

Dipl.-Ing. Clemens Philipp Majer, Stuttgart

**Parameterschätzung,
Versuchsplanung und
Trajektorienoptimierung
für verfahrenstechnische
Prozesse**

Reihe **3**: Verfahrenstechnik

Nr. **538**

Inhaltsverzeichnis

1	Einführende Übersicht	1
1.1	Problemstellung	1
1.2	Stand der Technik	7
1.3	Gliederung	9
2	Die Simulationsumgebung DIVA	10
2.1	Differential-Algebra-Gleichungen (DAE)	10
2.1.1	Strukturelle DAE-Formen	12
2.1.2	Index von Systemen in DAE-Form	13
2.1.3	Systeme mit höherem Index und zugehöriges erweitertes System . .	18
2.1.4	Konsistente Anfangsbedingungen, Freiheitsgrad und Lösbarkeit . .	19
2.1.5	Beispiele für Modelle in DAE-Form	22
2.2	Modellformulierung in DIVA	27
2.3	Berechnung konsistenter Anfangsbedingungen	29
2.4	Simulationsaufgaben in DIVA	30
2.5	Simulationsstrategie	31
2.6	Numerische Methoden	32
2.6.1	Implizite Runge-Kutta-Verfahren (IRK-Verfahren)	33
2.6.2	Lösungsdarstellung für Runge-Kutta-Verfahren (DENSE OUTPUT)	36
2.6.3	Lösung nichtlinearer Gleichungssysteme	37
2.6.4	Behandlung von Unstetigkeiten mit Runge-Kutta-Verfahren	38
2.7	DIVA-Struktur für Simulationsaufgaben	40
2.8	Erweiterung der Struktur für Optimierungsaufgaben	41

3	Parameterschätzung von nichtlinearen dynamischen Systemen	43
3.1	Zielfunktion für das Schätzverfahren	45
3.2	Die Fisher-Informationsmatrix	46
3.3	Der Parameterraum	49
3.4	Parameteranalyse und -schätzfehler	52
3.5	Methode der kombinierten Analyse und Schätzung	58
3.6	Numerische Methode	62
3.6.1	Numerische Verfahren zur Berechnung von Sensitivitäten	63
3.6.2	Optimierungsverfahren	70
3.7	Untersuchungen an einem Testbeispiel	72
3.8	Chemisches Reaktionssystem	82
4	Versuchsplanung	90
4.1	Zielfunktion mit Beschränkungen	90
4.2	Numerische Methode	93
4.3	Untersuchungen an einem Testbeispiel	95
4.4	Fed-Batch-Fermentationsprozeß	99
5	Trajektorienoptimierung	113
5.1	Formulierung der Zielfunktion mit Beschränkungen	113
5.2	Parametrisierung der Steuerfunktionen	115
5.3	Berechnung von zeitoptimalen Steuerungen	116
5.4	Optimale Stützstellenverteilung	118
5.5	Sensitivitätsanalyse	119
5.6	Numerische Methode	124
5.7	Anwendung der Trajektorienoptimierung unter Realzeitbedingungen	126
6	Zusammenfassung	134

VII

A Programmstruktur der Simulationsumgebung	136
B Methode der sequentiellen quadratischen Programmierung	138
C Übersicht der Versuche mit <i>Streptomyces tendae</i>	140
D DIVA-Befehle für Optimierungsaufgaben	141
Literaturverzeichnis	143