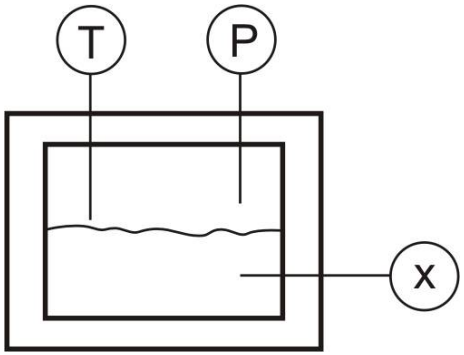
Statische Prozessoptimierung/ Prozessoptimierung 1

Kapitel 6:
Nichtlineare Optimierung unbeschränkter Probleme

Prof. Dr.-Ing. habil. Pu Li

Fachgebiet Prozessoptimierung

Beispiel: Parameteranpassung für Phasengleichgewicht binärer Systeme



Gleichgewichtsbeziehung:

$$p\,y_1 = \gamma_1\,p_1^0\,x_1$$
$$p\,y_2 = \gamma_2\,p_2^0\,x_2$$

van-Laar-Modell:

$$\gamma_1 = A_{12}\left[\frac{A_{21}x_2}{A_{12}x_1 + A_{21}x_2}\right]^2$$

$$\gamma_2 = A_{21}\left[\frac{A_{12}x_1}{A_{12}x_1 + A_{21}x_2}\right]^2$$

Die Antoine-Gleichung:

$$p_1^0 = A_1 - \frac{B_1}{C_1 + T}$$

$$p_2^0 = A_2 - \frac{B_2}{C_2 + T}$$

Fachgebiet Prozessoptimierung

Der Systemdruck:

$$p = p\,y_1 + p\,y_2 = \gamma_1 p_1^0 x_1 + \gamma_2\, p_2^0\, x_2$$

d. h. $$p = p(x_1, x_2, A_{12}, A_{21}, T), \quad T = \text{const.}$$

Durch ein Experiment mit einer konstanten Temperatur erhält man eine Reihe von Messdaten:

$$p_j^M, \; x_{1,j}^M \qquad j = 1, \cdots, n$$

weil $$x_2 = 1 - x_1$$

dann $$p_j^B = p(x_{1,j}^M, A_{12}, A_{21})$$

Minimierung des gesamten quadratischen Fehlers:

$$\min_{A_{12}, A_{21}} \left\{ f(A_{12}, A_{21}) = \sum_{j=1}^{n} (p_j^B - p_j^M)^2 \right\}$$

Dies ist ein typisches nichtlineares Optimierungsproblem ohne Nebenbedingungen.

Mehrdimensionale Optimierung nichtlinearer Probleme ohne Nebenbedingungen

Problemstellung: $\min_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in R^N$

Die Lösung: $\mathbf{x}^* = [x_1^*, \cdots, x_N]^T$

$$f(\mathbf{x}^*) = \min_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x})$$

Die erste (notwendige) Bedingung an einem lokalen Minimalpunkt $\mathbf{x}^*$:

$$\frac{\partial f(\mathbf{x}^*)}{\partial x_1} = \cdots = \frac{\partial f(\mathbf{x}^*)}{\partial x_N} = 0$$

Nämlich $\nabla_x f(\mathbf{x}^*) = 0$

Die zweite (hinreichende) Bedingung am Minimalpunkt $\mathbf{x}^*$ ist eine positiv definite Hesse-Matrix:

$$\mathbf{p}^T \mathrm{H}(\mathbf{x}^*)\mathbf{p} \geq 0$$

Taylor-Entwicklung an $\mathbf{x}^*$

$$f(\mathbf{x}) \stackrel{!}{=} f(\mathbf{x}^*) + [\nabla f(\mathbf{x}^*)]^T \Delta\mathbf{x} + \frac{1}{2}(\Delta\mathbf{x})^T \mathbf{H}(\mathbf{x}^*)\Delta\mathbf{x}$$

d. h.

$$f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{x}^*) \stackrel{!}{=} \frac{1}{2}(\Delta\mathbf{x})^T \mathbf{H}(\mathbf{x}^*)\Delta\mathbf{x} \geq \mathbf{0}$$

weil $f(\mathbf{x}) \geq f(\mathbf{x}^*)$, dann bedeutet dies $\mathbf{H}(\mathbf{x}^*) \geq \mathbf{0}$.

Das Newton-Verfahren:

Aus der notwendigen Bedingung definiert man:

$$g_1(\mathbf{x}) = \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_1} = 0$$

$$\cdots\cdots$$

$$g_N(\mathbf{x}) = \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_N} = 0$$

- N Variablen
- N Gleichungen
- Es kann mit dem Newton-Verfahren gelöst werden.

Die Jacobi-Matrix des Gleichungssystems ist $\mathbf{H}(\mathbf{x})$.
Die iterative Lösung:

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k - [\mathbf{H}(\mathbf{x}^k)]^{-1} \nabla f(\mathbf{x}^k)$$

Es wird ein Schätzpunkt $\mathbf{x}^0$ gebraucht.

