

## 271. Dynamische Programmierung in der chemischen Technik Die Optimierung chemischer Reaktionsausbeuten<sup>1)</sup>

von W. F. Grütter und B. H. Messikommer

(3. XI. 60)

Die Zunahme der Komplexität der Probleme, denen heute der Chemie-Ingenieur gegenübersteht, erfordert gebieterisch den Ausbau systematischer Lösungsmethoden. Da zu einem Problem meist viele Lösungen denkbar sind, ist es erwünscht, die beste davon zu erkennen und zu verwerten. Aus diesem Grunde formuliert man mit Vorteil die Probleme als Optimalprobleme, deren Zielfunktionen aus wirtschaftlich-technischen Gründen fast immer klar vorliegen.

Im Verlauf unserer Suche nach allgemein verwendbaren Methoden zur Optimierung chemischer Reaktoren sind wir auf die Theorie der dynamischen Programmierung gestossen, die von BELLMAN<sup>2)</sup> für die Zwecke der Unternehmensforschung (operations research) in den letzten zehn Jahren entwickelt wurde. Das Wesen dieser sogenannten dynamischen Programmierung tritt eher zu Tage, wenn wir sie etwas umständlich die Theorie der Optimierung N-stufiger Entscheidungsprozesse nennen. Ihr Kalkül beruht auf dem Optimalitätsprinzip, welches sich nach BELLMAN wie folgt formulieren lässt: Eine optimale Politik hat die Eigenschaft, dass unabhängig vom Anfangszustand und von der ersten Entscheidung die verbleibenden Entscheidungen eine optimale Politik in bezug auf den Zustand bilden, der aus der ersten Entscheidung hervorgeht. FERSCHL<sup>3)</sup> hat dieses Prinzip eingehender beschrieben und erläutert.

Ohne eine umfassende, dafür abstrakte Formulierung der Optimierungsmethode zu geben, versuchen wir ihre Wesensart durch deren Anwendung an einem einfachen, übersichtlichen Beispiel darzulegen.

Eine Dimerisationsreaktion (in flüssiger Phase) sei im technischen Maßstab kontinuierlich durchzuführen. Aus hier nicht näher angeführten Gründen (vgl.<sup>4)</sup>) wird als Reaktorsystem eine *N*-stufige, isotherme Rührkesselkaskade in Betracht gezogen. Dabei hat es sich als zweckmäßig erwiesen, die Numerierung der einzelnen Kessel in der dem Materialfluss entgegengesetzten Richtung laufen zu lassen.

Die Stöchiometrie der irreversiblen Reaktion wird durch die Gleichung



beschrieben, währenddem die zugehörigen, kinetischen Verhältnisse durch das Zeitgesetz

$$\frac{dc_2}{dt} = kc_1^2$$

<sup>1)</sup> Vorgetragen am 24. 9. 60 an der Sommerversammlung der Schweiz. Chemischen Gesellschaft in Aarau.

<sup>2)</sup> R. BELLMAN, Dynamic Programming, Princeton University Press, 1957.

<sup>3)</sup> F. FERSCHL, Unternehmensforschung 3, 2, 70 (1959).

<sup>4)</sup> W. F. GRÜTTER & B. H. MESSIKOMMER, Second European Symposium on Chemical Reaction Engineering, Amsterdam 1960.

ausgedrückt werden. Wir setzen im weiteren voraus, dass die Einlaufkonzentration  $c_{1,N+1}$  des Stoffes  $A_1$  in den  $N$ -ten Kessel der Kaskade eine vorgegebene Grösse darstelle und dass die gesamte, mittlere Verweilzeit in der Kaskade

$$\tau = \sum_{i=1}^N \tau_i$$

ebenfalls festgehalten sei.

