden zur Analyse der nichtlinearen Prozessdynamik (Fortsetzungsmethoden) vorwiegend für die Untersuchung des offenen Kreises geeignet sind, sollten zukünftige Arbeiten sich daher der Problemstellung widmen, ob und wie der geschlossene Regelkreises analysiert werden kann, ohne dass dafür der Regler selbst entworfen werden muss, sondern nur die Information vorgegeben wird, ob dieser linear oder nichtlinear ist. Eine Methode, die solche Analyse erlaubt, würde eine sehr schnelle Abschätzung erlauben, ob eine nichtlineare Regelung notwendig ist oder nicht. Neben dem Einsatz für bereits bestehende Anlagen könnte dies auch bei der Verfahrensentwicklung eingesetzt werden, um die Integration von Prozessdesign und Prozessführung weiter voranzutreiben.

Neben den Fragen zu geeigneten Analysetools für den offenen und den geschlossenen Kreis muss auch das eingesetzte nichtlineare Regelungskonzept kritisch hinterfragt werden. Der am ISR in Stuttgart entworfene nichtlineare Regler ist in die Kategorie der geometrischen Verfahren, und zwar in die Klasse der exakten Eingangs-Ausgangs-Linearisierung einzuordnen. Praktische Anwendungen dieses Konzeptes im Bereich der chemischverfahrenstechnischen Prozesse beschränken sich bislang im Wesentlichen auf die Kompensation explizit bekannter und genau beschreibbarer Nichtlinearitäten (verursacht z.B. durch entsprechende Behältergeometrien), die von akademischer Seite bekannten Beispiele sind ebenfalls vielfach Systeme geringer Komplexität, wobei häufig auch idealisierend von einem messtechnisch komplett erfassbaren Zustandsvektor und unbeschränkten Stellgrößen ausgegangen wird. Die in diesem Projekt durchgeführten Arbeiten sind somit durchaus wegweisend, als dass eine reale und industriell relevante Problemstellung behandelt und im Vergleich zu einem linearen Regler ein entsprechendes Potenzial hinsichtlich besserer Störgrößenunterdrückung und schnellerem Führungsverhalten aufgezeigt wurde. Eine endgültige Beurteilung der Anwendbarkeit und des nachhaltigen Erfolgs einer auf der exakten Linearisierung basierenden Regelungsstruktur in Kombination mit einem nichtlinearen Zustandsbeobachter ist für den untersuchten Prozess erst nach erfolgtem Praxistest möglich. Dessen Durchführung und insbesondere Durchsetzung in den Produktionsbetrieben wird neben der im vorherigen Kapitel bereits angesprochenen Implementierungs- und Wartungsproblematik dadurch erschwert, dass im Gegensatz zu linearen Entwurfsverfahren a priori keine Aussagen über Stabilität und Robustheit gemacht werden, was bei dem Konzept der asymptotisch exakten Linearisierung (Zustandsregler mit Beobachter) zusätzlich durch die Nichtgültigkeit des Separationsprinzips bei nichtlinearen Systemen erschwert wird. Die Analyse von Stabilität und Robustheit kann einzig an Hand von Simulationsuntersuchungen durchgeführt werden, deren Aussagekraft entscheidend von der Qualität des Modells und der Kenntnis der potenziellen Modellfehler abhängt. Da in der Praxis vielfach unbekannte strukturelle Abweichungen zwischen Modell und Anlage zu erwarten sind, können Stabilität und Robustheit im Vorfeld des praktischen Einsatzes nicht garantiert werden. Ein weiteres Problem des Konzeptes ist die Berücksichtigung von Stellgrößenbegrenzungen. Die Anwendbarkeit der exakten Eingangs-Ausgangs-Linearisierung beruht dagegen auf der Annahme, dass keine Stellgrößenbeschränkungen vorliegen bzw. diese nicht erreicht werden. In den letzten Jahren sind einige Vorschläge zur Lösung dieser Problematik publiziert worden, die damit im Allgemeinen verbundene nichtlineare Transformation des Eingangsraums ist bei realen Problemstellungen aber wenig praktikabel. Unter Umständen entstehen große Stellamplituden auch aus der Forderung nach linearem Eingangs-Ausgangs Verhalten selbst, da man dem System so auch in den Richtungen, in denen es von Natur aus eine geringe Verstärkung besitzt, lineares Verhalten aufzwingt. Daher muss man sich prinzipiell immer die Frage stellen, ob ein lineares Eingangs-Ausgangs Verhalten für den Prozess im betrachteten Arbeitsbereich sinnvoll und erwünscht ist, oder ob sich die im System vorhandene Nichtlinearität im Sinne der Prozessführung nicht sogar positiv nutzen lässt.