Entwicklung von $f(x_1, x_2, x_3)$ in Taylorreihe 2. Ordnung bei $\mathbf{x}^0 = (x_1^0, x_2^0, x_3^0)^T$

$$
\begin{aligned}
f(x_1, x_2, x_3) = f(x_1^0, x_2^0, x_3^0) &+ \frac{\partial f(\mathbf{x}^0)}{\partial x_1} dx_1 + \frac{\partial f(\mathbf{x}^0)}{\partial x_2} dx_2 + \frac{\partial f(\mathbf{x}^0)}{\partial x_3} dx_3 \\
&+ \frac{1}{2} \left\{ \frac{\partial^2 f(\mathbf{x}^0)}{\partial x_1^2} (dx_1)^2 + \frac{\partial^2 f(\mathbf{x}^0)}{\partial x_1 \partial x_2} (dx_1 dx_2) + \frac{\partial^2 f(\mathbf{x}^0)}{\partial x_1 \partial x_3} (dx_1 dx_3) \right. \\
&+ \frac{\partial^2 f(\mathbf{x}^0)}{\partial x_2 \partial x_1} (dx_2 dx_1) + \frac{\partial^2 f(\mathbf{x}^0)}{\partial x_2^2} (dx_2)^2 + \frac{\partial^2 f(\mathbf{x}^0)}{\partial x_2 \partial x_3} (dx_2 dx_3) \\
&+ \left. \frac{\partial^2 f(\mathbf{x}^0)}{\partial x_3 \partial x_1} (dx_3 dx_1) + \frac{\partial^2 f(\mathbf{x}^0)}{\partial x_3 \partial x_2} (dx_3 dx_2) + \frac{\partial^2 f(\mathbf{x}^0)}{\partial x_3^2} (dx_3) \right\}
\end{aligned}
$$

$$= f(x_1^0,\, x_2^0,\, x_3^0) + \left[\frac{\partial f(\mathbf{x}^0)}{\partial x_1},\, \frac{\partial f(\mathbf{x}^0)}{\partial x_2},\, \frac{\partial f(\mathbf{x}^0)}{\partial x_3}\right] \begin{bmatrix} dx_1 \\ dx_2 \\ dx_3 \end{bmatrix} +$$

$$+\frac{1}{2}\left\{\left[\frac{\partial^2 f(\mathbf{x}^0)}{\partial x_1^2}dx_1 + \frac{\partial^2 f(\mathbf{x}^0)}{\partial x_1 \partial x_2}dx_2 + \frac{\partial^2 f(\mathbf{x}^0)}{\partial x_1 \partial x_3}dx_3\right]dx_1\right.$$

$$+\left[\frac{\partial^2 f(\mathbf{x}^0)}{\partial x_2 \partial x_1}dx_1 + \frac{\partial^2 f(\mathbf{x}^0)}{\partial x_2^2}dx_2 + \frac{\partial^2 f(\mathbf{x}^0)}{\partial x_2 \partial x_3}dx_3\right]dx_2$$

$$\left.+\left[\frac{\partial^2 f(\mathbf{x}^0)}{\partial x_3 \partial x_1}dx_1 + \frac{\partial^2 f(\mathbf{x}^0)}{\partial x_3 \partial x_2}dx_2 + \frac{\partial^2 f(\mathbf{x}^0)}{\partial x_3^2}dx_3\right]dx_3\right\}$$

$$= f(\mathbf{x}^0) + \left[\frac{\partial f(\mathbf{x}^0)}{\partial \mathbf{x}}\right]^T d\mathbf{x} + \frac{1}{2}(d\mathbf{x})^T \left[\frac{\partial^2 f(\mathbf{x}^0)}{\partial \mathbf{x}^2}\right] d\mathbf{x}$$

Beispiel: das Newton-Verfahren

$$\min_{\mathbf{x}} \; f(\mathbf{x}) = 3\,x_1^2 + 2x_1\,x_2 + 1,5\,x_2^2$$

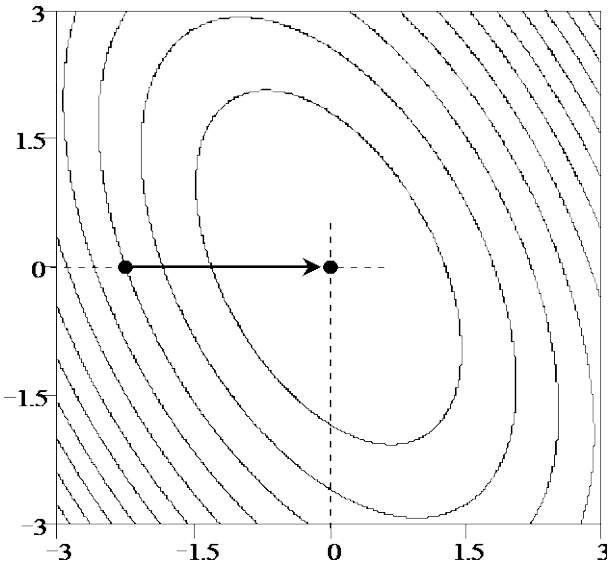
$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} 6 & 2 \\ 2 & 3 \end{bmatrix} \qquad \mathbf{H}^{-1} = \frac{1}{14}\begin{bmatrix} 3 & -2 \\ -2 & 6 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{x}^0 = \begin{bmatrix} -\sqrt{5} \\ 0 \end{bmatrix} \qquad f(\mathbf{x}^0) = 15 \qquad \nabla f(\mathbf{x}^0) = \begin{bmatrix} -6\sqrt{5} \\ -2\sqrt{5} \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{x}^1 = \mathbf{x}^0 - \mathbf{H}^{-1}\,\nabla f(\mathbf{x}^0) = \begin{bmatrix} -\sqrt{5} \\ 0 \end{bmatrix} - \frac{1}{14}\begin{bmatrix} 3 & -2 \\ -2 & 3 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} -6\sqrt{5} \\ -2\sqrt{5} \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{x}^1 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$f(\mathbf{x}^1) = 0$$