Das Ziel unserer Aufgabe ist bekannt: wir haben den Stoff  $A_2$  auf bestmögliche Art und Weise herzustellen. Präziser interpretiert bedeutet dies, dass der Prozess derart verlaufen soll, dass beispielsweise die Ausbeute oder (was hier praktisch dasselbe bedeutet) der Umsatz unter den gegebenen Umständen möglichst gross wird. Mögliche, äquivalente Zielfunktionen sind somit entweder

die Ausbeute

$$\Phi_N^* = (-c_{2,N+1} + c_{21})/c_{1,N+1}, \quad ^5)$$

der Umsatz

$$\mathfrak{R}_N = (c_{1,N+1} - c_{11})/c_{1,N+1},$$

oder der Konzentrationsabfall

$$\psi_N = c_{1,N+1} - c_{11}.$$

Im Zusammenhang mit der Optimierung stellt sich letzten Endes die wesentliche Frage, was für Freiheitsgrade das System überhaupt noch aufweist. Man erkennt, dass die Wahl der Politik der Aufteilung der gesamten Verweilzeit in die Verweilzeiten der einzelnen Kessel noch offen ist. Es ist deshalb sinnvoll, diejenige Verweilzeitpolitik auszusuchen, welche die obigen Zielfunktionen maximiert.

Wir sind nun damit in der Lage, unsere Aufgabe durch das folgende Optimalproblem auszudrücken:

$$\text{Gesucht } \begin{cases} 1. \text{ Max } \psi_N \\ (\tau) \\ 2. (\tau)^{opt} = (\tau_1^{opt}, \dots, \tau_N^{opt}) \end{cases}$$

Bevor wir zur Lösung übergehen, beschreiben wir mit Vorteil die Verhältnisse in dimensionsloser Form, zu welcher wir mit Hilfe der Transformationen

$$x_N = 2 k \tau c_{1N} \quad \text{und} \quad T_N = \tau_N/\tau$$

gelangen. Die modifizierte, zu maximierende Funktion nennen wir  $\Psi_N$  und bezeichnen ihren grössten Wert mit  $F_N$ .

Das Optimalproblem lautet jetzt:

$$\text{Gesucht } \begin{cases} 1. \text{ Max } \Psi_N = \text{Max}_{(T)} (x_{N+1} - x_1) = F_N \\ 2. (T)^{opt} \end{cases}$$

Die konventionelle Lösungsmethodik ist naheliegend; man ermittelt die Extremalbedingungen durch Differentiation. Der grosse Nachteil dieses Verfahrens ist allerdings der, dass die Dimensionalität direkt mit der Stufenzahl wächst. Im Gegensatz dazu wird bei der dynamischen Programmierung schrittweise vorgegangen.

Zur Erklärung betrachten wir zunächst die  $(N-1)$ -stufige Kaskade. Ihre Zielfunktion ist

$$\Psi_{N-1} = \Psi_{N-1}(x_N, T_{N-1}, \dots, T_1),$$

---

<sup>5)</sup> Nach unserer Definition in <sup>4)</sup>.

wobei die gesamte Verweilzeit  $T' = \sum_{i=1}^{N-1} T_i$  vorgegeben ist. Der Maximalwert  $F_{N-1}$  von  $\Psi_{N-1}$  hingegen hängt nur noch vom Einlaufzustand  $x_N$  und von  $T'$  ab:

$$F_{N-1} = F_{N-1}(x_N, T') .$$

Man fügt nun dieser ( $N-1$ )-stufigen Kaskade einen weiteren Kessel auf der Einlaufseite zu und betrachtet die so entstandene  $N$ -stufige Kaskade. Ihre Zielfunktion ist

$$\Psi_N = \Psi_N(x_{N+1}, T_N, T_{N-1}, \dots, T_1)$$

mit

$$\sum_{i=1}^N T_i = T = T' + T_N .$$

Betreibt man diese neue Kaskade so, dass die restliche, darin enthaltene ( $N-1$ )-stufige Kaskade immer optimal arbeitet, so ist

$$\Psi_N = x_{N+1} - x_N + F_{N-1}(x_N, T') ,$$

wobei  $x_N = x_N(x_{N+1}, T_N) = \frac{1}{2T_N} (-1 + \sqrt{1 + 4 T_N x_{N+1}})$ .

Man variiert nun die  $N$ -stufige Kaskade derart, dass man bei festgehaltener Einlaufbedingung  $x_{N+1}$  die Verweilzeit  $T_N$  und damit den Einlauf in die anschliessende ( $N-1$ )-stufige Kaskade ändert. Die verbleibende Verweilzeit  $T - T_N$  steht für die restlichen  $N-1$  Kessel zur Verfügung. Bei einem bestimmten Wert von  $T_N$  weist die  $N$ -stufige Kaskade den maximalen Konzentrationsabfall  $F_N$  auf.

