



MODELLBASIERTE VERSUCHSPLANUNG IN DER CHEMISCHEN VERFAHRENSTECHNIK

In der chemischen Verfahrenstechnik werden in Versuchen Daten erhoben, um physikalisch motivierte Modelle zu kalibrieren. Diese Versuche sind immer mit Zeit- und Kostenaufwand verbunden. Daher geht es in ihrer Planung darum, aus möglichst wenigen Experimenten möglichst verlässliche Modelle abzuleiten. In einem Kooperationsprojekt mit der BASF entwickeln und implementieren wir Methoden, die dabei unterstützen.

Die Verlässlichkeit von Modellkalibrierungen wird auf zweierlei Art beeinflusst: Einerseits sind die Fehlerbalken der geschätzten Parameter, aber auch die Vorhersagefehler des Modells direkt proportional zur Messgenauigkeit in den Versuchen. Mit anderen Worten: Umso genauer die Sensorik, umso verlässlicher die Modellvorhersage.

Um erfolgreich zu kalibrieren ist es andererseits entscheidend, Korrelationen in der Sensitivität der Modelle zu berücksichtigen – besonders bezüglich der Modellparameter an den Messpunkten. Dies wird im Folgenden anhand eines Beispiels anschaulich gemacht.

Katalysator: Alter versus Temperatur

Chemische Reaktionen laufen im Allgemeinen bei höheren Temperaturen schneller ab als bei tieferen – das ist der Grund, warum Lebensmittel zur Verlängerung ihrer Haltbarkeit gekühlt werden. In chemischen Reaktoren werden häufig Katalysatoren eingesetzt, die Reaktionen beschleunigen. Diese Katalysatoren altern, ihre Wirkung nimmt also mit der Zeit ab. Daher erhöht man mit zunehmendem Katalysatoralter die Reaktionstemperatur, um eine gleichbleibende Qualität des Reaktionsprodukts zu gewährleisten. Katalysatoralter und Reaktionstemperatur stehen auf diese Weise in enger Beziehung zueinander. Es ist nicht möglich, die Effekte von Temperatur und Katalysatoralter auf das Endprodukt separat zu berechnen. Die Versuchsplanung schlägt vor, den Reaktor einmal bei tiefen Temperaturen und hohem Katalysatoralter und einmal bei hoher Temperatur und geringem Katalysatoralter zu fahren. Mit diesen zwei zusätzlichen Betriebsbedingungen können die Effekte separiert und unabhängig quantifiziert werden.

Im Kooperationsprojekt mit der BASF geht es darum, die beschriebenen Konzepte auf komplexe Modelle von Pilotanlagen zu übertragen. Diese werden dann anhand ihrer Sensitivitäten auf Modellparameter kalibriert, Unsicherheiten abgeschätzt und die entsprechenden Versuche geplant. Dazu lösen wir große nichtlineare Optimierungsprobleme und machen deren Ergebnisse auf interaktiven Nutzeroberflächen nutzbar.

1 Links: Schema eines Kovarianzellipsoiden zur Visualisierung von Konfidenzbereichen von angepassten Modellparametern

Mitte: Schema einer Miniplant mit einem Rohrreaktor und zwei Destillationskolonnen

Rechts: Statistischer Versuchsplan für ein lineares Modell mit drei Einflussgrößen