Alternativ zu den geometrischen Verfahren ist in den letzten Jahren die weit verbreitete lineare prädiktive Regelung (wie z.B. DMC) auf nichtlineare Systeme übertragen worden. Zwar gelten für die nichtlineare modellprädiktive Regelung (NMPC - Nonlinear Model Predictive Control) hinsichtlich der Robustheits- und Stabilitätsanalysen dieselben Einschränkungen wir für die geometrischen Verfahren, jedoch können bei den NMPC Verfahren Stellgrößenbeschränkungen explizit im Regelalgorithmus berücksichtigt werden. Insbesondere fiir Lastund Produktwechsel ist die Berücksichtigung von Stellgrößenbegrenzungen von großer Bedeutung, da ein schneller Wechsel in der Regel nur durch starke Stelleingriffe realisierbar ist. Im Falls von Last- und Produktwechseln kommt es zudem zur Verschiebung des Arbeitspunktes, bei der die Systemdynamik am neuen Arbeitspunkt erheblich von der am ursprünglichen abweichen kann, so dass die Performance eine linearen Reglers an einem der beiden Punkte unbefriedigend ist. Während ein nichtlinearer Regler für einen Arbeitspunkt eventuell nicht notwendig ist, kann der Einsatz einer nichtlinearen Regelung aber durchaus sinnvoll sein, um einen weiten Arbeitsbereich des Prozesses abdecken zu können. Diese Erkenntnisse haben bei der Bayer AG inzwischen zu einigen Anschlussprojekten im Bereich der NMPC geführt, bei der Produktwechselvorgänge und/oder Beschränkungen im Vordergrund stehen.

### 8.2 Teilprojekt "Periodische Prozessführung von Rührkesselreaktoren"

Im Rahmen der Untersuchungen zur periodischen Reaktionsführung von Rührkesselreaktoren wurden eine Reihe von Prozeßmodellen untersucht. Dabei wurden zunächst bewusst Modelle mit komplexer Kinetik gesucht, deren Reaktion auf periodische Anregung nicht ohne separate Simulationsrechnungen vorhergesagt werden konnte. Bei den vorliegenden Untersuchungen hat sich gezeigt, dass eine Verbesserung des Gütekriteriums bei einem periodisch angeregt betriebenen Rührkessel gegenüber einer kontinuierlichen Reaktionsführung erfolgen kann, wenn die Batch-Fahrweise für den Prozeß günstiger ist als die kontinuierliche Fahrweise im Rührkessel. Ist für solche Prozesse eine kontinuierliche Fahrweise erwünscht, läßt sich diese auch in einem Rohrreaktor bei geringer Rückvermischung realisieren.

Durch die Erweiterung der Reaktionsmodelle ist das Prozeßwissen über die untersuchten Reaktionen bei der Bayer AG vertieft, und die vorhandenen Modelle verbessert worden. Die anschließend durchgeführten Simulationsrechnungen haben mehrere Wege aufgewiesen, wie in Zukunft das Potential eines Prozesses hinsichtlich Verbesserung über periodische Anregung schneller und einfacher zu überprüfen ist. Nach einer Definition des Gütekriteriums sollte zunächst die Optimierung des stationären kontinuierlichen Betriebs als Referenzzustand vorgenommen werden. Zur weiteren Vorabanalyse des nichtlinearen Verhaltens sollten die schnelle Fourier-Transformation oder falls verfügbar das  $\pi$ -Kriterium eingesetzt werden. Ist Potenzial bezüglich einer periodischen Prozessführung vorhanden, sollten rechteckförmige sinusförmige Anregungsformen untersucht werden. und Abschließend ist die regelungstechnische Umsetzung nach den beim Projektpartner an der RWTH Aachen erarbeiteten Methoden durchzuführen. Allerdings wird derzeit bei der Bayer AG kein Prozeß gesehen, bei dem die Umsetzung einer periodischen Reaktionsführung bei kontinuierlich betriebenen Rührkesselreaktoren zu einer Verbesserung gegenüber der konventionellen stationären Fahrweise führen würde. In allen Fällen ist jedoch zu prüfen, ob der stationäre kontinuierliche Betrieb nicht bereits Verbesserungspotential allein durch eine Optimierung der stationären Fahrweise bietet und ob ggf. der Batch-Betrieb, eine Rührkesselkaskade oder ein Rohrreaktor vorzuziehen sind.

