

Zusammenfassung

Veränderungen auf den Energie- und Rohstoffmärkten führen zu Schwankungen bei der Versorgung mit Rohmaterial und elektrischer Energie. So sind beispielsweise Demand-Response-Mechanismen eine Reaktion auf Schwankungen der Strompreise und zur Stabilisierung des Stromnetzes notwendig. Diese Schwankungen sind auch für die chemische Industrie von Bedeutung, da sie einen dynamischeren Betrieb von chemischen Prozessen erfordern, die traditionell in einem stationären Zustand betrieben werden. Um den dynamischen Betrieb zu unterstützen und aufrechtzuerhalten, werden zunehmend Methoden der Advanced Process Control benötigt und eine robuste Planung des Betriebs wird notwendig. Für beides sind ausreichend genaue Modelle erforderlich, um die Leistungsfähigkeit chemischer Prozesse vorherzusagen.

Im Hinblick auf den dynamischen Betrieb umfasst dies die Formulierung druckgetriebener, dynamischer Modelle, die vom kalten und leeren Anfahren bis zum Abfahren gültig sind. Es werden Modellierungssysteme benötigt, die solche komplexen Modellformulierungen vollständig unterstützen und hinsichtlich der numerischen Lösung und Optimierung solch komplexer nichtlinearer Systeme flexibel sind. Darüber hinaus ist die Echtzeitfähigkeit dieser Modelle für die Anwendung unerlässlich. Dementsprechend wird ein Konzept für adaptives Sampling und Training von Surrogatmodellen durch maschinelles Lernen vorgestellt, um schnelle, aber hochgenaue dynamische Surrogatmodelle zu erhalten. Zum ersten Mal wird ein Ersatzmodell für den gesamten Zyklus einer Batch-Destillation erstellt. Für die Produktionsplanung werden ähnlich schnelle Surrogatmodelle benötigt, die bestenfalls vollständig linear in ganzzahligen und kontinuierlichen Variablen sind. Hier wird eine Fortentwicklung von Convex-Region-Surrogatmodellen skizziert.

Abstract

Changes in the energy and resource markets cause variability in feed flows and electric power supply. For example, Demand Response mechanisms are a reaction to fluctuations in electricity prices and necessary stabilization of the electric grid. This variability is also of concern for the chemical industry as it implies more dynamic operation of chemical processes that traditionally operate at steady state. To support and sustain dynamic operation, methods from Advanced Process Control are increasingly required and scheduling to plan operation robustly becomes necessary. For both sufficiently accurate models are required to predict the performance of chemical processes.

Regarding dynamic operation, this includes the formulation of pressure-driven, dynamic models valid from cold and empty start-up until shutdown. Modeling frameworks become necessary, which fully support such complex model formulations and are flexible regarding numerical solution and optimization of such complex nonlinear systems. Furthermore, real-time capabilities of these models are essential for application. Accordingly, a framework for adaptive sampling and training of surrogate models from machine learning is presented to obtain fast, but highly accurate dynamic surrogate models. As a first, a surrogate of a batch distillation's full cycle is obtained. Regarding scheduling, similarly lean surrogate models are required, which at best are fully linear in integer and continuous variables. Here a further evolution of convex region surrogate models is outlined.