Projektübung

Die Projektübung soll die Beschäftigung mit grundlegenden Algorithmen der Vorlesung ermöglichen, und damit das Verständnis der Vorlesungsinhalte verbessern helfen. Die Lösung der Projektübung kann in Gruppen von 2 bis 3 Personen angefertigt werden, und ist bis zum 08.01.2015 per E-Mail an Holger Eisenschmidt zu senden (Kontaktdaten siehe unten). Das Bestehen der Projektübung ist Zulassungsbedingung für die Prüfung. Zum Bestehen der Projektübung werden mindestens 46 Punkte benötigt.

Aufgabe 1 – Multiple Choice Fragen (16P)

Bei den folgenden Aufgaben gibt es immer 4 mögliche Antworten. Die richtigen Antworten (minimal eine, maximal vier) sind anzukreuzen, und zählen dann mit jeweils einem Punkt. Nicht zutreffende Antworten werden nicht angekreuzt, und zählen dann auch mit jeweils einem Punkt. Wird keine Antwort angekreuzt, so wird die entsprechende Aufgabe als nicht bearbeitet betrachtet.

1.1) Welche Aussagen zu einem stationären Punkt x^* sind korrekt? (4P)

- ○ Ist $F_{xx}(x^*)$ positiv definit, dann liegt immer ein Maximum bei x^* vor
- ○ Der Gradient bei x^* ist immer gleich null.
- ○ Ist $F_{xx}(x^*)$ indefinit, dann liegt entweder ein Minimum oder ein Maximum bei x^* vor.
- ○ Ist $F_{xx}(x^*)$ negativ semidefinit, dann liegt entweder ein Minimum oder ein Sattelpunkt bei x^* vor.

1.2) Bei welchen dieser Optimierungsalgorithmen handelt es sich um Suchmethoden?

- ○ Steilster Abstieg
- ○ Simplex-Verfahren
- ○ Lagrangesche Interpolationsverfahren
- ○ Hermitesche Interpolationsverfahren

1.3) Welche dieser Verfahren besitzen eine Q_1-Eigenschaft? (4P)

- ○ Das Newton-Raphson Verfahren
- ○ Das Verfahren der konjugierten Gradienten
- ○ Das BFGS-Verfahren
- ○ Das Gauss-Newton-Verfahren

1.4) Welche Interpretationen des Gauss-Newton-Verfahrens sind korrekt? (4P)

- ○ Iterative Approximation der inversen Hesse-Matrix
- ○ Lineare Approximation des Modells/des Gleichungssystems
- ○ Quadratische Approximation der Zielfunktion
- ○ Anwendung der „Trust-Region" Methoden auf die Minimierung von Quadratsummen

Aufgabe 2 – Gradientenmethoden (10P)

2.1) Welche Bedingung muss eine Suchrichtung $v^{(k)}$ erfüllen? Formulieren Sie diese auch mathematisch, und zeigen Sie, dass diese bei der Methode des steilsten Abstiegs stets erfüllt ist! (4P)

2.2) Formulieren Sie das Unterproblem, welches in jeder Iteration gelöst werden muss, und geben Sie zwei Methoden an, mit dem dies geschehen kann. Kann das Simplex-Verfahren nach Nelder-Mead hierfür eingesetzt werden? Begründen Sie kurz! (6P)

Aufgabe 3 – Newton-Methoden (10P)

3.1) Geben Sie zwei äquivalente Interpretationen der grundlegenden Idee des Newton-Raphson-Verfahrens, sowie dessen Iterationsvorschrift an! (4P)

3.2) Nennen Sie drei wesentliche Schwierigkeiten, auf die man bei der Anwendung des Newton-Raphson-Verfahrens stoßen kann, und erläutern Sie, wie die Quasi-Newton hier Abhilfe schaffen! (6P)

Aufgabe 4 – Optimales Temperaturprofil eines PFTR Reaktors (56P)

In einem kontinuierlich durchströmten idealen Rohrreaktor soll ein Gasgemisch für den Betrieb einer PEM Brennstoffzelle aufgereinigt werden. Hierzu soll die sog. Wassergas-Shift Reaktion

$$\mathrm{CO} + \mathrm{H_2O} \leftrightarrow \mathrm{CO_2} + \mathrm{H_2} \tag{1}$$

ablaufen. Bei dieser Reaktion soll Kohlenmonoxid, welches für PEM Brennstoffzellen schädlich ist, abreagiert werden, und zusätzlich Wasserstoff für den Betrieb der Brennstoffzelle erzeugt werden. Die Reaktionsrate R dieser Reaktion lässt sich mit folgender Gleichung berechnen:

$$R = \frac{k}{p_{H_2}}\left(p_{\mathrm{CO}}p_{\mathrm{H_2O}} - \frac{p_{\mathrm{H_2}}p_{\mathrm{CO_2}}}{K_{\mathrm{eq}}}\right)\frac{1}{Q^2} \tag{2}$$

