Statische Prozessoptimierung/ Prozessoptimierung 1

Kapitel 5: Eindimensionale Nichtlineare Optimierung

Prof. Dr.-Ing. habil. Pu Li

Fachgebiet Prozessoptimierung

Beispiel: Optimierung des Rohrleitungsdurchmessers für den Transport einer Flüssigkeit

Investitions- und Betriebskosten für eine Rohrleitung:

$$C_{Investition} = c_1 D^{1,3} L$$

$$C_{Betrieb} = \frac{c_2 \, \dot{m} \, \Delta p}{\rho \, \eta}$$

$c_1,\ c_2$	Kostenfaktoren	D	Durchmesser
L	Gesamtlänge	$\dot{m}$	Massenfluss in der Rohrleitung
Δp	Druckverlust	ρ	Dichte der Flüssigkeit
η	Pumpenwirkungsgrad		

Zielfunktion:

$$\min_{D} \quad \left\{ C_{Investition} + C_{Betrieb} = c_1 D^{1,3} L + \frac{c_2 \dot{m}\, \Delta\, p}{\rho\, \eta} \right\}$$

wobei

$$\Delta p = \frac{2 \xi \rho\, \nu^2 L}{D}$$

$$\dot{m} = \rho \left(\frac{\pi D^2}{4} \right) \nu$$

$$\xi = 0,046\, R_e^{-0,2} = 0,046 \left(\frac{D\, \nu\, \rho}{\mu} \right)^{-0,2}$$

ξ Widerstandsbeiwert

ν Fluidgeschwindigkeit

μ Viskosität

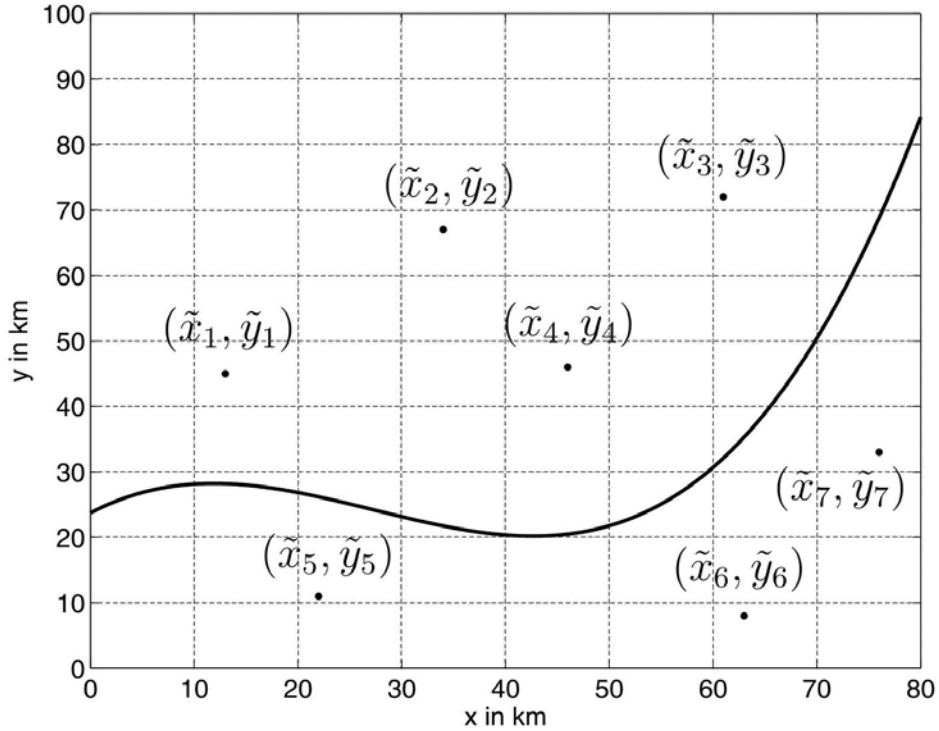
Die Parameter: $c_1,\ c_2,\ \rho,\ \mu,\ \eta,\ L,\ \dot{m}$

Die Variable: D

Optimale Auswahl eines Standortes für den Transport von Rostoffen

Ein Zentrum wird an einer Eisenbahnlinie aufgebaut, um dort die Rohstoffe zu 7 Unternehmen zu verteilen. Der Standort des Zentrums ist auszuwählen, damit die Kosten für den zukünftigen Transport minimiert werden können.

