
OTTO-VON-GUERICKE-UNIVERSITÄT MAGDEBURG
Fakultät für Verfahrens- und Systemtechnik
Institut für Verfahrenstechnik
Lehrstuhl für Systemverfahrenstechnik
Prof. Dr.-Ing. habil. K. Sundmacher



Prozessdynamik

Vorlesungsmanuskript

Prof. Dr.-Ing. habil. Kai Sundmacher

Dr.-Ing. Peter Heidebrecht

Magdeburg, April 2005

Gliederung

1 Einführung	4
2 Bilanzgleichungen	5
3 Konstitutive Gleichungen	23
4 Allgemeine Form dynamischer Modelle	33
5 Numerische Simulation	37
6 Linearisierung nichtlinearer Modelle	44
7 Stabilität autonomer Systeme	52
8 Einführung der Laplace-Transformation	62
9 Übertragungsverhalten von SISO-Systemen erster Ordnung	73
10 Übertragungsverhalten von SISO-Systemen zweiter Ordnung	80
11 Übertragungsverhalten komplizierterer SISO-Systeme	84
12 Blockschaltbilder	95
13 MIMO-Systeme	100

Empfohlene Literatur

Prozessdynamik

- [1] B.W. Bequette, *Process Dynamics – Modeling, Analysis and Simulation*, Prentice Hall, New Jersey, 1998.
- [2] D.E. Seborg, T.F. Edgar, D.A. Mellichamp, *Process Dynamics and Control*, John Wiley & Sons, New York, 1989.
- [3] A. Varma, M. Morbidelli, *Mathematical Methods in Chemical Engineering*, Oxford University Press, New York, 1997.
- [4] W.E. Boyce, R.C. DiPrima, *Gewöhnliche Differentialgleichungen*, Spektrum Akademischer Verlag, Heidelberg, 5. Auflage, 1992.
- [5] B.A. Ogunnaike, W.H. Ray, *Process Dynamics, Modeling and Control*, Oxford University Press, New York, 1994.
- [6] W.L. Luyben, *Process Modeling, Simulation and Control for Chemical Engineers*, McGraw-Hill, New York, 1990.
- [7] G. H. Golub, J. M. Ortega, *Wissenschaftliches Rechnen und Differentialgleichungen: Eine Einführung in die Numerische Mathematik*, Berlin, Heldermann, 1995.

Simulation mit Matlab

- [8] C. Ueberhuber, S. Katzenbeisser, *MATLAB 6 : Eine Einführung*, Wien, Springer Verlag, 2000.
- [9] H. Benker, *Mathematik mit MATLAB : Eine Einführung für Ingenieure und Naturwissenschaftler*, Berlin, Springer, 2000.
- [10] J. Hoffmann, *MATLAB und SIMULINK: Beispielorientierte Einführung in die Simulation dynamischer Systeme*, Bonn, Addison-Wesley-Longman, 1998.
- [11] D. Hanselman, B. Littlefield, *Mastering MATLAB 5: A Comprehensive Tutorial and Reference*, Upper Saddle River, Prentice Hall, 1998.

Thermodynamische Grundlagen

- [12] K. Stephan, F. Mayinger, *Thermodynamik: Grundlagen und technische Anwendungen, Band 1: Einstoffsysteme, Bd. 2: Mehrstoffsysteme und chemische Reaktionen*, Berlin, Springer, 1986.
- [13] J. M. Smith, H. C. Van Ness, M. M. Abbott, *Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics*, New York, McGraw-Hill, 1996.