In Formeln ausgedrückt lautet diese Maximierung:

$$F_N(x_{N+1}, T) = \max_{0 \leq T_N \leq T} \{x_{N+1} - x_N + F_{N-1}(x_N, T - T_N)\}; N \geq 2 .$$

Damit hat man eine Rekursionsformel gewonnen, welche die gewünschte schrittweise Optimierung gewährleistet. Das hochdimensionale Differentiationsverfahren ist durch  $N$  einfache, niederdimensionale Maximumprobleme ersetzt worden.

Zur numerischen Auswertung obiger Beziehung geht man von  $N = 2$  aus. Dazu benötigt man die Kenntnis von  $F_1$  für verschiedene Wertepaare  $(x_2, T)$ . Da  $\Psi_1$  bei vorgegebener Einlaufbedingung und vorgegebener Verweilzeit bereits eindeutig festgelegt ist, stellt  $F_1$  kein echtes Maximum dar und es gilt

$$F_1(x_2, T) = \Psi_1(x_2, T) .$$

$F_2$  selber wird wiederum für eine Reihe von Argumenten ermittelt. Dieses Vorgehen wiederholt man so oft, bis man sich auf die gewünschte Stufenzahl hinaufgerechnet hat.

Diese einfache, jedoch langwierige numerische Rechnung wurde auf einer elektronischen Rechenanlage vom Typ UCT der REMINGTON RAND CORP. durchgeführt. Der Wertevorrat der beiden Argumente  $x_{N+1}$  und  $T$  wurde in unserem Fall gemäss

$$\begin{aligned} 0 < x_{N+1} &\leq 2 \\ 0 < T &\leq 1 \end{aligned}$$

festgelegt. Da die Auswertung bis fünfzehn Stufen getrieben wurde, fielen also die Resultate in Form von fünfzehn zweidimensionalen  $F_N$ -Tabellen mit  $N = 1, \dots, 15$  an.

Zur numerischen Veranschaulichung haben wir in Tab. 1 einige Lösungen herausgegriffen, die den Bedingungen  $x_{N+1} = 2$  und  $T = 1$  entsprechen. Die darin angegebenen optimalen Umsätze  $\mathfrak{F}_N$  hängen nach Definition gemäss

$$\mathfrak{F}_N(x_{N+1}, T) = \frac{1}{x_{N+1}} \cdot F_N(x_{N+1}, T)$$

mit unseren  $F_N$ -Werten zusammen.

Tabelle 1. Optimaler Umsatz  $\mathfrak{F}_N(2; 1)$ 

$N$	1	3	5	7	9	11	13	15
$\mathfrak{F}_N(2; 1) [\%]$	50,00	58,72	62,29	63,47	64,17	64,62	64,92	65,20

Die grössten Umsatzzunahmen erscheinen, wie zu erwarten, bei niederen Kesselzahlen. Die Ausbeute einer 15-stufigen Kaskade ist gegenüber derjenigen eines einzelnen Rührkessels um 30% erhöht. Es sei darauf hingewiesen, dass ganz allgemein die bei der dynamischen Programmierung erhaltenen Resultate nicht nur Antwort auf einen bestimmten Einzelfall geben, sondern alle Lösungen in sich schliessen, die zum gewählten Wertevorrat der Argumente (hier  $N$ ,  $x_{N+1}$  und  $T$ ) gehören. Man gewinnt also ohne zusätzlichen Aufwand ein Bild über das Verhalten einer ganzen Problemklasse, ein Vorteil, der nicht zu unterschätzen ist.

Eine Diskussion der erhaltenen Resultate führt uns auf zwei Fragen, die von Interesse sind. In erster Linie möchten wir eine Abschätzung der Rechengenauigkeit der dynamischen Programmierung und in zweiter Linie die Abhängigkeit des Umsatzes von der Wahl der Verweilzeitpolitik kennen. Eine umfassende Antwort zur ersten Frage lässt sich kaum geben. Wir haben uns infolge des grossen Rechenaufwandes darauf beschränkt, die Verhältnisse bei einer bestimmten Zweier-Kaskade zu untersuchen. Die Resultate sind in Tab. 2 dargestellt.