Das klassische Gradienten-Verfahren

(Verfahren des steilsten Abstiegs)

Ein gegebener Punkt $\mathbf{x}^0,\ f(\mathbf{x}^0)$ Der nächste Punkt $\mathbf{x},\ f(\mathbf{x})$

Taylor-Entwicklung erster Ordnung an $\mathbf{x}^0$:

$$f(\mathbf{x}) \approx f(\mathbf{x}^0) + [\nabla f(\mathbf{x}^0)]^T(\mathbf{x} - \mathbf{x}^0)$$

d. h. $\min_{\mathbf{x}} \left\{ f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{x}^0) \approx [\nabla f(\mathbf{x}^0)]^T(\mathbf{x} - \mathbf{x}^0) \right\}$

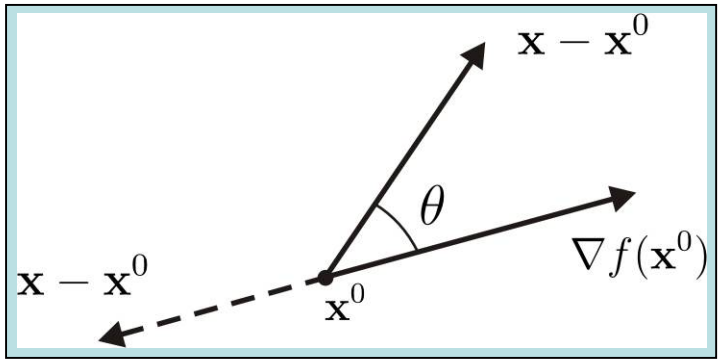
$$= \|\nabla f(\mathbf{x}^0)\| \|(\mathbf{x} - \mathbf{x}^0)\| \cos\theta$$

Wenn die Suchrichtung: $\theta = 180°$

$$\min_{\mathbf{x}} \left\{ f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{x}^0) \right\} = -\|\nabla f(\mathbf{x}^0)\| \|\mathbf{x} - \mathbf{x}^0\|$$

d. h. $\mathbf{x} - \mathbf{x}^0 = -\alpha \nabla f(\mathbf{x}^0) \quad 0 < \alpha \leq 1$

$$\mathbf{x}^1 = \mathbf{x}^0 - \alpha \nabla f(\mathbf{x}^0)$$



Beispiel: Inneres Produkt

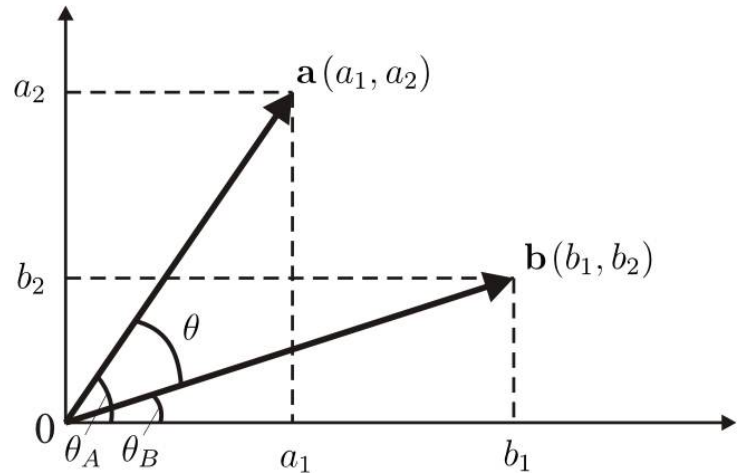
$$\mathbf{a}^T = (a_1, a_2) \quad \mathbf{b}^T = (b_1, b_2)$$

dann

$$\mathbf{a}^T\mathbf{b} = (a_1, a_2)\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = a_1 b_1 + a_2 b_2$$

aus dem Bild

$$a_1 = \overline{oa}\cos\theta_A \quad a_2 = \overline{oa}\sin\theta_A$$
$$b_1 = \overline{ob}\cos\theta_B \quad b_2 = \overline{ob}\sin\theta_B$$



dann

$$\begin{aligned}
\mathbf{a}^T\mathbf{b} &= \overline{oa}\cos\theta_A \cdot \overline{ob}\cos\theta_B + \overline{oa}\,\sin\theta_A \cdot \overline{ob}\,\sin\theta_B \\
&= \overline{oa}\,\overline{ob}\,(\cos\theta_A\,\cos\theta_B + \sin\theta_A\,\sin\theta_B) \\
&= \overline{oa}\,\overline{ob}\,\cos(\theta_A - \theta_B) \\
&= \overline{oa}\,\overline{ob}\,\cos\theta
\end{aligned}$$

Das Gradienten Verfahren (Verfahren des steilsten Abstiegs)

1) $\mathbf{x}^{(0)}$, ε vorgeben, $k = 0$

2) $\nabla f(\mathbf{x}^{(k)})$ berechnen:

wenn $\|\nabla f(\mathbf{x}^{(k)})\| \leq \varepsilon$, dann $\mathbf{x}^* = \mathbf{x}^{(k)}$

STOP.