Als interessante Fragestellung bleibt festzuhalten, ob der durch periodische Prozessführung mit rechteckfömiger Anregungsform durch Variation der Anregungsperiode aufgezeigte monotone Übergang zwischen kontinuierlicher und absatzweiser Prozessführung einen allgemeinen Fall darstellt oder nicht. Denkbar ist, daß sich bei anderen nichtlinearen Systemen das Optimum nicht beim Batch-Betrieb sondern durch periodische Prozessführung erzielt wird. Diese Fragestellung muss zukünftigen Forschungsvorhaben vorbehalten bleiben.

# 9 Fortschritte bei anderen Stellen

### 9.1 Teilprojekt "Analyse und Synthese nichtlinearer Prozessführungskonzepte für Reaktivrektifikationskolonnen"

Im Bearbeitungszeitraum des Forschungsvorhabens sind einige interessante Arbeiten im Bereich der Modellierung von reaktiven Rektifikationskolonnen, der nichtlinearen Dynamik chemischer Prozesse sowie der nichtlinearen Regelung erschienen.

Einen hervorragenden Überblick über den Stand der Technik bei der Modellierung von Kolonnen zur reaktiven Rektifikation haben *Taylor und Krishna 2000* veröffentlicht. Der Fokus des Papers liegt auf der Beschreibung der Stofftransportphänomene sowie auf einer Zusammenstellung der in der Literatur veröffentlichten Anwendungen der reaktiven Rektifikation. Obwohl detailliert auf den Unterschied zwischen dem Modell der theoretischen Stufe und dem Stoffaustauschmodell eingegangen wird, findet sich weder in dem Paper noch in der zitierten Literatur ein Hinweis darauf, in welchem Falle welche Modellierungstiefe erforderlich ist. Es geht jedoch eindeutig aus der Literatur hervor, dass Effekte der nichtlinearen Dynamik wie mehrfach stationäre Zustände nicht davon abhängt, ob ein Gleichgewichts- oder ein Stoffaustauschmodell verwendet wird (siehe hierzu auch: *Jacobsen und Skogestad 1995*).

Im Bereich Analyse nichtlinearer Prozesses unter den Aspekten der Identifikation und Regelung wurden interessante Fortschritte von *Read und Ray 1998a-c* berichtet. Schwerpunkt ist hierbei der Zusammenhang zwischen der für eine Identifikation gewählten nichtlinearen Struktur des Modells und den damit beschreibbaren Typen von Bifurkationen. *Ray und Villa 2000* Untersuchung von nichtlinearen Dynamiken in Polymerisationsprozessen zeigen, dass in diesen Prozessen u.a. mehrfach stationäre Zustände und autonome periodische Schwingungen sowohl in der Simulation als auch experimentell nachgewiesen werden konnten. *Mohl u.a. 1999* wiesen simulativ und experimentell mehrfach stationäre Zustände in der Reaktivrektifikation bei der Herstellung von TAME und MTBE nach. Im Bereich der numerischen Methoden haben *Khinast und Luss 2000* ein Verfahren vorgeschlagen, mit dem Systeme partieller Differentialgleichungen effizient auf Bifurkationen untersucht werden können.

In der Praxis kommt der Entscheidung, ob sich der mit dem Entwurf und der Implementierung eines nichtlinearen Regelungskonzeptes verbundene Aufwand überhaupt lohnt, eine wesentliche Bedeutung zu. Dabei spielt die Nichtlinearität des Prozesses eine maßgebliche Rolle. Obwohl es derzeit noch keine ausgereiften Rechnerwerkzeuge zu deren Beurteilung gibt, sind in den letzten Jahren wichtige Fortschritte auf dem Gebiet der Definition und Berechnung sogenannter Nichtlinearitätsmaße gemacht worden (siehe z.B. *Helbig u.a. 2000*), die zur Lösung dieser Problemstellung beitragen können.

Auf Ebene der numerischen Prozesssimulation sind interessante Beiträge im Bereich Optimierung diskreter/kontinuierlicher Prozesse, die von Bedeutung für die Optimierung periodischer Prozesse sind, wurden Arbeiten von *Barton u.a. 1998a, Galán und Barton, 1998, Galán u.a. 1999* sowie *Avraam u.a. 1998* veröffentlicht.

Über die Regelung von reaktiven Rektifikationsprozessen sind im Bearbeitungszeitraum mehrere Arbeiten erschienen. *Kumar und Daoutidis 1997* beschreiben eine nichtlineare

Regelung einer Kolonne zur Synthese von Ethylenglycol. *Monroy-Loperena u.a. 2000* berichten über eine robuste PI-Regelung für denselben Prozess. *Fernholz und Engell 2000* stellen eine nichtlineare Regelung einer halbkontinuierlich betriebenen Reaktivrektifikationskolonne auf Basis rigoroser Modelle, *Fernholz u.a. 2000* auf Basis von Neuronalen Netz-Modellen vor.