Tabelle 2. Genauigkeit des dyn. Programmes

Beispiel:  $N = 2$ ,  $(x_3; T) = (2; 1)$

Optimierung	mittels Differentiation	mittels dyn. Progr. (UCT)
$\mathfrak{F}_2$	56,870%	56,875%
opt. Politik $\left\{ \begin{array}{l} T_1^{\text{opt}} \dots \\ T_2^{\text{opt}} \dots \end{array} \right.$	0,525 0,475	0,65 0,35

Während dem die Genauigkeit des Maximalwertes der Zielfunktion gut ist, sind die Abweichungen bei der zugehörigen optimalen Politik erheblich. Diese Feststellung lässt vermuten, dass der Umsatz einer Rührkesselkaskade für die angegebene Reaktion zweiter Ordnung recht unempfindlich von der Verweilzeitpolitik abhängt, ein Verhalten, das nicht zum vornherein zu erwarten war. Eine Bestätigung hierzu für  $x_{N+1}$ -Werte, die von der Größenordnung Eins oder sehr viel grösser als Eins sind, gibt Tab. 3.

Für  $x_{N+1} = 2$  wurde die gleichförmige Politik ( $T_i = 1/N$ ) mit der optimalen Politik verglichen; für  $x_{N+1} = 2 \cdot 10^4$  mit der Politik  $T_i = 2 T_{i+1}$ . Letztere entspricht der sogenannten DENBIGH'schen Approximation der Zweierkaskade<sup>6)</sup>. Diese Nähe-

<sup>6)</sup> K. G. DENBIGH, Trans. Faraday Soc. 40, 352 (1944).

rung beruht auf der Vernachlässigung von Eins gegenüber  $T_i x_i$  in den Stoffbilanzgleichungen

$$x_{i+1} = x_i (1 + T_i x_i), \quad i = 1, \dots, N.$$

Die Zahlenangaben der Tabelle zeigen deutlich, dass sowohl bei kleinen wie auch bei grossen Umsätzen eine Änderung der Politik nur einen geringen Einfluss hat.

Tabelle 3. Ausbeutevergleich von Kaskaden mit verschiedener Politik ( $T = 1$ )

$N$	$\mathfrak{F}_N(2)$ $T_i = T_i^{\text{opt}}$	$\mathfrak{R}_N(2)$ $T_i = 1/N$	$\mathfrak{R}_N(2 \cdot 10^4)$ $T_i = 2 T_{i+1}$	$\mathfrak{R}_N(2 \cdot 10^4)$ $T_i = 1/N$
1	50,00	50,00	99,30	99,30
2	56,88	56,83	99,91	99,91
3	59,73	59,67	99,97	99,96
4	61,31	61,24	99,98	99,98

In bezug auf die Produktivität, d. h. die Raum-Zeit-Ausbeute, treten dabei allerdings wesentlich grössere Unterschiede zu Tage. Es sei in diesem Zusammenhang erinnert, dass die Maximierung des Umsatzes bei vorgegebener Verweilzeit äquivalent der Minimierung der Verweilzeit, bzw. der Maximierung der Produktivität bei vorgegebenem Umsatz ist.

Da die Methode der dynamischen Programmierung erst seit einem Jahr etwa zur Behandlung von chemisch-technischen Aufgaben eingesetzt wird, sind erst wenige Anwendungsbeispiele bekannt geworden<sup>4)7)</sup>. Wir zweifeln jedoch nicht, dass sie sich in kurzer Zeit auf diesem Gebiete einen angemessenen Platz erobern wird.

#### SUMMARY

The growing complexity of the problems the chemical engineer faces nowadays calls ever more urgently for the development of systematic methods yielding not just a random solution, but the best possible or optimal one. Our endeavours to find an adequate tool for this purpose have drawn our attention to the theory of dynamic programming developed some years ago by BELLMAN in the field of operational research. In this paper the method is explained by means of an example: the optimization of a cascade of continuous, stirred tank reactors with respect to yield, achieved in our case by optimal distribution of the total residence time between the vessels.

CIBA AKTIENGESELLSCHAFT, Basel

---

<sup>7)</sup> R. ARIS, Chem. Eng. Sci. 12, 56 (1960); R. ARIS, D. F. RUDD, N. R. AMUNDSON, Chem. Eng. Sci. 12, 88 (1960).