

Schriftenreihe des Lehrstuhls für
Systemdynamik und Prozessführung
herausgegeben von Prof. Dr.-Ing. Sebastian Engell

Band 3/2014

Maren Urselmann

**Designoptimierung chemischer Prozesse mit
memetischen Algorithmen am Beispiel einer reaktiven
Rektifikationskolonne mit optionalem Außenreaktor**

D 290 (Diss. Technische Universität Dortmund)

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.: Dortmund, Technische Univ., Diss., 2013

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 978-3-8440-3152-2

ISSN 1867-9498

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

Zusammenfassung

Designoptimierungsprobleme der chemischen Industrie zeichnen sich durch eine große Anzahl diskreter und kontinuierlicher Entscheidungsvariablen, komplexe nichtlineare, den Suchraum beschränkende Modelle, nichtlineare Kostenfunktionen und die Existenz vieler lokaler Optima aus. Der Standardansatz zur Lösung dieser Probleme besteht darin mathematische Methoden zur gemischt-ganzzahligen Optimierung (MINLP) einzusetzen, die auf einer Repräsentation aller sinnvollen Designalternativen, der sogenannten Superstruktur arbeiten. Zur Darstellung struktureller Entscheidungen ist die Einführung einer großen Anzahl binärer Variablen erforderlich, die zu einem exponentiellen Anstieg der zur Lösung benötigten Rechenzeit führt. Die durch Fixierung der diskreten Variablen entstehenden kontinuierlichen Unterprobleme werden mit Methoden der mathematischen Programmierung (MP) effizient, jedoch nur lokal gelöst, sodass die Lösungsqualität stark von der Initialisierung abhängt. Aufgrund der hohen Rechenzeiten und der fehlenden Globalität der Suche sind Standardmethoden noch weit davon entfernt in der Praxis Anwendung zu finden.

In dieser Arbeit wird ein memetischer Algorithmus (MA) zur globalen Designoptimierung chemischer Prozesse am Beispiel einer reaktiven Rektifikationskolonne mit optionalem Außenreaktor entwickelt. Der MA kombiniert eine Evolutionsstrategie (ES) mit einem robusten MP-Löser. Während die Standardmethoden gleichzeitig Designentscheidungen und Betriebsparameter optimieren und die zum Design gehörenden Zustandsvariablen der Modelle bestimmen, wird hier eine polyolithische Modellierung eingesetzt, die eine Trennung der Operationen und den Einsatz unterschiedlicher Optimierungsmethoden ermöglicht. Da evolutionäre Algorithmen (EA) die Fähigkeit besitzen, lokalen Optima zu entkommen übernimmt die ES die globale Optimierung der Designentscheidungen, die nur etwa 3% des ursprünglichen Suchraums darstellen. Ein robuster MP-Löser, der nicht-lineare und hochgradig beschränkte kontinuierliche Probleme effizient lokal löst wird zur Simulation der von der ES vorgeschlagenen Designalternativen und zur Verbesserung der Individuen der ES durch eine lokale Suche in den kontinuierlichen, stark beschränkten Unterräumen eingesetzt. Eine Repräsentation variabler Länge der ES erlaubt die Darstellung struktureller Entscheidungen mit einer geringen Anzahl diskreter Variablen, wodurch der Suchraum des MA im Vergleich zu denen der Standardmethoden weiter reduziert wird.

Ein Vergleich des MA mit kommerziell erhältlichen und dem Stand der Technik entsprechenden MINLP-Lösern zeigt, dass das neue Konzept den benötigten Rechenaufwand um mehr als eine Größenordnung reduziert. Die Einführung struktureller Beschränkungen, optionaler Operationseinheiten und diskontinuierlicher Strafterme führt zu einem moderaten Rechenzeitanstieg. Steigende Komplexität des Fallbeispiels führt bei den MINLP-Techniken zu großen Schwankungen des Rechenaufwandes und der Lösungsgüte, während der MA ein durchgehend robustes Verhalten bei sehr guter Lösungsqualität aufweist. Diese Ergebnisse weisen auf großes Potential dieser Klasse memetischer Algorithmen zur Designoptimierung echter Praxisprobleme der chemischen Industrie hin.