Lageplan mit dem Trassenverlauf und den Standorten der Unternehmen



Standorte der Unternehmen im Lageplan

j	1	2	3	4	5	6	7
$\tilde{x}_j$	11,8	33,5	45,4	60,2	21,2	62,8	76,5
$\tilde{y}_j$	45,3	67,9	46,1	71,3	10,8	7,9	33,2

Funktion des Verlaufs der Trasse im Lageplan

$$y = a + bx + cx^2 + dx^3$$

Die Parameter $a,\ b,\ c,\ d$ müssen zunächst bestimmt werden. Man misst M Punkte an der Trasse $(\hat{x}_i,\ \hat{y}_i),\ i = 1, \cdots, M$ und minimiert die quadratische Abweichung

$$\min_{\{a,b,c,d,\}} \left\{ \sum_{i=1}^{M} (y_i - \hat{y}_i)^2 = \sum_{i=1}^{M} (a + bx_i + cx_i^2 + dx_i^3 - \hat{y}_i)^2 \right\} .$$

Man erhält:

$$a = 23,722,\ b = 0,836,\ c = -0,045,\ d = 0,00055$$

Nun definiert man die Zielfunktion für die Auswahl des Standortes für das Zentrum, und zwar die Minimierung der Summe der Abstände zwischen dem zu wählenden Standort des Zentrums $(x,\ y)$ und dem jedes Unternehmens, $(\tilde{x}_j,\ \tilde{y}_j),\ j = 1, \cdots, 7$:

$$\min_{x,\,y} \sum_{j=1}^{7} \sqrt{(x - \tilde{x}_j)^2 + (y - \tilde{y}_j)^2}$$

In dieser Zielfunktion gibt es noch zwei Entscheidungsvariablen. Da der Standort an der Trasse sein muss, dann ist die Zielfunktion

$$\min_{x} \sum_{j=1}^{7} \sqrt{(x - \tilde{x}_j)^2 + (a + bx + cx^2 + dx^3 - \tilde{y}_j)^2}$$

Dies ist ein Optimierungsproblem mit der einzigen Entscheidungs-variablen x . Es besteht die Beschränkung der Variable $0 \leq x \leq 80$. Nach der Lösung des Problems erhält man den optimalen Wert x^* und dann den Wert y^* . Somit wird der optimale Standort des Zentrums festgestellt.

Allgemeine Form des Problems:

$$\min_x \quad f(x)$$

mit $\quad x_{min} \leq x \leq x_{max}$

Das Newton-Verfahren:

Die Lösung x^* ist ein lokales Minimum, wenn

$$\left.\frac{df}{dx}\right|_{x^*} = 0 \quad \text{und} \quad \left.\frac{d^2 f}{dx^2}\right|_{x^*} > 0$$

Die Gradientenfunktion:

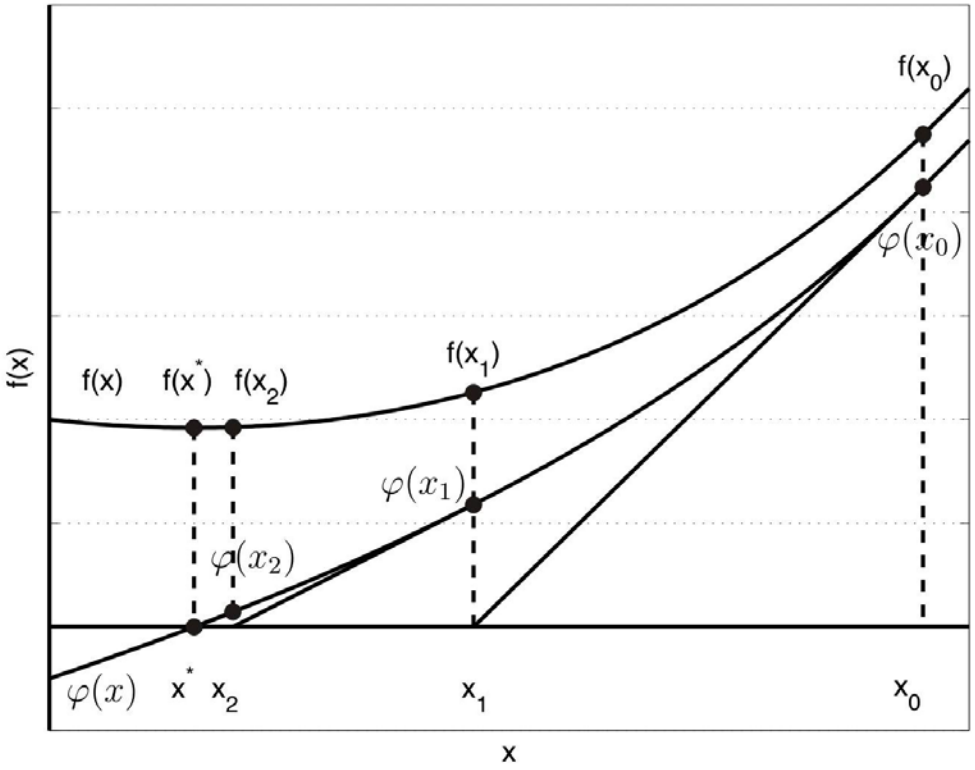
$$\frac{df}{dx} = \varphi(x) = 0$$

Mit einem Schätzwert x_0:

$$\varphi(x_0) + \left.\frac{d\varphi}{dx}\right|_{x_0} \Delta x_0 = 0$$

dadurch

$$\Delta x_0 = -\left.\frac{d\varphi}{dx}\right|_{x_0}^{-1} \varphi(x_0)$$



und dem neuen Punkt

$$x_1 = x_0 + \Delta x_0$$

Die Abbruchbedingungen:

$$|\varphi(x_N)| \leq \varepsilon_1 \quad \text{oder} \quad \left|\frac{x_N - x_{N-1}}{x_N}\right| \leq \varepsilon_2$$

Ist die Zielfunktion konvex, $\frac{d\varphi}{dx} = \frac{d^2 f}{dx^2} > 0$, dann wird $\Delta x_0 > 0$,

wenn $\varphi(x_0) = \left.\frac{df}{dx}\right|_{x_0} < 0$. Es muss $\Delta f = \left.\frac{df}{dx}\right|_{x_0} \Delta x_0 < 0$,

also wird die Zielfunktion der Suchrichtung abnehmen. Wenn beim

Schätzpunkt $\varphi(x_0) = \left.\frac{df}{dx}\right|_{x_0} > 0$, dann muss $\Delta x_0 < 0$.

Die Änderung der Zielfunktion ist wieder $\Delta f = \left.\frac{df}{dx}\right|_{x_0} \Delta x_0 < 0$.

Also wird mit dem Newton-Verfahren der Wert einer konvexen Zielfunktion immer abnehmen. Das einzige Minimum wird herausgefunden, egal wo der Schätzpunkt liegt. Ist die Zielfunktion konkav, erhält man mit diesem Verfahren das Maximum.

Vorteil: Konvergenzgeschwindigkeit ist quadratisch.

Nachteile:

a) Die Lösung hängt von dem Schätzwert ab, wenn die Zielfunktion nichtkonvex (nichtkonkav) ist.

b) Der Wert der Zielfunktion wird während der Lösung nicht ausgewertet. Man erhält einen Maximumpunkt, wenn die Funktion konkav ist. Das heißt, es ist unmöglich, bei einer konkaven Zielfunktion das Minimum herauszufinden.

c) Wenn bei einer Iteration $\left.\frac{d^2 f}{dx^2}\right|_{x_k} = 0$, dann wird die Berechnung abgebrochen.

d) In vielen Fällen ist die Berechnung der ersten und zweiten Ableitung der Zielfunktion nicht einfach.

e) Die Grenze des Bereiches wird nicht betrachtet.

Beispiel:

$$\max_x \ \{f(x) = x \sin x\}$$

mit $\quad 0 \leq x \leq 3,5$

Lösung mit dem Newton-Verfahren:

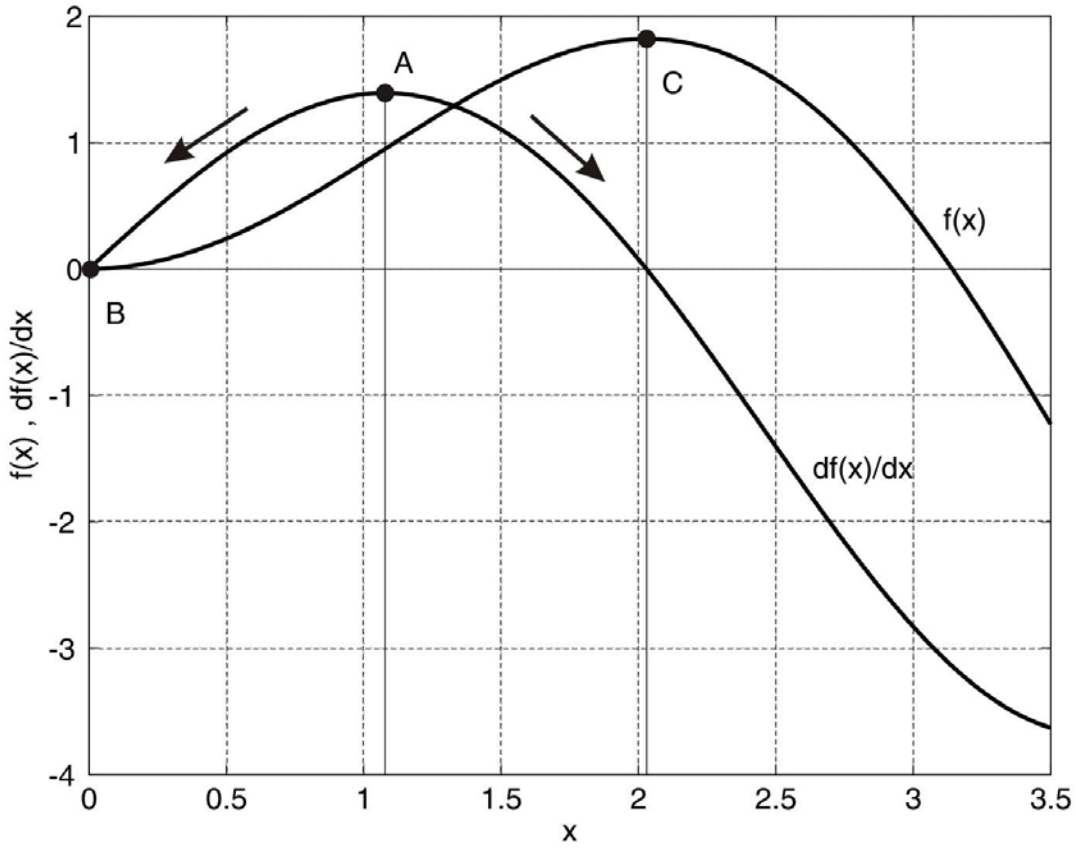
Wenn der Schätzwert $x_0 = 1,5$ ist, erhält man nach drei Iterationen

den Punkt $x^* = 2,0228$, $f^* = 1,8197$ und $\left.\dfrac{d^2 f}{dx^2}\right|_{x^*} = -2,6932$

der einen gewünschten Maximumpunkt darstellt.
Mit dem Schätzwert $x_0 = 0,5$ ergibt sich nach der ersten Iteration $x_1 = -0,1059$, bei welchem die Beschränkung der Variable $x \geq 0$ verletzt ist. Geht man zu dieser Grenze zurück, erhält man $x^* = 0$,

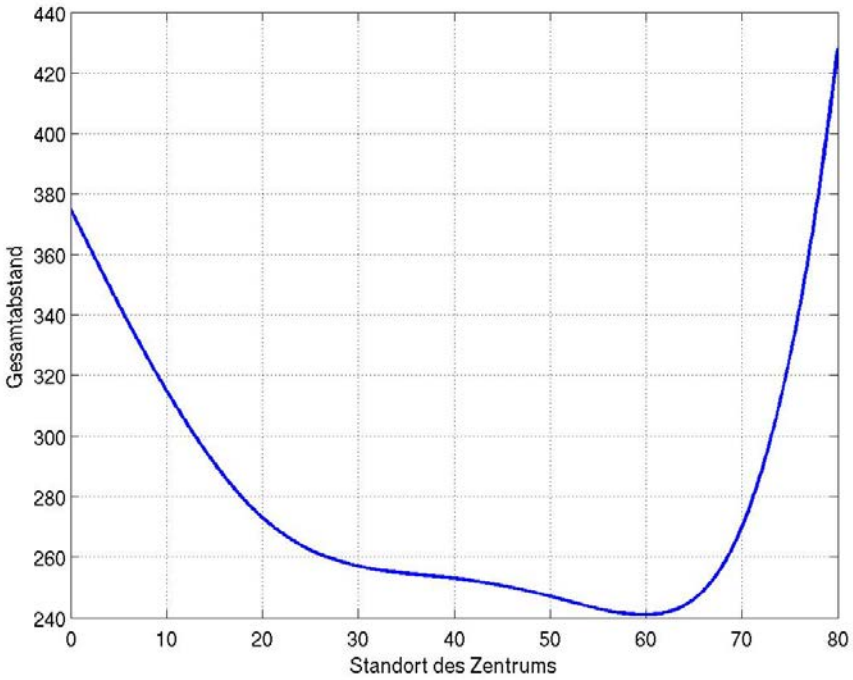
$f^* = 0$, und $\left.\dfrac{d^2 f}{dx^2}\right|_{x^*} = 2$. Also hat die Zielfunktion an dieser Stelle

einen Minimumpunkt.