*Kazantis und Kravaris 2000* haben ein Verfahren für die Synthese von nichtlinearen Zustandsregelung für AI-Systeme vorgestellt. Die Arbeiten von *Christofides 1998* beschäftigen sich mit der Regelung nichtlinearer Systeme mit verteilten Parametern. Darüber hinaus gab es wenig neue Aktivität im Feld der geometrischen Methoden der nichtlinearen Regelung.

Demgegenüber hat es im Berichtszeitraum starke Aktivitäten bei der nichtlinearen prädiktiven Regelung (NMPC) gegeben. Exzellente Übersichten aus theoretischer und konzeptioneller Sicht finden sich z.B. in Henson 1998, Morari und Lee 1999, Allgöwer u.a. 1999 sowie Mayne 2000. Einen sehr ausführlichen Überblick der industriellen Anwendungen von NMPC Verfahren geben *Qin und Badgwell 2000*. Die Autoren berichten über 88 bekannt gewordene Anwendungen aus dem Bereich der chemisch-verfahrenstechnischen Industrie. Dabei kann davon ausgegangen werden, dass die Zahl der tatsächlichen Anwendungen mittlerweile signifikant höher liegt. Wesentliche Grundlage für den wachsenden Erfolg des NMPC Verfahrens sind zum Einen neueste Entwicklungen im Bereich der effizienten numerischen Lösung des aus dem NMPC Algorithmus resultierenden beschränkten nichtlinearen Optimierungsproblems (siehe z.B. Biegler 2000), zum Anderen die Umsetzung von NMPC Techniken in kommerziell verfügbaren Softwarepaketen für den industriellen Einsatz. In Qin und Badgwell 2000 werden fünf dieser Softwarepakete näher beschrieben und gegenübergestellt. Diese Auflistung ist dabei keineswegs komplett, da in jüngster Sicht immer mehr Firmen Softwarepakete für den Entwurf und die Implementierung nichtlinearer modellprädiktiver Regler auf den Markt bringen.

Beispielhaft für die mittels kommerzieller NMPC Software realisierten Anwendungen seien an dieser Stelle die Regelung eines Polypropylenreaktors (Dittmar und Martin 2001), eines Kohlenstaubbrenners (Zhao u.a. 2001), einer Ammoniakfabrik (Poe und Munsif 1998) und eines nicht näher spezifizierten Polymerisationsprozesses bei der Firma ExxonMobil (Young u.a. 2001) genannt. Besonders interessant beim letztgenannten Beispiel ist, dass hier der Algorithmus ursprünglich durch das Industrieunternehmen selbst entwickelt und dann später mit Hilfe einer Softwarefirma kommerzialisiert wurde. Auch die anwendungsorientierten Arbeiten aus dem akademischen Bereich beschäftigen sich immer häufiger mit komplexen verfahrenstechnischen Prozessen. Aus leicht nachvollziehbaren Gründen ist dabei die Verifikation der Regelung meist auf Simulationsuntersuchungen beschränkt. Findeisen u.a. 2001 beschreiben die Anwendung eines fortschrittlichen NMPC Verfahrens bei einer Hochreinheits-Destillationskolonne, Fernholz und Engell 2000 die nichtlineare prädiktive Regelung einer halbkontinuierlich betriebenen Reaktivrektifikationskolonne. Rohani u.a. 1999 behandeln die Regelung von kontinuierlich betriebenen Kristallisatoren mit NMPC. Ali u.a. 1998 betrachten einen kontinuierlichen Polyethylen-Reaktor als Anwendung, Schley u.a. 2000 einen Polystyrol-Reaktor, Ahn u.a. 1999 und auch Tenny u.a. 2001 behandeln die Polymerisation von Methylmethacrylat. Doyle 1998 beschreibt eine Anwendung aus der Papierherstellung. Man erkennt, dass derzeit im Bereich der chemischen Prozesse ein Schwerpunkt der Anwendungen der NMPC Technologie bei der Regelung von kontinuierlich betriebenen Polymerisationsreaktoren liegt.