Hierbei bezeichnen die Größen p_i die Partialdrücke der Komponente i (i = CO, H_2O, CO_2, H_2), k die (temperaturabhängige) Geschwindigkeitskonstante

$$k = 1.955 \cdot 10^6 \exp\left(-\frac{67130\ \mathrm{J/mol}}{RT}\right) \tag{3}$$

und Q die Abhängigkeit der Reaktionsrate R von der Adsorption der Komponenten auf dem Katalysator.

$$Q = 1 + K_{\mathrm{CO}}p_{\mathrm{CO}} + K_{\mathrm{H_2}}p_{\mathrm{H_2}} + \frac{K_{\mathrm{H_2O}}p_{\mathrm{H_2O}}}{p_{\mathrm{H_2}}} \tag{4}$$

Hierbei können die (temperaturabhängigen) Adsorptionskonstanten wie folgt berechnet werden:

$$K_{\mathrm{CO}} = 8.23 \cdot 10^{-5} \exp\left(\frac{70650\ \mathrm{J/mol}}{RT}\right) \tag{5a}$$

$$K_{\mathrm{H_2}} = 6.12 \cdot 10^{-9} \exp\left(\frac{82900\ \mathrm{J/mol}}{RT}\right) \tag{5b}$$

$$K_{\mathrm{H_2O}} = 1.77 \cdot 10^{5} \exp\left(-\frac{88680\ \mathrm{J/mol}}{RT}\right) \tag{5c}$$

Die Temperaturabhängigkeit der Gleichgewichtskonstante K_{eq} lässt sich durch den folgenden Ansatz beschreiben:

$$K_{\mathrm{eq}} = 1.26 \cdot 10^{-2} \exp\left(\frac{4639}{T}\right) \tag{6}$$

Mit Hilfe der Reaktionsrate R, lassen sich dann die Konzentrationsverläufe über die Längenkoordinate x des Reaktors, der mit einer Geschwindigkeit von 1 m/s durchströmt wird, mit dem folgenden ODE-System berechnen:

$$\frac{dp_{\mathrm{CO}}}{dx} = -R \tag{7a}$$

$$\frac{dp_{H_2O}}{dx} = -R \tag{7b}$$

$$\frac{dp_{H_2}}{dx} = +R \tag{7c}$$

$$\frac{dp_{CO_2}}{dx} = +R \tag{7d}$$

4.1) Berechnen Sie die Konzentrationsverläufe, die sich aus dem ODE-System (7) ergeben, für einen Reaktor der Länge 50 m, der bei einer konstanten Temperatur von 400 K betrieben wird. Verwende hierzu die folgenden Anfangsbedingungen:

$$p_{CO}(x = 0) = 0.09 \text{ bar} \tag{8a}$$

$$p_{H_2O}(x = 0) = 0.23 \text{ bar} \tag{8b}$$

$$p_{H_2}(x = 0) = 0.41 \text{ bar} \tag{8c}$$

$$p_{CO_2}(x = 0) = 0.06 \text{ bar} \tag{8d}$$

Stellen Sie die Partialdruckverläufe graphisch dar, und bestimmen Sie den Partialdruck des Kohlenmonoxids am Reaktorausgang! (22P)

4.2) Zum Betrieb der Brennstoffzelle darf der Partialdruck des Kohlenmonoxids einen Maximalwert von $p_{\mathrm{CO,max}}$ = 0.015 bar nicht überschreiten. Bestimmen Sie die (konstante) Reaktortemperatur, bei der die Reaktorlänge minimal wird, und der Partialdruck des Kohlenmonoxids am Reaktoraustritt diesen Maximalwert nicht überschreitet! Geben Sie die ermittelte Temperatur, sowie die Reaktorlänge und den Kohlenmonoxid Partialdruck am Reaktoraustritt an! (16P)

4.3) Um die notwendige Reaktorlänge, und die damit verbundenen Investitionskosten, zu reduzieren soll der Rohrreaktor nicht mehr isotherm betrieben werden. Stattdessen soll das Temperaturprofil identifiziert werden, welches die Reaktorlänge, unter Einhaltung der Nebenbedingung aus Aufgabe 4.2, minimiert. Unterteilen Sie hierfür die (variable) Reaktorlänge in 8 gleich lange Abschnitte. Treffen Sie für jedes Reaktorsegment eine geeignete Annahme für das Temperaturprofil und bestimmen Sie darauf basierend den optimalen Temperaturverlauf sowie die minimale Reaktorlänge! Stellen Sie sowohl den optimalen Temperaturverlauf als auch die daraus resultierenden Partialdruckverläufe graphisch dar! (18P)