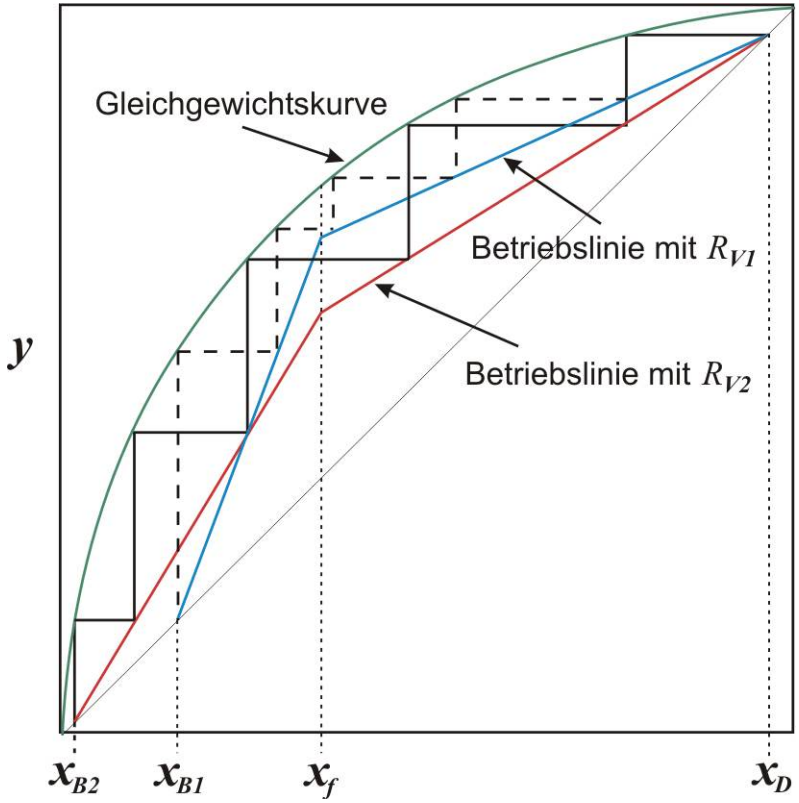


Wäre die Optimierungsaufgabe als Minimierung definiert, könnte mit dem Newton-Verfahren der erwünschte Minimumpunkt $x^* = 3,5$ nicht gefunden werden.

Gesamtabstand in Abhängigkeit von dem auszuwählenden Standort

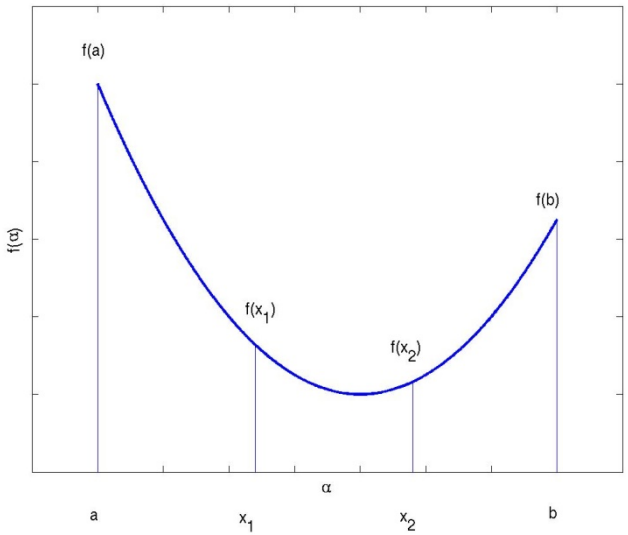


McCable-Thiele-Diagramm mit verschiedenem Rücklaufverhältnis



Der goldene Schnitt:

Diese Methode ist geeignet für Probleme, die im betrachteten Bereich nur eine Lösung besitzt.



Im Intervall $[a,\, b]$ werden Schätzpunkte x_1 und x_2 $(x_1 < x_2)$ ausgewählt, dann ergibt sich:

Wenn $f(x_1) > f(x_2),$ dann $x^* \in [x_1,\, b]$

Wenn $f(x_1) < f(x_2),$ dann $x^* \in [a,\, x_2]$

Das neue Intervall wird kleiner als das alte. Man sucht weiter bis das Intervall kleiner als ε ist.

Die Lösung:

- Die Beziehung zwischen dem alten Intervall und dem neuen:

$$b^{(k+1)} - a^{(k+1)} = \alpha(b^{(k)} - a^{(k)}), \quad 0 < \alpha < 1 \qquad (1)$$

- Die Länge des neuen Intervalls:

entweder
$$b^{(k+1)} - a^{(k+1)} = b^{(k)} - x_1^{(k)}$$
$$x_1^{(k)} = b^{(k)} - \alpha(b^{(k)} - a^{(k)}) \qquad (2)$$

oder
$$b^{(k+1)} - a^{(k+1)} = x_2^{(k)} - a^{(k)}$$
$$x_2^{(k)} = a^{(k)} + \alpha(b^{(k)} - a^{(k)}) \qquad (3)$$

- Wenn $x_1^{(k)}$ die Grenze des neuen Intervalls ist, wird $x_2^{(k)}$ als Schätzpunkt $x_1^{(k+1)}$ im neuen Intervall genommen.