3) das folgende Problem lösen:

$$\min_{\alpha} \left\{ f\left[\mathbf{x}^{(k)} - \alpha \nabla f(\mathbf{x}^{(k)})\right] \right\}$$

4) neue Variablen berechnen:

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} - \alpha \nabla f(\mathbf{x}^{(k)})$$

5) die nächste Iteration:

$k = k + 1$, GOTO 2)

Beispiel: das Gradienten-Verfahren

$$\min_{\mathbf{x}} \; f(\mathbf{x}) = 3\,x_1^2 + 2x_1x_2 + 1,5\,x_2^2$$

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial f}{\partial x_1} \\ \dfrac{\partial f}{\partial x_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6\,x_1 + 2x_2 \\ 2\,x_1 + 3\,x_2 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{x}^0 = \begin{bmatrix} -\sqrt{5} \\ 0 \end{bmatrix} \qquad f(\mathbf{x}^0) = 15$$

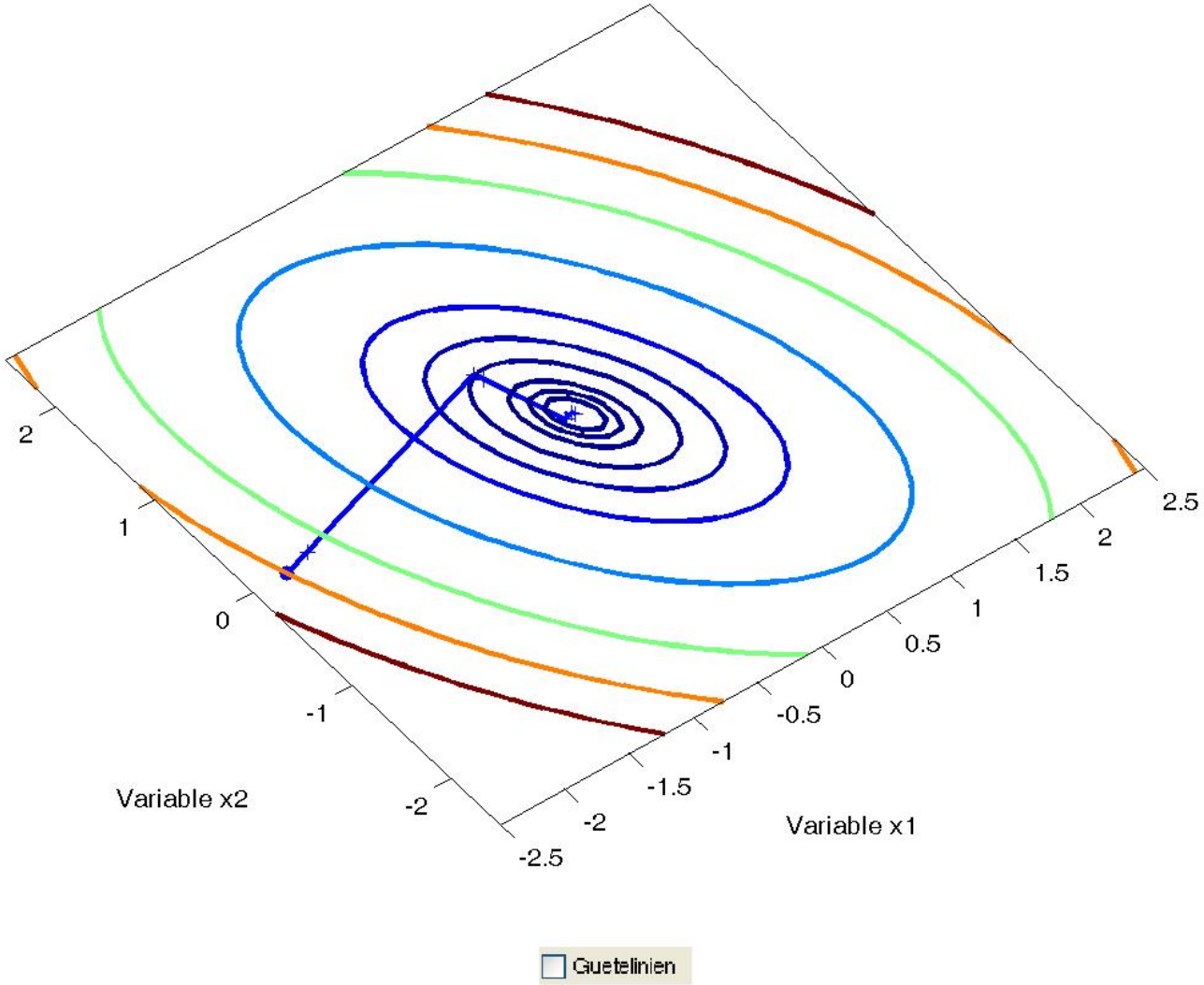
$$\nabla f(\mathbf{x}^0) = \begin{bmatrix} -6\sqrt{5} \\ -2\sqrt{5} \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{x}^1 = \mathbf{x}^0 - \alpha \nabla f(\mathbf{x}^0) = \begin{bmatrix} -\sqrt{5} \\ 0 \end{bmatrix} - \alpha \begin{bmatrix} -6\sqrt{5} \\ -2\sqrt{5} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{5}\,(6\alpha - 1) \\ 2\sqrt{5}\,\alpha \end{bmatrix}$$

$$\min_{\alpha} \; f(\mathbf{x}^1) \qquad \alpha = 0,15$$

$$\mathbf{x}^1 = \begin{bmatrix} -0,224 \\ 0,671 \end{bmatrix} \qquad f(\mathbf{x}^1) = 0,525$$