Um den Einsatz von NMPC in der industriellen Praxis weiter voranzutreiben, ist die Entwicklung und Weiterentwicklung von Verfahren zur datengetriebenen Modellierung für nichtlineare dynamische Prozesse ein zentraler Punkt zukünftiger Forschungsarbeiten. *Lee 2000, Jørgensen und Lee 2001* und *Backx 2001* beschreiben detailliert den Stand des Wissens und die vordringlichen Problemstellungen auf diesem Gebiet. Ein weiterer wesentlicher Punkt aus Sicht der industriellen Anwender ist das sogenannte "Controller Performance Monitoring" und dessen Einsatz bei Wartung und Fehlerdiagnose modellprädiktiver Regelungen. Neueste Entwicklungen und Herausforderungen auf diesem Gebiet werden z.B. in *Shah u.a. 2001* dargelegt. Von zentraler Bedeutung wird zukünftig auch die verstärkte Anwendung von NMPC Verfahren bei Batch-Prozessen sein. Diese gewinnen nicht nur immer größere Bedeutung in der industriellen Praxis, sondern bieten sich aufgrund der durch das Fehlen eines stationären Betriebspunktes im Allgemeinen vorhandenen ausgeprägten Nichtlinearität geradezu für den Einsatz von NMPC Strategien an.

# 9.2 Teilprojekt "Periodische Prozessführung von Rührkesselreaktoren"

Eine Veröffentlichung im Bereich der Anwendung periodischer Prozessführung zur Integration von Reaktion, Stofftrennung und Wärmeaustausch erfolgte durch *Yongsunthon und Alpay 1998*.

Parulekar behandelt in zwei umfangreichen Veröffentlichungen die periodische Führung kontinuierlicher Bioprozesse für die Variation einzelner (Parulekar 1998) und mehrerer Eingangsgrößen (*Parulekar 2000*). Hierbei wird das  $\pi$ -Kriterium (nach Sterman und Ydstie 1990) zur Untersuchung der Auswirkung periodischer Anregung eingesetzt. Als Modellsystem wird jedoch ein einfaches unstrukturiertes Wachstumsmodell mit akademischem Charakter verwendet. Dabei werden unterschiedliche Ansätze für die spezifische Wachstumsrate verglichen. Die erzielten Verbesserungen für die Variation einzelner Eingangsgrößen (Verdünnungsrate bzw. die Konzentration des limitierenden Substrates) sind geringer als jene, die mit der Variation beider Eingangsgrößen gleichzeitig der Schwierigkeit der Parametrierung erzielt werden können. Aufgrund und Extrapolierbarkeit bioverfahrenstechnischer Modelle ist eine experimentelle Verifikation der vorgeschlagenen Verbesserungen wünschenswert. Ein Vergleich mit einer Batch-Prozessführung wird bei Parulekar nicht vorgenommen.

*Rohde et al. 2000* gehen auf Berechnungen und Experimente im Labormaßstab zur periodischen Anregung der Dihydroxybenzolsynthese durch pulsartige Zugabe des Reaktanden  $H_2O_2$  ein. Obwohl die Untersuchungen nicht in allen Punkten nachvollzogen werden können, ist der Ansatz hervorzuheben, theoretisch abgeleitete optimale periodische Anregungsformen im Experiment nachzuvollziehen. Darüber hinaus verwendet der Autor ebenfalls eine pulsartige Anregungsform, die der in diesem Bericht beschriebenen rechteckförmigen Anregung interessanterweise ähnlich ist. Weitere Veröffentlichungen des Autors zu diesem Thema sind noch nicht bekannt geworden.

# 10 Erfolgte und geplante Veröffentlichungen

#### Geplante Veröffentlichungen:

- A. Cruse, W. Marquardt, A. Schwarz, C. Willems. Periodic Operation of Selected Chemical Processes – a Critical Evaluation, in Vorbereitung, 2001.
- M. Mangold, K.D. Mohl, A. Kienle, E.D. Gilles, G. Fernholz. Nonlinear Analysis of gPROMS Models via a CAPE ESO interface. Eingereicht f
  ür ESCAPE12, Den Haag, Niederlande, 26.-29.05.2002.
- S. Grüner, K.-D. Mohl, A. Kienle, E.-D. Gilles, G. Fernholz, M. Friedrich. Nonlinear Control of an Industrial Reactive Distillation Column. Eigereicht für Control Engineering Practice.

#### Erfolgte Veröffentlichungen:

- S. Grüner, K.-D. Mohl, A. Kienle, E.-D. Gilles, G. Fernholz, M. Friedrich. Nonlinear Control of an Industrial Reactive Distillation Column. Preprints of the DYCOPS-6 6<sup>th</sup> IFAC Symposium on Dynamics and Control of Process Systems, 3-6.06.2001, Cheju Island, Korea. S. 125-130, 2001.
- G. Fernholz, M. Friedrich, S. Grüner, K.-D. Mohl, A. Kienle, E.-D. Gilles. Linear MIMO Controller Design for an Industrial Reactive Distillation Column. Preprints of the DYCOPS-6 6<sup>th</sup> IFAC Symposium on Dynamics and Control of Process Systems, 3-6.06.2001, Cheju Island, Korea. S. 137-142, 2001.
- S. Grüner, K.-D. Mohl, A. Kienle, E.-D. Gilles, G. Fernholz, M. Friedrich. Nichtlineare Regelung einer industriellen reaktiven Rektifikationskolonne. Regelungstechnisches Kolloquium Boppard, 12.-14.02.2001, Boppard.