Dies bedeutet:

$$x_1^{(k)} = a^{(k+1)} \tag{4}$$

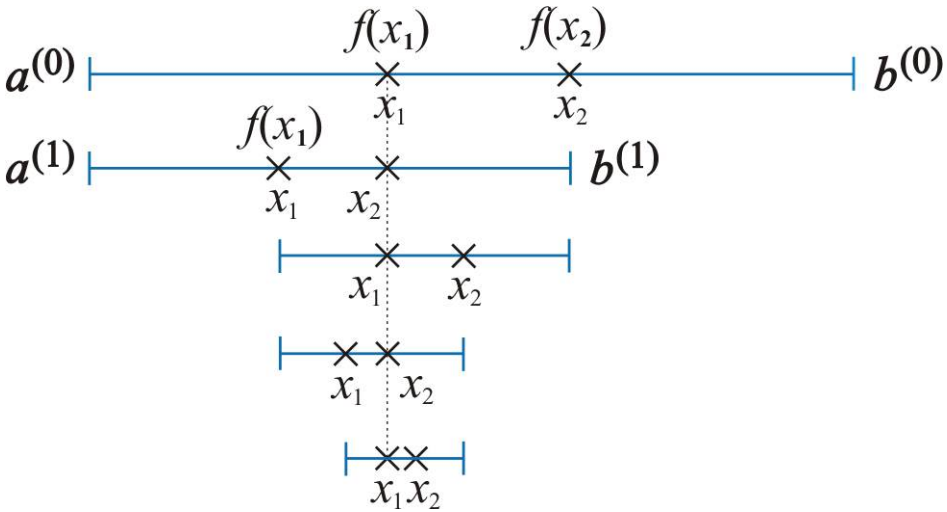
$$b^{(k)} = b^{(k+1)}$$

$$x_2^{(k)} = x_1^{(k+1)} = b^{(k+1)} - \alpha\left(b^{(k+1)} - a^{(k+1)}\right) \tag{5}$$

Aus den Gleichungen (1)-(5) ergibt sich:

$$\alpha^2 + \alpha - 1 = 0 \qquad \text{dann} \quad \alpha = \frac{\sqrt{5}-1}{2} = 0,618$$

Graphische Darstellung des Algorithmus:



wenn

$$b^{(k)} - a^{(k)} \leq \varepsilon\,,$$

dann

$$x^* = \frac{1}{2}\left(b^{(k)} + a^{(k)}\right)$$

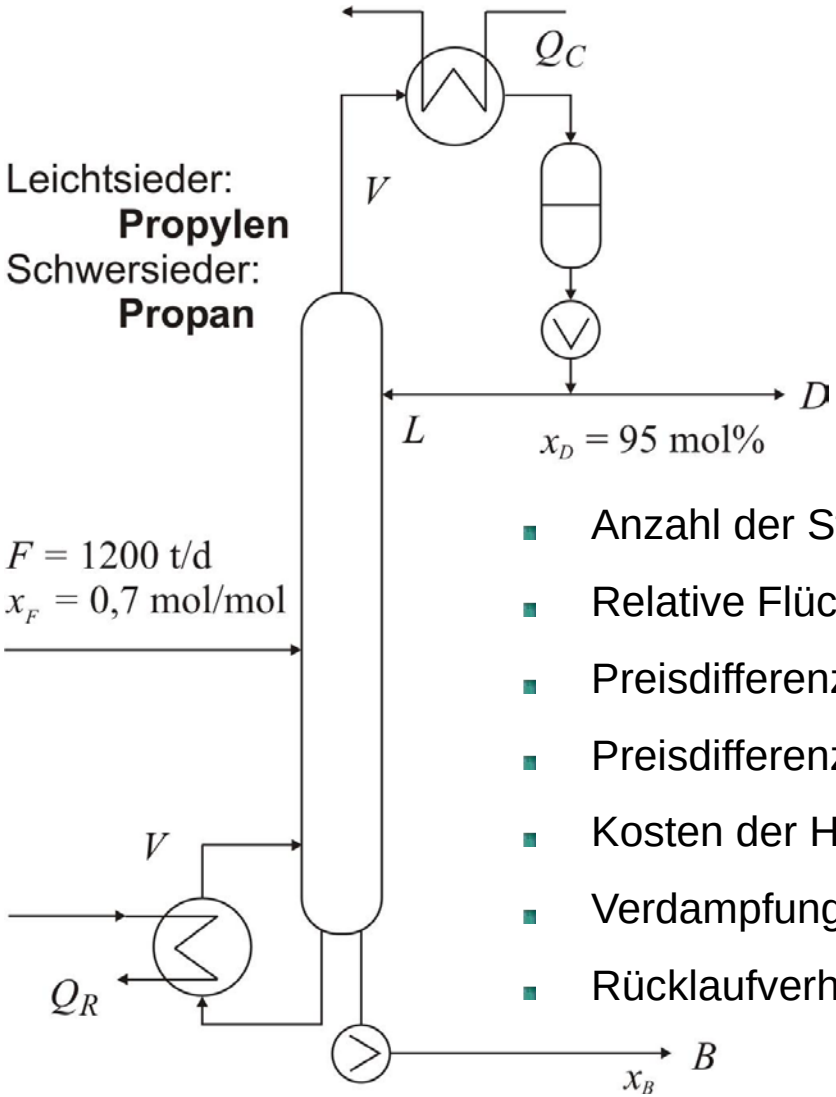
Lösung mit dem goldenen Schnitt:

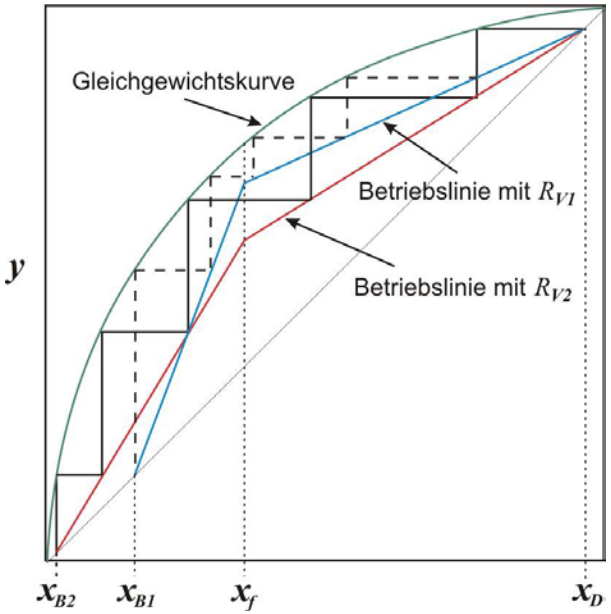
$$\max \quad x \sin x$$
$$mit \quad 0 \le x \le 3{,}5$$

Zwischenergebnisse während der Lösung (ε = 0.01)

k	$a^{(k)}$	$b^{(k)}$	$x_1^{(k)}$	$x_2^{(k)}$	$f\left(x_1^{(k)}\right)$	$f\left(x_2^{(k)}\right)$
1	0,0000	3,5000	1,3370	2,1630	1,3006	1,7947
2	1,3370	3,5000	2,1630	2,6737	1,7947	1,2058
3	1,3370	2,6737	1,8476	2,1630	1,7773	1,7947
4	1,8476	2,6737	2,1630	2,3582	1,7947	1,6642
5	1,8476	2,3582	2,0427	2,1630	1,8194	1,7947
6	1,8476	2,1630	1,9681	2,0427	1,8148	1,8194
7	1,9681	2,1630	2,0427	2,0885	1,8194	1,8148
8	1,9681	2,0885	2,0141	2,0427	1,8194	1,8194
9	2,0141	2,0885	2,0427	2,0601	1,8194	1,8184
10	2,0141	2,0601	2,0317	2,0427	1,8197	1,8194
11	2,0141	2,0427	2,0250	2,0317	1,8197	1,8197
12	2,0250	2,0427	2,0317	2,0349	1,8197	1,8196
13	2,0250	2,0349	2,0292	2,0317	1,8197	1,8197

