

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	Inhaltsverzeichnis	2
2	Aufgabenstellung	4
3	 Projektdurchführung	4
4	 Ausgangssituation und Stand der Technik	5
5	 Zusammenarbeit 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 Prozesssimulator	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
6.5.2	Konzeption der Schnittstelle	10
6.5.3	Benutzeraktionen	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
6.7.3	Ausgangspunkt für den Entwurf der linearen Regelung	18
6.7.4	Ergebnisse des linearen Reglerentwurfes	23
6.7.5	Reglerperformance in der nichtlinearen Simulation	32
6.7.6	Zusammenfassung	35
6.8	Entwurf einer nichtlinearen Regelung mit Zustandsbeobachter für den Prozess	36
6.9	Vergleichende Bewertung beider Regelungen hinsichtlich der Regelgüte, Implementierbarkeit und Wirtschaftlichkeit	38
7	 Ergebnisse Teilprojekt „Periodische Prozessführung von Rührkesselreaktoren“	39
7.1	Identifikation geeigneter Modelle von Beispielprozessen bei der Bayer AG	39

7.1.1	Beispiel 1	39
7.1.2	Beispiel 2	41
7.1.3	Beispiel 3	42
7.2	Modellrechnungen zur Optimierung der Prozesse für stationären kontinuierlichen Betrieb	43
7.3	Periodische Anregung des Prozesses im Modell und Vergleich mit konventioneller Prozessfahrweise	44
7.4	Regelungstechnisches Konzept zur Umsetzung der periodischen Prozessführung	48
7.5	Numerische Vorabanalyse des potenziellen nichtlinearen Charakters eines dynamischen Systems	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 Rührkesselreaktoren“	53
9	Fortschritte bei anderen Stellen	55
9.1	Teilprojekt „Analyse und Synthese nichtlinearer Prozessführungskonzepte für Reaktivrektifikationskolonnen“	55
9.2	Teilprojekt „Periodische Prozessführung von Rührkesselreaktoren“	57
10	Erfolge 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 Simulationsrechnungen 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 Beispielmotellen 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 π -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