

Inhalt

Symbolverzeichnis	iii
1 Einleitung und Problemstellung	1
2 Theoretische Grundlagen	9
2.1 Dynamische Systeme und Zustandsraumdarstellung	9
2.2 Numerische Integration von Anfangswertproblemen	11
2.2.1 Problemstellung	11
2.2.2 Explizite Verfahren	12
2.2.3 Implizite Verfahren	13
2.2.4 Stabilität und steife Systeme	13
2.3 Numerische Differentiation von Meßdaten	16
2.3.1 Problemstellung	16
2.3.2 Differenzenverfahren	17
2.3.3 Mehrpunktdifferenzen- und Faltungsverfahren	19
2.3.4 Differentiation mit Splines	26
2.4 Parameterverfolgung in dynamischen Systemen	29
2.4.1 Problemstellung	29
2.4.2 Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen	30
2.5 Prädiktion und Schranken des zukünftigen Systemzustands	35
2.5.1 Problemstellung	35
2.5.2 Das Prädiktionsverfahren	36
2.5.3 Nichtlineare Optimierung	38
2.6 Epoxidierung von Sojaöl mit Persäuren	41
3 Das Modellsystem: Epoxidation von Sojaöl im CSTR	45
3.1 Prozeßbeschreibung und Modellbildung	45
3.2 Bilanzgleichungen	51
3.2.1 Stoffmengenbilanzen	51
3.2.2 Wärmebilanzen	52
4 Parameterverfolgung am Modellsystem	53
4.1 Problemstellung	53

4.2	Existenz von Lösungen	54
4.3	Bestimmungsgleichungen	56
4.4	Realisierung	59
4.4.1	Simulation der Meßdaten	59
4.4.2	Glättung und Differentiation der Eingangsdaten	61
4.4.3	Verifikation von Zustand und Ableitungen	62
4.4.4	Bestimmung der Parameter	63
4.4.5	Parametereinfluß	64
4.5	Ergebnisse	67
4.5.1	Allgemeines	67
4.5.2	Voruntersuchungen unter Ausschluß von Meßfehlern	69
4.5.2.1	Parameterreproduktion	69
4.5.2.2	Parametereinfluß	73
4.5.3	Ergebnisse bei Anwesenheit von Meßfehlern	78
4.5.3.1	Parameter- und Zustandsreproduktion	78
4.5.3.2	Einfluß von Samplingintervall und Filterbreite	91
5	Realisierung der Prädiktion am Modellsystem	95
5.1	Problemstellung	95
5.2	Reduktion der Optimierungsprobleme	95
5.3	Numerische Optimierung	96
5.4	Numerische Integration	96
5.5	Ergebnisse	98
6	Zusammenfassung	103
A	Parameter für Simulationsrechnungen	107
B	Mathematischer Anhang	109
B.1	Die Identität $\psi_\sigma * \dot{f}(t) = \dot{\psi}_\sigma * f(t) = \frac{d}{dt}(\psi_\sigma * f)(t)$	109
B.2	Schranken, Supremum und Infimum	110
B.3	Beweis: $\underline{x}(t) \leq x(t) \leq \bar{x}(t)$ für alle t	111
C	Zur Realisierung der Parameterverfolgung	115
C.1	Existenz von Lösungen	115
C.2	Jacobimatrix des Modellsystems	118
D	Zur Realisierung der Prädiktion	121
D.1	Gradienten der Zielfunktionen	121
D.2	Variablen mit aktiven Nebenbedingungen	121
	Literaturverzeichnis	125