Beispiel: Optimierung des Rücklaufverhältnisses für eine Destillationskolonne



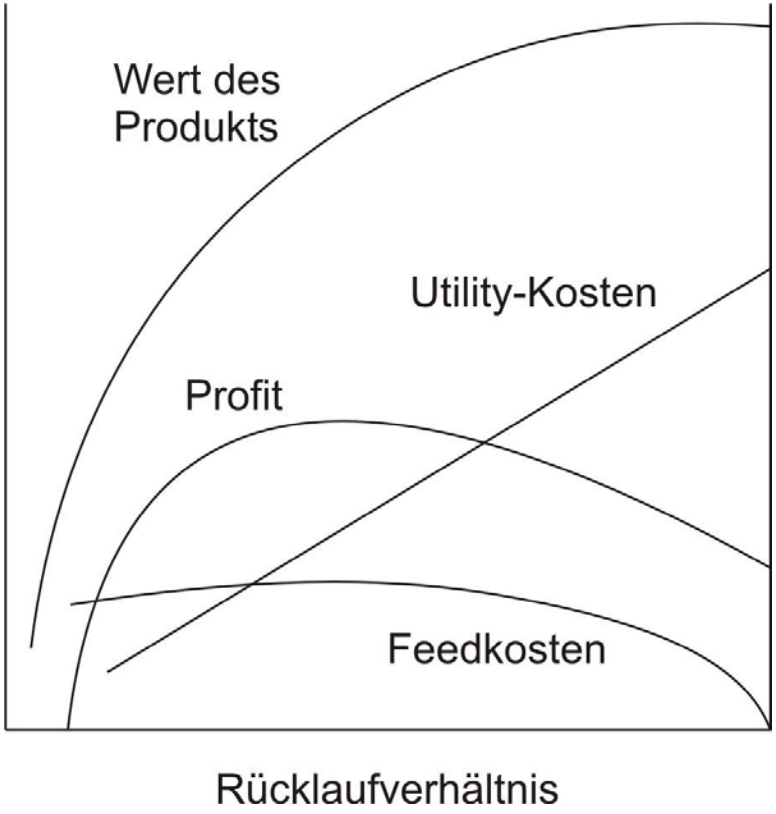


- Anzahl der Stufen: 94
- Relative Flüchtigkeit: 1,105
- Preisdifferenz des Leichtsieder: 0,11 €/kg
- Preisdifferenz des Schwersieder: - 0,08 €/kg
- Kosten der Heizleistung: 3 €/TkW
- Verdampfungswärme: 130 TkW/kg
- Rücklaufverhältnis: R?

Analyse des Freiheitsgrades:

Regelgrößen: $x_D = 0,95 \cdot x_B$,

Stellgrößen: L, V



Der Profit des Betriebs:

$$\max_{R} \quad [c_D D x_D + c_B B x_B] + [c'_D D(1-x_D) + c'_B B(1-x_B)]$$
$$- [c_R Q_R + c_c Q_c] - [c_F F x_F + c'_F F(1-x_F)]$$

weil

$$F = D + B$$
$$F x_F = D x_D + B x_B$$

dann

$$c_D D x_D + c_B B x_B = c_D(F x_F - B x_B) + c_B B x_B$$
$$= c_D F x_F - (c_D - c_B) B x_B$$

und

$$c'_D D(1-x_D) + c'_B B(1-x_B) = c'_D D(1-x_D) + c'_B B - c'_B B x_B$$
$$= c'_D D(1-x_D) + c'_B(F-D) - c'_B(F x_F - D x_D)$$
$$= c'_D D(1-x_D) + c'_B F(1-x_F) - c'_B D(1-x_D)$$
$$= c'_B F(1-x_F) - (c'_B - c'_D) D(1-x_D)$$

zusätzlich

$$Q_R \cong Q_C \cong \lambda V$$

die Zielfunktion:

$$\begin{aligned} \max_R \; & c_D F x_F + c'_B F(1-x_F) - c_F F x_F - c'_F F(1-x_F) \\ & - (c_D - c_B) B x_B - (c'_B - c'_D) D(1-x_D) - (c_R - c_C)\lambda V \end{aligned}$$

d. h.

$$\min_R \; (c_D - c_B) B x_B + (c'_B - c'_D) D(1-x_D) + (c_R - c_C)\lambda V$$

4 Variablen: $D,\, B,\, V,\, x_B$

die zu optimierende Variable: R

Die untere Grenze:

$$R_m = \frac{1}{\alpha - 1}\left(\frac{x_D}{x_F} - \alpha\frac{1 - x_D}{1 - x_F}\right)$$

Die Eduljee-Gleichung:

$$\frac{N - N_m}{N + 1} = 0,75\left[1 - \left(\frac{R - R_m}{R + 1}\right)^{0,5668}\right]$$

Die Fenske-Gleichung:

$$N_m = \frac{ln\left[\frac{x_D(1 - x_B)}{x_B(1 - x_D)}\right]}{ln\,\alpha}$$

Die Massen- und Komponentenbilanz:

$$F = D + B$$

$$Fx_F = Dx_D + Bx_B$$

und die Beziehung:

$$V = (R + 1)D$$

Die Lösung:

$$R^* = 17,06 \quad x_B^* = 0.0432 \text{ mol/mol}$$

$$f^* = 3870.17 \text{ \$/d}$$