Grafische Darstellung:



Das Gradienten-Verfahren:

Lineare Approximation der Zielfunktion

Suchrichtung:	$-\nabla f(\mathbf{x})$	(einfach)
Konvergenz:	linear	(langsam)

Das Newton-Verfahren:

Quadratische Approximation der Zielfunktion

Suchrichtung:	$-\mathbf{H}^{-1}\nabla f(\mathbf{x})$	(kompliziert)
Konvergenz:	quadratisch	(schnell)

Das Marquardt-Levenberg-Verfahren:

Modifikation des Newton-Verfahrens zum Garantieren einer positiv definiten Hesse-Matrix mit

$$\tilde{\mathbf{H}}(\mathbf{x}) = \mathbf{H}(\mathbf{x}) + \beta\,\mathbf{I} \qquad \beta \geq 0$$

Suchrichtung: $-[\tilde{\mathbf{H}}(\mathbf{x})]^{-1}\nabla f(\mathbf{x})$

wenn $f(\mathbf{x}^{k+1}) < f(\mathbf{x}^k) \Rightarrow \beta^{k+1} = \frac{1}{2}\beta^k$

wenn $f(\mathbf{x}^{k+1}) > f(\mathbf{x}^k) \Rightarrow \beta^{k+1} = 2\beta^k$

Das Quasi-Newton-Verfahren:

Die Hesse-Matrix wird approximiert, um die direkte Berechnung der Matrix zu vermeiden.

$$\mathbf{x}^k, \nabla f(\mathbf{x}^k), \hat{\mathbf{H}}(\mathbf{x}^k) \Rightarrow \mathbf{x}^{k+1}, \nabla f(\mathbf{x}^{k+1})$$
$$\Rightarrow \hat{\mathbf{H}}(\mathbf{x}^{k+1}) = ?$$

man definiert

$$\boldsymbol{\delta} = \mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k, \quad \boldsymbol{\gamma} = \nabla f(\mathbf{x}^{k+1}) - \nabla f(\mathbf{x}^k)$$

BFGS-Formel (Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno):

$$\hat{\mathbf{H}}^{k+1} = \hat{\mathbf{H}}^k + \left(1 + \frac{\boldsymbol{\gamma}^T \hat{\mathbf{H}}^k \boldsymbol{\gamma}}{\boldsymbol{\delta}^T \boldsymbol{\gamma}}\right) \frac{\boldsymbol{\delta}\boldsymbol{\delta}^T}{\boldsymbol{\delta}^T \boldsymbol{\gamma}} - \frac{\boldsymbol{\delta}\boldsymbol{\gamma}^T \hat{\mathbf{H}}^k + \hat{\mathbf{H}}^k \boldsymbol{\gamma}\boldsymbol{\delta}^T}{\boldsymbol{\delta}^T \boldsymbol{\gamma}}$$

Es wird garantiert, dass die approximierte Hesse-Matrix positiv definit ist.

Für die Initialisierung, $\hat{\mathbf{H}}^0 = \mathbf{I}$, d. h. der erste Schritt wird mit dem Gradienten-Verfahren berechnet.

Richtungssuche (Bestimmung der Schrittlänge): (Line Search)

Iterative Lösung:

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \Delta\mathbf{x} = \mathbf{x}^k + \alpha\,\mathbf{p}^k$$

Beim Newton-Verfahren:

$$\mathbf{p}^k = -\left[\mathbf{H}(\mathbf{x}^k)\right]^{-1}\nabla f(\mathbf{x}^k)$$

Beim Gradienten-Verfahren:

$$\mathbf{p}^k = -\nabla f(\mathbf{x}^k)$$

Beim Quasi-Newton-Verfahren:

$$\mathbf{p}^k = -\left[\mathbf{H}(\mathbf{x}^k)\right]^{-1}\nabla f(\mathbf{x}^k)$$

Das Optimierungsproblem:

$\alpha\,(0 < \alpha \leq 1)$ suchen, damit

$$\min_{\alpha}\left\{\varphi(\alpha) = f(\mathbf{x}^k + \alpha\,\mathbf{p}^k)\right\}$$

Suchstrategie (Wolfe-Bedingung):

1) Der Wert der Zielfunktion soll verkleinert werden:

$$\varphi(\alpha) = f(\mathbf{x}^k + \alpha\,\mathbf{p}^k) \leq f(\mathbf{x}^k) + c_1 \left[\nabla f(\mathbf{x}^k)\right]^T \mathbf{p}^k \alpha$$

