

Entwicklung und Anwendung eines innovativen Werkzeugs für die
mehrkriterielle Optimierung verfahrenstechnischer Prozesse

Vom Promotionsausschuss der
Technischen Universität Hamburg-Harburg
zur Erlangung des akademischen Grades
Doktor-Ingenieur
genehmigte Dissertation

von
Philipp S. Ernst

aus
Bielefeld

2014

Gutachter:

Prof. Dr.-Ing. Georg Fieg
Prof. Dr. Dr. h.c. Frerich Keil

Vorsitzender des Prüfungsausschusses:

Prof. Dr.-Ing. Martin Kaltschmitt

Tag der mündlichen Prüfung:

19. September 2014

Berichte aus dem Institut für Prozess- und Anlagentechnik
der TU Hamburg-Harburg

hrsg. von Prof. Dr.-Ing. Georg Fieg

Philipp Sebastian Ernst

**Entwicklung und Anwendung eines innovativen
Werkzeugs für die mehrkriterielle Optimierung
verfahrenstechnischer Prozesse**

Shaker Verlag
Aachen 2014

Bibliografische Information der Deutschen Nationalbibliothek

Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <http://dnb.d-nb.de> abrufbar.

Zugl.: Hamburg-Harburg, Techn. Univ., Diss., 2014

Copyright Shaker Verlag 2014

Alle Rechte, auch das des auszugsweisen Nachdruckes, der auszugsweisen oder vollständigen Wiedergabe, der Speicherung in Datenverarbeitungsanlagen und der Übersetzung, vorbehalten.

Printed in Germany.

ISBN 978-3-8440-3258-1

ISSN 1868-1123

Shaker Verlag GmbH • Postfach 101818 • 52018 Aachen

Telefon: 02407 / 95 96 - 0 • Telefax: 02407 / 95 96 - 9

Internet: www.shaker.de • E-Mail: info@shaker.de

Vorwort und Danksagung

Die vorliegende Dissertation ist während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Prozess- und Anlagentechnik der Technischen Universität Hamburg-Harburg in der Zeit von Dezember 2009 bis April 2014 entstanden.

Bei Herrn Prof. Dr.-Ing. Georg Fieg bedanke ich mich sehr für die intensive Betreuung der vorliegenden Arbeit und die Übernahme der Doktorvaterschaft. Für die Übernahme des Korreferats danke ich Herrn Prof. Dr. Dr. h.c. Frerich Keil sehr. Bei dem Vorsitzenden des Prüfungsausschusses Herrn Prof. Dr.-Ing. Martin Kaltschmitt bedanke ich mich ebenfalls sehr.

Bei meinen Kolleginnen und Kollegen bedanke ich mich herzlich für die zahlreichen konstruktiven Diskussionen und Verbesserungsvorschläge. Häufig entwickeln sich die besten Ideen oder effizientesten Fehlerbehebungsstrategien eben doch in informellen Flurbesprechungen oder während des Mittagessens. Herrn Dipl.-Ing. Holger Fitschen möchte ich besonders danken, da er über die gesamte Zeit meiner Tätigkeit unermüdlich und unerschütterlich für einwandfrei funktionierende Hard- und Software gesorgt hat.

Im Verlauf meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Prozess- und Anlagentechnik habe ich zahlreiche studentische Arbeiten betreut. Diesen Studierenden danke ich sehr für die wertvollen Vorarbeiten.

Darüber hinaus danke ich Herrn Timo Ranke, da er viele Monate als studentische Hilfskraft an dem *Adv:ProcessOptimizer* mitgearbeitet hat.

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde mit dem *Adv:ProcessOptimizer* ein Optimierungswerkzeug entwickelt, das erstmals die Prozessauslegung mit überlagerten Optimierungskriterien in der wissenschaftlichen Anwendung und industriellen Praxis effizient, komfortabel und robust einsetzbar macht. Selbstverständlich war dies nur durch den intensiven Dialog mit Vertretern der Prozessindustrie möglich. Außerdem danke Frau Marie-Luise Pfeifer-Schmidt von der Firma Chemstations für das zur Verfügung stellen einer CHEMCAD-Lizenz. So war es möglich, auch CHEMCAD an den *Adv:ProcessOptimizer* anzubinden.