# 11 Literaturhinweise

- Ahn, S.-M., Park, M.-J., Rhee, H.-K.: Extended Kalman Filter-Based Nonlinear Model Predictive Control for a Continuous MMA Polymerization Reactor. Ind. Eng. Chem. Res., 38, 3942-3949, 1999.
- Ali, E.M., Abasaeed, A.E., Al-Zahrani, S.M.: Optimization and Control of Industrial Gas-Phase Ethylene Polymerization Reactors. Ind. Eng. Chem. Res., 37, 3414-3423, 1998.
- Allgöwer, F., Badgwell, T.A., Qin, J.S., Rawlings, J.B., Wright, S.J.: Nonlinear Predictive Control and Moving Horizon Estimation – An Introductory Overview. In: P.M. Frank (ed.): Advances in Control, S. 391-449, Springer, 1999.
- Avraam, M.P., Shah, N., Pantelides, C.C.: Modelling and optimisation of general hybrid systems in the continuous time domain. Comp. Chem. Eng., 22(S), S221-S228, 1998.
- Allgöwer, F.: Näherungsweise Ein-/Ausgangs-Linearisierung nichtlinearer Systeme. Dissertation, Universität Stuttgart, VDI-Verlag, Düsseldorf, 1996.

- Backx, T.C.: Model Requirements for Next Generation Integrated MPC and Dynamic Optimization. Preprints of Chemical Process Control CPC-6, 61-79, Tucson, Arizona, 2001.
- Barton, P.I., Allgor, R.J., Feehery, W.F., Galán, S.: Dynamic optimization in a discontinuous world. Ind. Eng. Chem. Res., 37(3), 966-981, 1998.
- Bequette, B.W.: Nonlinear control of chemical processes: A review. Ind. Eng. Chem. Res., 30, 1391-1413, 1991.
- Biegler, L.T.: Efficient Solution of Dynamic Optimization and NMPC Problems. In: F. Allgöwer, A. Zheng (eds.): Nonlinear Model Predictive Control, S. 291-244, Birkhäuser, 2000.
- Christofides, P.: Robust control of parabolic PDE systems. Chem. Eng. Sci., 53(16), 2949-2965, 1998.
- Dittmar, R., Martin, G.D.: Nichtlineare modellgestützte prädiktive Regelung eines industriellen Polypropylenreaktors unter Verwendung künstlicher neuronaler Netze. atp – Automatisierungstechnische Praxis, 43(3), 2-11, 2001.
- Doyle, F.J.: Nonlinear MPC with large scale fundamental models: Application to a continuous Kamyr Digester. Paper presented at the Workshop on Nonlinear Model Predictive Control, Ascona, Schweiz, 3-5.06.1998.
- Engell, S.: Compensator design by frequency-weighted approximation. Proceedings of the IEE International Conference on Control, CONTROL 88, 253-358. (London: The Institution of Electrical Engineers, Publication No. 285), 1988.
- Engell, S. (Hrsg.): Entwurf nichtlinearer Regelungen. R. Oldenbourgh Verlag München, 1995.
- Engell, S., Müller, R.: Multivariable controller design by frequency response approximation. Proceedings of the 2<sup>nd</sup> European Control Conference ECC2, Groningen, 1715-1520, 1993.
- Fernholz, G.: Prozeßführung einer halbkontinuierlich betrieben Kolonne zur Reaktivrektifikation. Dissertation Universität Dortmund, Shaker Verlag, Aachen, 2000.
- Fernholz, G., Rossmann, V., Engell, S., Bredehöft, J.-P.: System identification using radial basis function nets for nonlinear model predictive control of a semi-batch reactive distillation column. Proc. IEEE Conference Control 2000, Cambridge, 2000.
- Fernholz, G., Engell, S.: Nonlinear model predictive control of a semi-batch reactive distillation process. Proc. Process and Instrumentation 2000, Glasgow, 426-431, 2000.
- Findeisen, R., Allgöwer, F., Diehl, M., Bock, H.G., Schlöder, P., Nagy, Z.: Efficient Nonlinear Model Predictive Control. Preprints of Chemical Process Control CPC-6, 454-460, Tucson, Arizona, 2001.
- Galán, S., Barton, P.I.: Dynamic optimization of hybrid systems. Comp. Chem. Eng., 22(S), S183-S190, 1998.
- Galán, S., Feehery, W.F., Barton, P.I.: Parametric sensitivity functions for hybrid discrete/continuous systems. Applied Numerical Mathematics, Vol31, 1, 17-47, 1999.
- Gilles, E.D, Storz, M., Friedrich, M.: Asymptotisch exakte Linearisierung des Ein-/Ausgangsverhaltens nichtlinearer Systeme. Automatisierungstechnik 42, 135-148.