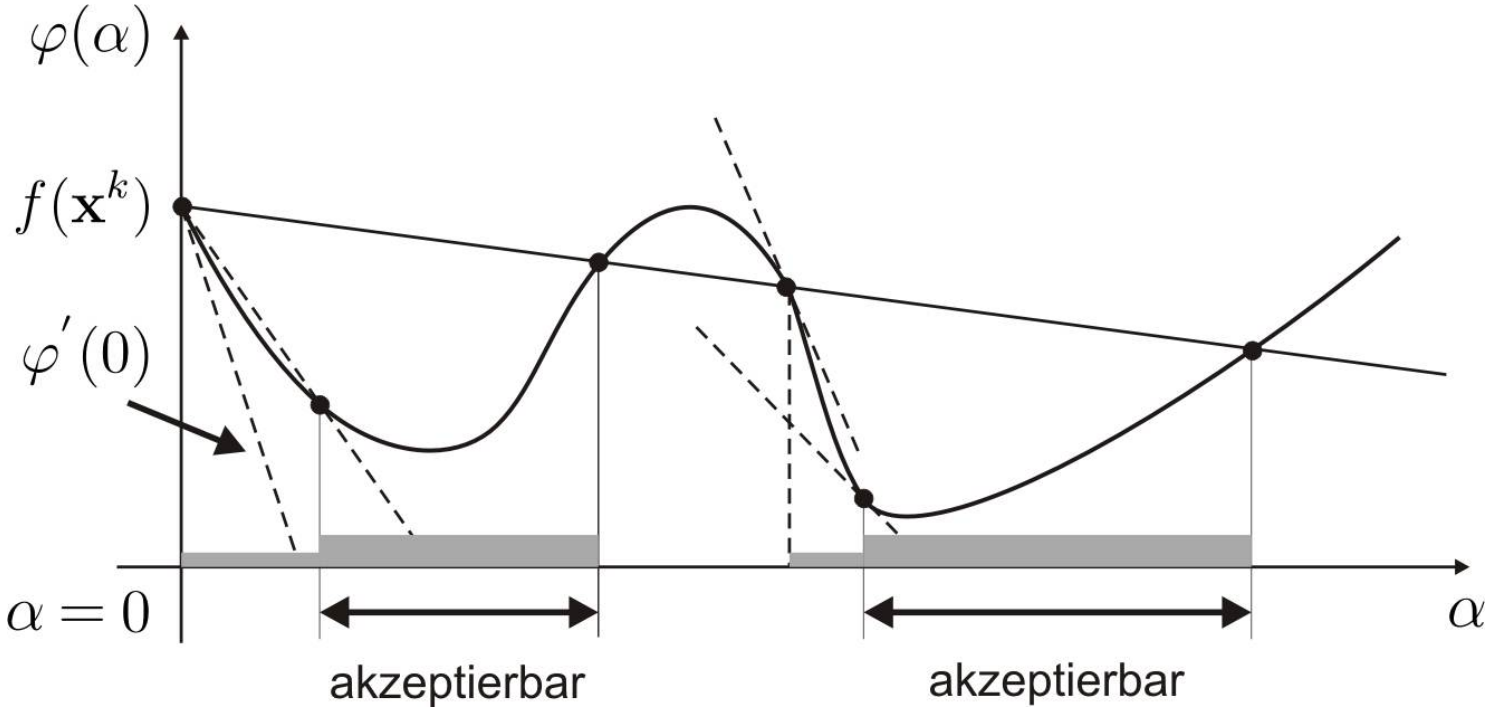
2) Die Gradienten sollen relativ groß, d. h. die Zielfunktion wird nicht mehr absteigen.

$$\varphi'(\alpha) = \left[\nabla f(\mathbf{x}^k + \alpha\,\mathbf{p}^k)\right]^T \mathbf{p}^k \geq c_2 \left[\nabla f(\mathbf{x}^k)\right]^T \mathbf{p}^k$$

Es gibt $1 > c_2 \gg c_1 > 0$, und

$$\varphi(0) = f(\mathbf{x}^k),\ \varphi'(0) = \left[\nabla f(\mathbf{x}^k)\right]^T \mathbf{p}^k < 0$$

Grafische Darstellung:



Praktische Implementierung der Richtungssuche

Quadratische Approximation:

$$\hat{\phi}(\alpha) = a\alpha^2 + b\alpha + c$$

Zum Finden von α bei Minimierung von $\hat{\phi}(\alpha)$, muss diese Funktion konvex sein, also muss $a > 0$.
Weil

$$\hat{\phi}'(\alpha) = 2a\alpha + b$$

dann liegt der Minimumpunkt bei

$$\alpha^* = -\frac{b}{2a}$$

Die Parameter a, b, c werden durch die Randbedingungen, also bei $\alpha = 0$ und $\alpha = \alpha_0$ ermittelt. Hierbei ist α_0 eine geschätzte Obergrenze (normalerweise benutzt man $\alpha_0 = 1$). Es gilt:

$$\hat{\phi}(0) = f(\mathbf{x}^k) = c$$

$$\hat{\phi}'(0) = \left[\nabla f(\mathbf{x}^k)\right]^T \mathbf{p}^k = b$$

$$\hat{\phi}(\alpha_0) = f(\mathbf{x}^k + \alpha_0 \mathbf{p}^k) = a\alpha_0^2 + b\alpha_0 + c$$

