

Dipl.-Ing. Andreas Helget, Flörsheim-Dalsheim

Modulare Simulation verfahrenstechnischer Anlagen

Reihe **20**: Rechnerunterstützte
Verfahren

Nr. **251**

Inhaltsverzeichnis

Vorwort	IV
Symbolverzeichnis	IX

Dynamische Simulation verfahrenstechnischer Anlagen **1**

1.1 Problemstellung	1
1.2 Bisheriger Lösungsansatz	2
1.3 Modulare Struktur und Anlagensimulation in der Verfahrenstechnik	6
1.3.1 Problemstruktur und modulares Simulationsverfahren	6
1.3.2 Kleiner historischer Exkurs	12
1.3.3 Bisherige Arbeiten	12
1.4 Zusammenfassung	15
1.5 Weitere Gliederung dieser Arbeit	15

Iterationsverfahren zur Lösung von Systemen gewöhnlicher Differentialgleichungen **18**

2.1 Banach'scher Fixpunktsatz für reellwertige Funktionen	19
2.2 Verallgemeinerung auf Funktionenräume	22
2.3 Konvergenzordnung iterativer Verfahren	23
2.4 Anwendung auf Systeme gewöhnlicher Differentialgleichungen	24
2.4.1 Sukzessive Approximation	25
2.4.2 Waveform-Relaxation	27

2.4.3	Block-Waveform-Iteration	28
2.4.4	Newton-Waveform-Iteration	29
2.5	Semi-explizite Differential-Algebraische Systeme vom differentiellen Index 1	31
2.5.1	Äquivalenz von DAE und ODE	32
2.5.2	Iterative Lösung des Differential-Algebraischen Systems	33
2.6	Heterogene Funktionenraum-Iteration für Systeme ohne einheitliche Gleichungsstruktur	34
2.7	Eine analytische Abwägung	35
2.8	Zusammenfassung	37

Implementierung und Effizienzsteigerung von Iterationsverfahren für gewöhnliche Differentialgleichungen **39**

3.1	Wahl und Steuerung des Zeithorizontes	40
3.2	Partielle Konvergenz	41
3.3	Inakkurate Iteration	42
3.4	Kommunikation auf diskreten Zeitskalen	42
3.4.1	Numerische Integrationsverfahren	44
3.4.1.1	Interpolation diskret vorliegender Integrationsergebnisse	44
3.4.1.2	Dense-Output von Runge-Kutta-Verfahren	44
3.4.1.3	Natürliches Polynom von Rückwärtsdifferenzen-Verfahren	45
3.4.2	Anforderungen an die Systemeingänge; praktische Beobachtungen	45
3.5	Einsatz moderner Computerarchitekturen	46
3.6	Prädiktion der Koppelgrößen komplexer nichtlinearer Systeme mittels reduzierter Modelle	48
3.7	Softwaretechnik und Schnittstellen eines Moduls	50
3.8	Vergleich verschiedener Verfahren der Funktionenraum-Iteration an einem kleinen Beispiel	52
3.8.1	Thermisch gekoppelte Rührkesselreaktoren	52
3.8.2	Auswahl von Simulationsstudien	55
3.8.3	Typisches Verhalten bei der Funktionenraum-Iteration	55
3.8.4	Steuerung des Zeithorizontes	59
3.8.5	Einfluß der Partiellen Konvergenz	60
3.8.6	Einfluß der inakkuraten Integration	61
3.8.7	Interpolation der Koppelgrößen	62
3.8.8	Geschickte Prädiktion der Koppelgrößen	62
3.8.9	Newton-Waveform-Iteration	63
3.9	Zusammenfassung	64

Katalytische Abluftreinigung

65

4.1	Apparate zur Abluftreinigung	66
4.1.1	Katalytische Festbettreaktoren nach dem Matros-Prinzip	67
4.1.2	Adsorptionsverfahren und -apparate	68
4.2	Modellbildung	70
4.2.1	Matros-Reaktor	71
4.2.2	Modell des Rotations-Adsorbers	72
4.3	Lösungsverfahren	74
4.4	Simulationsstudien für die Apparate	75
4.4.1	Rotationsadsorber	75
4.4.1.1	Simulation eines einzelnen Adsorptionsbetts	76
4.4.1.2	Simulation des Rotationsadsorbers	78
4.4.1.3	Einfluß von Störungen, optimierte Fahrweise	79
4.4.2	Matros-Reaktor	82
4.4.2.1	Simulation des Reaktorbettes	82
4.4.2.2	Einfluß von Störungen auf den Matros-Reaktor	83
4.4.2.3	Regelung des Reaktorzustands	85
4.5	Abluftreinigungsanlage	88
4.5.1	Energetische Analyse der Apparate	88
4.5.2	Simulation	91
4.5.3	Untersuchung des gekoppelten Systems	92
4.5.4	Verhalten bei Störungen	92
4.5.5	Untersuchung der Regelung der Desorptionstemperatur	95
4.5.5.1	Regelung des Anfangszustands der Adsorption	95
4.5.5.2	Nutzung der Speicherfähigkeit des Adsorbers zur Überbrückung von Produktionspausen	96
4.5.5.3	Mischung des Desorptionsgases	97
4.6	Zusammenfassung	98

Zusammenfassung, Kurzfassung

100

Einige wichtige mathematische Grundlagen

102

A.1	Äquivalenz von Normen	102
-----	---------------------------------	-----

A.2	Lipschitzstetige Funktionen	102
A.3	Spezielle Funktionen-Normen	105
A.4	Fréchet-Ableitung in Banach-Räumen	106

Modellgleichungen des Rührkesselreaktors **108**

B.1	Bilanzen	108
B.2	Kinetik	109
B.3	Modellparameter	110

**Spezifikation der Modelle
der Abluftreinigungsanlage** **111**

C.1	Auslegungsdaten des Adsorbers	111
C.2	Adsorptionsisotherme	111
C.3	Parameter der Reaktion und Auslegungsdaten des Festbettreaktors	112
C.4	Reaktionskinetik	112

Literaturverzeichnis **113**