- Golubitsky, M., Schaeffer, D.G.: Singularities and Groups in Bifurcation Theory, Volume I. Springer Verlag, New York, 1985.
- Goodwin, G.C., Payne, R.L.: Dynamic System Identification: Experiment Design and Data Analysis. Academic Press, New York, 1977.
- Helbig, A., Marquardt, W., Allgöwer, F.: Nonlinearity measures: definition, computation and applications. Journal of Process Control, 10, 113-123, 2000.
- Henson, M.A.: Nonlinear model predictive control: current status and future directions. Computers and Chemical Engineering, 23, 187-202, 1998.
- Jacobsen, E., Skogestad, S.: Multiple steady states and instability in distillation. Implications for operation and control. Ind. Eng. Chem. Res., 34, 4395-4405, 1995.
- Jørgensen, S.B., Lee, J.H.: Recent Advances and Challenges in Process Identification. Preprints of Chemical Process Control CPC-6, Suppl., Tucson, Arizona, 2001.
- Khinast, J.G., Luss, D.: Efficient bifurcation analysis of periodically-forced distributed parameter systems. Comp. Chem. Engng., 24, 139-152, 2000.
- Kienle, A., Lauschke, G., Gehrke, V., Gilles, E.D.: On the dynamics of the circulation loop reactor numerical methods and analysis. Chem. Eng. Sci. 50, 2361-2375, 1995.
- Klatt, K.-U.: Nichtlineare Regelung chemischer Reaktoren mittels exakter Linearisierung und Gain-Scheduling. Dissertation Universität Dortmund, Shaker Verlag, Aachen, 1995.
- Kazantis, N., Kravaris, C.: Synthesis of state feedback regulators for nonlinear processes. Chem. Eng. Sci., 55, 3437-3449, 2000.
- Kravaris, C, Kantor, J.C.: Geometric methods for nonlinear process control. Part I an II. Ind. Eng. Chem. Res., 29, 2295-2324.
- Kumar, A., Daoutidis, P.: Nonlinear control of a high-purity ethylene glycol reactive distillation column. Proceedings of the IFAC-ADCHEM, Banff, Canada, 371-376, 1997.
- Lee, J.H.: Modeling and Identification for Nonlinear Model Predictive Control: Requirements, Current Status and Future Research Needs. In: F. Allgöwer, A. Zheng (eds.): Nonlinear Model Predictive Control, S. 269-294, Birkhäuser, 2000.
- Mayne, D.: Nonlinear Model Predictive Control: Challenges and Opportunities. In: F. Allgöwer, A. Zheng (eds.): Nonlinear Model Predictive Control, S. 23-44, Birkhäuser, 2000.
- Mohl, K.-D., Kienle, A., Gilles, E.-D., Rapmund, P., Sundmacher, K., Hoffmann, U.: Steadystate multiplicities in reactive distillation columns for the production of fuel ethers MTBE and TAME: theoretical analysis and experimental verification. Chem. Eng. Sci., 54, 1029-1043, 1999.
- Monroy-Loperena, R., Perez-Cisneros E., Alvarez-Ramirez, J.: A robust PI control configuration for a high-purity ethylene glycol reactive distillation column. Chem. Eng. Sci., 55, 4925-4937, 2000.
- Moore, C.: In: Practical distillation control (Hrsg. W.L. Luyben). Van Nostrand Reinhold, New York. 140-191, 1992.
- Morari, M., Lee, J.H.: Model predictive control: past, present and future. Computers and Chemical Engineering, 23, 667-682, 1999.