Die in der vorliegenden Arbeit dargestellten Forschungsergebnisse sind größtenteils in zwei von dem Bundesministerium für Wirtschaft und Energie beziehungsweise von der Arbeitsgemeinschaft industrieller Forschungsvereinigungen „Otto von Guericke“ e.V. geförderten Forschungsprojekten entstanden. Für diese finanzielle Unterstützung bedanke ich mich sehr.

Meiner Familie möchte ich für jahrelange Unterstützung im Verlauf meines Studiums danken und mich gleichzeitig dafür entschuldigen, dass ich sie in der Dissertationserschaffungsphase etwas vernachlässigt habe. Außerdem möchte ich mich bei meinem Freundes- und Bekanntenkreis für die Geduld im Umgang mit mir und meinen dissertationsbegleitenden Herausforderungen sehr herzlich danken.

Last but not least danke ich dem Verlag für die Übernahme des Drucks.

Köln, im November 2014
Philipp Ernst

Inhaltsverzeichnis

Abkürzungsverzeichnis	vii
Symbolverzeichnis	ix
Indexverzeichnis	xi
1 Einleitung	1
1.1 Motivation: Mathematische Optimierung statt manueller Verbesserung	2
1.2 Zielsetzung der vorliegenden Arbeit	5
1.3 Kapitelübersicht	6
1.4 Abschließende Hinweise	8
2 Grundlagen der Prozessoptimierung	9
2.1 Grundlagen der Verfahrensentwicklung	9
2.2 Methoden für die Auslegung verfahrenstechnischer Prozesse	11
2.3 Grundlagen der globalen Optimierung	13
2.3.1 Mehrkriterielle globale Optimierung	13
2.3.2 No-free-Lunch-Theorem	14
2.3.3 Optimierungsproblemklassen	15
2.4 Methoden der globalen nichtlinearen Optimierung	17
2.5 Parallelisierbarkeit von Optimierungsverfahren	20
2.6 Einfache Evolutionäre Algorithmen	21
2.6.1 Selektionsoperation	22
2.6.2 Mutationsoperation	22
2.6.3 Kreuzungsoperation	22
2.6.4 Bewertungsoperation	23
2.6.5 Funktionsweise	24
2.6.6 Zusammenfassung und Bewertung	25
2.7 Evolutionäre Algorithmen mit Elite- und Diversitätsstrategien	26
2.7.1 Non-dominated Sorting	27
2.7.2 Crowding Distance	27
2.8 Kostenschätzung	28

3	Stand des Wissens	31
3.1	Apparate- und Prozessauslegung	32
3.2	Beschreibung der Investitions- und Betriebskosten	38
3.3	Evolutionäre Algorithmen	38
3.4	Zusammenfassung	40
4	Abbildung der Optimierungsaufgabe	43
4.1	Konzept für die Individuenauswertung	43
4.2	Konzeptionelle Erweiterung des Modells der Grundoperationen	44
4.3	Zugriffsmethoden	46
4.3.1	Zugriffsmethoden auf Zielfunktionsmodule	47
4.3.2	Zugriffsmethoden auf Nebenbedingungsmodule	49
5	Maßgeschneidertes Optimierungsverfahren	51
5.1	Charakterisierung der Anforderungen	52
5.2	Diskretisierung des Urbildraumes	53
5.3	Selektionsoperation	54
5.4	Mutationsoperation	56
5.5	Kreuzungsoperation	59
5.6	Elite- und Diversitätsbewahrungskonzept	60
5.6.1	Analyse und Bewertung publizierter Elite- und Diversitätsbewahrungskonzepte	60
5.6.2	Maßgeschneidertes Elite- und Diversitätsbewahrungskonzept	65
5.7	Bewertungsoperation	70
5.7.1	Konzept der Interface-Funktion	70
5.7.2	Konzept für die Individuenauswahl	73
5.7.3	Konzept für die dynamische Fitnessberechnung	74
5.8	Parallelisierung der Individuenauswertung	78
5.8.1	Parallelisierbarkeit in Matlab	78
5.8.2	Master-Slave-Modelle parallelierter evolutionärer Algorithmen	80
5.8.3	Umsetzung des synchronen Master-Slave-Modells	82
5.9	Abbruch- und Konvergenzkriterien	83
5.10	Ermittelte Standardparametrisierung	85
6	Adv:ProcessOptimizer	87
6.1	Entwicklung des Optimierungswerkzeugs	87
6.1.1	Anforderungskatalog	87
6.1.2	Ablauf eines Optimierungsprojekts	89
6.1.3	Umsetzung	89
6.2	Entwickeltes Bedienkonzept	90
6.2.1	Optimization Project	90