Praktische Implementierung der Richtungssuche

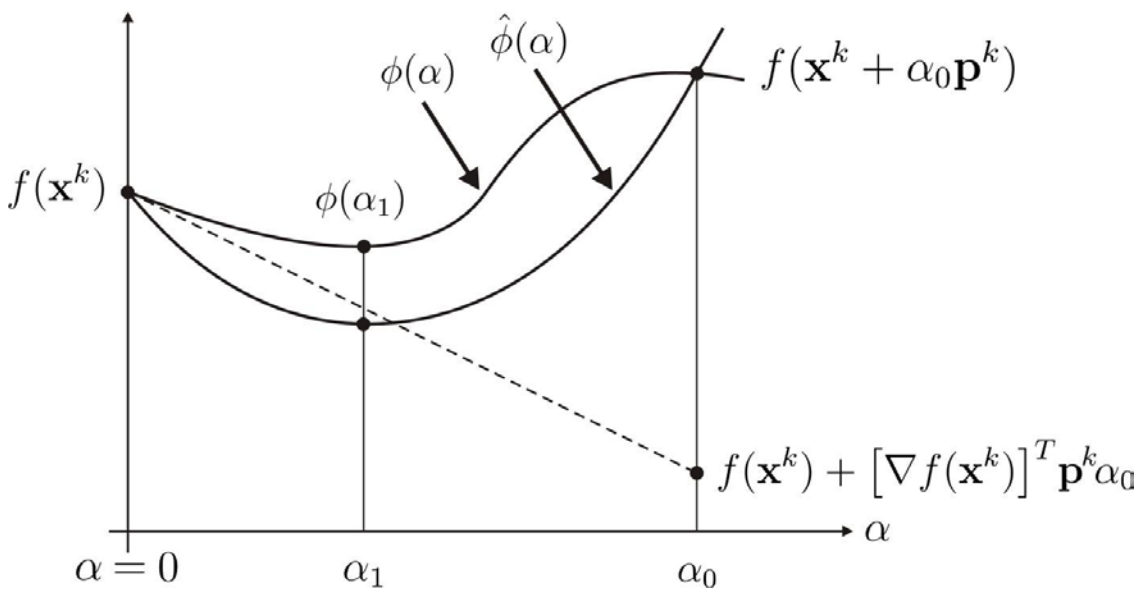
Daraus ergibt sich

$$a = \left\langle f(\mathbf{x}^k + \alpha_0 \mathbf{p}^k) - \left\{ f(\mathbf{x}^k) + \alpha_0 \left[\nabla f(\mathbf{x}^k)\right]^T \mathbf{p}^k \right\} \right\rangle / \alpha_0^2$$

und somit

$$\alpha_1 = -\frac{1}{2} \frac{\alpha_0^2 \left[\nabla f(\mathbf{x}^k)\right]^T \mathbf{p}^k}{f(\mathbf{x}^k + \alpha_0 \mathbf{p}^k) - \left\{ f(\mathbf{x}^k) + \alpha_0 \left[\nabla f(\mathbf{x}^k)\right]^T \mathbf{p}^k \right\}}$$

Grafische Darstellung:



Praktische Implementierung der Richtungssuche

Wenn $f(\mathbf{x}^k + \alpha_0 \mathbf{p}^k) < f(\mathbf{x}^k) + \left[\nabla f(\mathbf{x}^k)\right]^T \mathbf{p}^k \alpha_0$, nimmt die Funktion signifikant ab. In diesem Fall soll ein Vollschritt genutzt werden, also $\alpha = \alpha_0$.

Wenn $f(\mathbf{x}^k + \alpha_0 \mathbf{p}^k) > f(\mathbf{x}^k) + \left[\nabla f(\mathbf{x}^k)\right]^T \mathbf{p}^k \alpha_0$, wird der Parameter $a > 0$. Somit ist $\hat{\phi}(\alpha)$ konvex und eine Schrittlänge wird berechnet.
Der entsprechende Funktionswert $\phi(\alpha_1) = f(\mathbf{x}^k + \alpha_1 \mathbf{p}^k)$ wird dann ausgewertet.

- Wenn die Wolfe-Bedingung erfüllt ist, wird α_1 akzeptiert und damit erhält man den neuen Punkt $\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \alpha_1 \mathbf{p}^k$.
- Wenn aber die Wolfe-Bedingung nicht erfüllt ist, wird α_1 als neue rechte Grenze definiert.

Praktische Implementierung der Richtungssuche

Im Intervall $[0, \alpha_1]$ wird wieder eine quadratische Funktion für die Approximation von $\phi(\alpha)$ erstellt und mit dieser Berechnungsweise ein neuer Schrittfaktor gesucht.

Das Intervall wird von Iteration zu Iteration kleiner. In Iteration l gibt es

$$\alpha_1 = -\frac{1}{2}\frac{\alpha_{l-1}\left[\nabla f(\mathbf{x}^k)\right]^T \mathbf{p}^k}{f(\mathbf{x}^k + \alpha_{l-1}\mathbf{p}^k) - \left\{f(\mathbf{x}^k) + \alpha_{l-1}\left[\nabla f(\mathbf{x}^k)\right]^T \mathbf{p}^k\right\}}$$

Da bei einem kleinen α die Funktion $f(\mathbf{x}^k + \alpha\mathbf{p}^k)$ abnimmt, kann man immer eine geeignete Schrittlänge α^* finden, damit der Funktionswert verbessert wird.

Beispiel: Optimierung eines industriellen Festbett-Reaktors

Rohstoffe: Ethanol CH_3CH_2OH und Sauerstoff O_2
Produkt: Ethanal CH_3CHO, 6000 t/a
Katalysator: Silber-Netze, 200 kg
Reaktion:

$$CH_3CH_2OH + O_2 \rightarrow CH_3CHO,\ CO,\ CO_2,\ CH_3COOH$$

Verbrauch des Rohstoffs für für 1 kg Produkt:

$$y = \frac{\text{Ethanol (kg)}}{\text{Ethanal (kg)}}$$

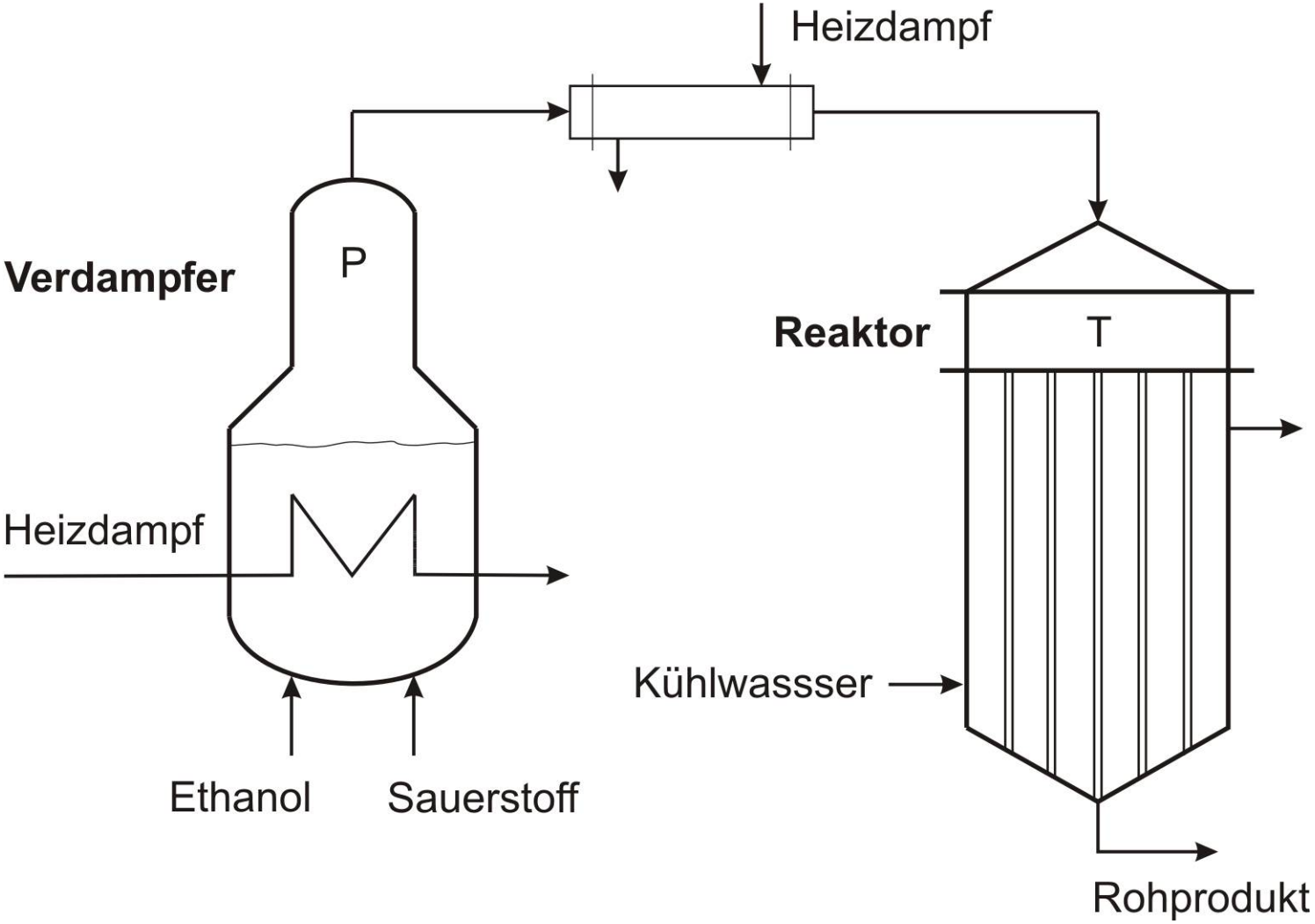
Theoretisch: y_T = 1,0455
Praktisch: y_P = 1,17
Verlust: $y_P - y_T$ = 0,1245 kg/kg (750 t/a)

Ziel der Optimierung: $\min_{T,F,\varphi} \{y_P(T, F, \varphi)\}$

Wichtige Einflussfaktoren:

- Reaktionstemperatur T: 500 - 600°C
- Durchfluss des Feedstroms F: 1,0 - 3,0 t/h
- Aktivität des Katalysators φ

Fließbild eines Prozesses zur Produktion von Ethanal



Prozessmodellierung

$$y_P = f(T, F, \varphi)$$

Es wird eine Funktion mit der Least-Squares-Methode erzeugt. Weil φ nicht messbar ist, wird es zunächst konstant angenommen:

$$y_P = f(T, F)$$

Normalisierung der Variablen:

$$x_1 = \frac{T - T_{min}}{T_{max} - T_{min}} \qquad x_2 = \frac{F - F_{min}}{F_{max} - F_{min}} \qquad 0 \leq x_1, x_2 \leq 1$$

Mit einer Gruppe Messdaten (Experiment oder Betriebsprotokoll) bekommt man ein Modell:

$$y_P = a_1 + a_2 x_1 + a_3 x_2 + a_4 x_1^2 + a_5 x_2^2 + a_6 x_1 x_2 + a_7 x_1^{-2}$$

Das Optimierungsproblem:

$$\min_{x_1, x_2} y_P(x_1, x_2)$$

$$0 \leq x_1, x_2 \leq 1$$

Die Lösung:

$$T^* = 547,2°\text{C}$$

$$F^* = 2,19 \text{ t/h}$$

$$y_P^* = 1,113$$

Fachgebiet Prozessoptimierung