- Müller, R.: Entwurf von Mehrgrößenreglern durch Frequenzgang-Approximation. Dissertation Universität Dortmund, Shaker Verlag, Aachen, 1996.
- Oppenheim, A.V.; Schafer, R.W., Buck, J.R.: Discrete Time Signal Processing, Prentice Hall, 1999.
- Parulekar, S. J.: Analysis of forced operations of continuous bioprocesses single input variations. Chemical Engineering Science, Vol. 53, 2481-2502, 1998.
- Parulekar, S. J.: Analysis of forced operations of continuous bioprocesses: multiple input variations. Chemical Engineering Science, Vol. 55, 513-533, 2000.
- Poe, W., Munsif, H.: Benefits of advanced process control and economic optimization to petrochemical processes. Hydrocarbon Processing's Process Optimization Conference and Exhibition, 1998.
- Qin, S.J., Badgwell, T.A.: An Overview of Nonlinear Model Predictive Control Applications. In: F. Allgöwer, A. Zheng (eds.): Nonlinear Model Predictive Control, S. 369-392, Birkhäuser, 2000.
- Ray, W.H., Villa, M.: Nonlinear dynamics found in polymerization processes a review. Chem. Eng. Sci., 55, 275-290, 2000.
- Read, N.K., Ray, W.H.: Application of nonlinear dynamics analysis in the identification and control of nonlinear systems-I. Simple dynamics. J. Proc. Cont., Vol. 8, No. 1, 1-15, 1998a.
- Read, N.K., Ray, W.H.: Application of nonlinear dynamics analysis to the identification and control of nonlinear systems-II. More complex dynamics. J. Proc. Cont., Vol. 8, No. 1, 17-34, 1998b.
- Read, N.K., Ray, W.H.: Application of nonlinear dynamics analysis to the identification and control of nonlinear systems-III. n-dimensional systems. J. Proc. Cont., Vol. 8, No. 1, 35-46, 1998c.
- Rohani, S., Haeri, M., Wood, H.C.: Modeling and control of a continuous crystallization process, Part 2. Model predictive control. Computers and Chemical Engineering, 23, 279-286, 1999.
- Rohde, B., Brunßen, D., Wirth, F., Schulz-Ekloff, G., Thiele, G.: Selektivitätsoptimierung der Dihydroxybenzolsynthese über H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>-Konzentrationsprofile im Reaktor. Posterbeitrag beim 22. Kolloquium der Automatisierungstechnik, Salzhausen, 2000.
- Sanathanan, C.K., Koernen, J.: Transfer function synthesis as a ratio of two complex polynomials. IEEE Transactions on Automatic Control, 8, 56-58, 1963.
- Schley, M., Prasad, V., Russo, L.P., Bequette, B.W.: Nonlinear Model Predictive Control of a Styrene Polymerization Reactor. In: F. Allgöwer, A. Zheng (eds.): Nonlinear Model Predictive Control, S. 403-418, Birkhäuser, 2000.
- Schwarz, A.: Modellreduktion und Optimal Experimental Design für ein Modell der Glykolyse der Hefezelle Saccharomyces cerevisiae. Studienarbeit am Institut für Bioverfahrenstechnik der Universität Stuttgart, 1993.
- Seydel, R.: Nonlinear Computation. In: Proceedings 4<sup>th</sup> International Workshop on Cellular Neural Networks and Applications, and Nonlinear Dynamics of Electronic Systems, Sevilla, 1996.

- Shah, S.L., Patwardhan, R., Huang, B.: Multivariate Controller Performance Analysis: Methods, Applications and Challenges. Preprints of Chemical Process Control CPC-6, 187-219, Tucson, Arizona, 2001.
- Skogestadt, S., Postlethwaite, I.: Multivariable feedback control. John Wiley & Sons Ltd, Chichester, 1996.
- Stankiewicz, A., Kuczynski, M.: An industrial view on the dynamic operation of chemical converters, Chemical Engineering and processing, 34, 367-377, 1995.
- Sterman, L. E., Ydstie, B. E.: The steady-state process with periodic perturbations. Chemical Engineering Science, Vol. 45, 721-736, 1990.
- Sterman, L. E., Ydstie, B. E.: Unsteady-state multivariable analysis of periodically perturbed systems. Chemical Engineering Science, Vol. 45, 737-749, 1990.
- Taylor, R., Krishna, R.: Modelling reactive distillation. Review. Chem. Eng. Sci., 55, 5183-5229, 2000.
- Tenny, M.J., Rawlings, J.B., Bindlish, R.: Feasible real-time nonlinear model predictive control. Preprints of Chemical Process Control CPC-6, 439-443, Tucson, Arizona, 2001.
- Young, R.E., Bartusiak, R.D., Fontaine, R.W.: Evolution of an Industrial Nonlinear Model Predictive Controller. Preprints of Chemical Process Control CPC-6, 399-410, Tucson, Arizona, 2001.
- Youngsunthon, I., Alpay, E.: Design and optimimisation of temperature cycled adsorptive reactors. Comp. Chem. Eng. 22(S), S733-S736, 1998.
- Zhao, H., Guiver, J., Neelakantan, R., Biegler, L.T.: A nonlinear industrial model predictive controller using integrated PLS and neural net state-space model. Control Engineering Practice, 9, 125-133, 2001.