6.2.2	Optimization Problem	92
6.2.3	Optimization	93
6.2.4	Result Analysis	95
6.2.5	Excel Export	96
6.3	Zusatzwerkzeuge	97
6.3.1	Referenzmodell	97
6.3.2	Protokolldatei	98
7	Apparatoptimierung am Beispiel der Trennwandkolonne	101
7.1	Beschreibung des Trennwandkolonne	101
7.2	Abbildung des Optimierungsproblems Trennwandkolonne	102
7.2.1	Verwendetes Zielfunktionsmodul	102
7.2.2	Verwendete Nebenbedingungsmodul	103
7.3	Referenzauslegung der Trennwandkolonne	104
7.4	Optimierung der Trennwandkolonne	104
7.4.1	Vorbereitung und Durchführung der Optimierung	105
7.4.2	Analyse und Interpretation der Optimierungsergebnisse	106
8	Prozessoptimierung am Beispiel des Styrolprozesses	117
8.1	Beschreibung des Styrolprozesses	117
8.2	Abbildung des Optimierungsproblems Styrolprozess	119
8.2.1	Verwendete Zielfunktionsmodule	119
8.2.2	Verwendete Nebenbedingungsmodul	120
8.3	Referenzauslegung des Styrolprozesses	121
8.4	Optimierung des Styrolprozesses	125
8.4.1	Vorbereitung und Durchführung der Optimierung	125
8.4.2	Analyse und Interpretation der Optimierungsergebnisse	125
9	Zusammenfassung und Ausblick	137
9.1	Zusammenfassung	137
9.2	Ausblick	139
	Literaturverzeichnis	143
A	Implementierung des maßgeschneiderten EA	151
B	Visualisierung des Optimierungsfortschritts	155
C	Funktionsumfang des Adv:ProcessOptimizers	157

D	Verwendete Zielfunktions- und Nebenbedingungsmodulare	159
D.1	Verwendete Zielfunktionsmodulare	159
D.1.1	Zielfunktionsmodul „Trennwandkolonne“	160
D.1.2	Zielfunktionsmodul „Kolonnen“	163
D.1.3	Zielfunktionsmodul „Kompressor“	165
D.1.4	Zielfunktionsmodul „Erhitzer/Kühler“	166
D.1.5	Zielfunktionsmodul „Dekanter“	167
D.1.6	Zielfunktionsmodul „Strom“	168
D.1.7	Zielfunktionsmodul „Ofen“	169
D.1.8	Zielfunktionsmodul „Wärmeübertrager“	169
D.1.9	Zielfunktionsmodul „Reaktor“	170
D.1.10	Zielfunktionsmodul „Splitter“	171
D.2	Verwendete Nebenbedingungsmodulare	171
D.2.1	Nebenbedingungsmodul „Gleichheit“	171
D.2.2	Nebenbedingungsmodul „wL-Wert“	172
D.2.3	Nebenbedingungsmodul „F-Faktor“	174
E	Übersicht betreuer studentischer Arbeiten	177
F	Lebenslauf	179