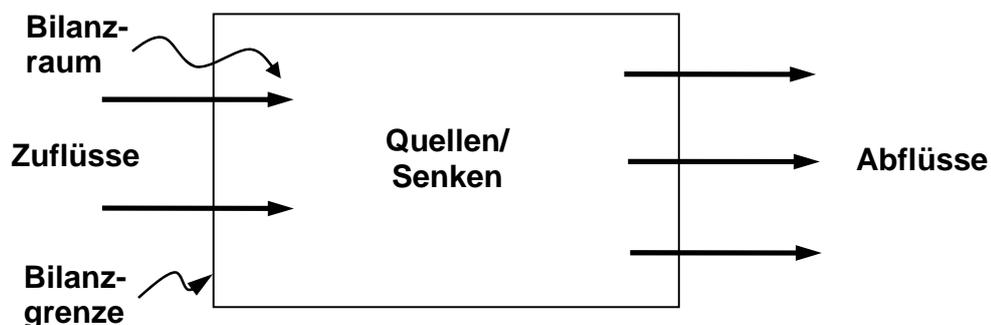
1 Einführung

- **Ziel:** Dynamisches Verhalten eines Stoffwandlungsprozesses verstehen, analysieren und beherrschen
- **Weg:**
 - 1) Formulierung eines Modells des betrachteten Prozesses. Dies ist eine abstrakte Wiedergabe des Prozessgeschehens in Form von mathematischen Gleichungssystemen (algebraische Gleichungen und/oder Differentialgleichungen). Das Modell berücksichtigt in der Regel nicht alle denkbaren, sondern nur die relevanten Einflüsse und naturwissenschaftlichen Phänomene, d.h. es enthält zweckmäßige Vereinfachungen.
 - 2) Das Prozessmodell wird für Analysezwecke in eine Standardform gebracht (Zustandsraummodell).
 - 3) Anwendung geeigneter Analyseverfahren, um die dynamischen Eigenschaften des Systems (z.B. Stabilität) zu untersuchen.
- Ein **Prozessmodell** besteht in der Regel aus
 - + Bilanzgleichungen für die Erhaltungsgrößen (Masse, Energie, Impuls),
 - + Kinetischen Beziehungen (Flüsse = Funktionen(Triebkräften)),
 - + Thermodynamischen Beziehungen (Zus.hänge zwischen extensiven, intensiven Zustandsgrößen; Gleichgewichtsbeziehungen).
- **Diese Vorlesung:**
 - + Betrachtung örtlich konzentrierter Prozesselemente (= ideal durchmischte Systeme), d.h. es existieren keine örtlichen Variationen der intensiven Zustandsgrößen im betrachteten System; Beispiel: perfekt durchmischter Rührkesselreaktor
 - + Örtlich verteilte Systeme können häufig als Netzwerke örtlich konzentrierter Systeme wiedergegeben werden; Beispiele: Rohrreaktor, Gegenstromwärmeübertrager

2 Bilanzgleichungen

2.1 Allgemeine Form einer Bilanz

- Diese Vorlesung beschränkt sich auf die Bilanzierung von Masse, Partialmassen und verschiedenen Energieformen (Gesamtenergie, Innere Energie, Enthalpie). Impuls, Drehimpuls und elektrische Ladung sind weitere Bilanzgrößen, die aber hier nicht betrachtet werden sollen.
- Um eine Bilanz formulieren zu können, muss zuerst der Bilanzraum festgelegt werden, d.h. die Systemgrenzen müssen fixiert werden. Zu diesem Zweck ist es nützlich, eine Skizze des Prozesses zu erstellen („Die Sprache des Ingenieurs ist die technische Zeichnung!“).
- Allgemeine Prozess-Skizze:



- Allen Bilanzgleichungen gemeinsam ist ihre prinzipielle Form, in welcher an einem betrachteten Bilanzraum die Zu- und Abflüsse einer Größe zuzüglich aller Quellen und Senken der Änderung dieser Größe im Volumen gegenübergestellt wird. Es werden also Ursache (Flüsse und Quellen/Senken) und Wirkung (Akkumulation der betrachteten Größe) gleichgesetzt.
- Allgemein lässt sich eine Bilanzgleichung für beliebige Größen so ausdrücken:

$$\text{Akkumulation} = \text{Zuflüsse} - \text{Abflüsse} \pm \text{Quellen/Senken} \quad (2.1)$$

- In (2.1) verstehen wir unter den Zu- und Abflüssen sämtliche Flüsse, welche die zu bilanzierende Größe über die Grenzen des Bilanzraums in das betrachtete System hinein- bzw. aus dem System herausbefördern.

- Quellen beschreiben die Veränderung der zu bilanzierenden Größe durch verschiedene physikalische und chemische Vorgänge im Volumen des Systems selbst.
- Senken sind Quellen mit negativem Vorzeichen.
- Unter der Akkumulation versteht man die Speicherung einer Bilanzgröße im betrachteten Bilanzraum während eines bestimmten Zeitintervalls.
- Bilanziert werden stets extensive Größen. Bilanzen in Termen intensiver Größen werden daraus abgeleitet.

2.2 Materialbilanzen

- Ausgangspunkt für die Formulierung aller Typen von Materialbilanzen (auch: Stoffbilanzen) ist das Erhaltungsprinzip für Masse.
- Es existieren mehrere Möglichkeiten, die Akkumulation von Materie in einem System zu beschreiben. Welche davon im konkreten Fall anzuwenden ist, hängt von der gegebenen Fragestellung und von den verfügbaren (Stoff-)Daten ab. So sind stoffmengenbezogene (molbezogene) Größen für den chemischen Reaktionstechniker relevant, während den Strömungsmechaniker oder den mechanischen Verfahrenstechniker eher die massebezogenen Größen interessieren. In manchen Fällen sind volumenbezogene Größen sinnvoll.

2.2.1 Maße für Konzentrationen und Materialflüsse

- Zur Umrechnung extensiver Größen in intensive Materialzustandsgrößen, die in der Prozessmodellierung bevorzugt verwendet werden, dient die folgende Tabelle:

Größe	Volumen V_α	Masse m_α	Menge n_α
Bezugsgröße			
Volumen $V (m^3)$	$V_\alpha/V=r_\alpha$	$m_\alpha/V=\rho_\alpha$	$n_\alpha/V=c_\alpha$
Masse $m (kg)$	V_α/m	$m_\alpha/m=w_\alpha$	n_α/m
Menge $n (mol)$	V_α/n	m_α/n	$n_\alpha/n=x_\alpha$

Verwendete Symbole:

V_α	Volumen der Komponente α	m^3
V	Gesamtvolumen	m^3
r_α	Raumanteil/Volumenanteil der Komponente α	$m^3 \cdot m^{-3}$
n_α	Molmenge der Komponente α	mol
n	Gesamtmolmenge	mol
x_α	Molenbruch der Komponente α	$mol \cdot mol^{-1}$
c_α	(Molare) Konzentration der Komponente α	$mol \cdot m^{-3}$
m_α	Masse der Komponente α	kg
m	Gesamtmasse	kg
w_α	Massenbruch der Komponente α	$kg \cdot kg^{-1}$
ρ_α	(Massen-)Dichte der Komponente α	$kg \cdot m^{-3}$
α	Index zur Bezeichnung einer chem. Komponente	-

In ähnlicher Vielfalt lassen sich Materialströme in verschiedenen physikalischen Einheiten darstellen (siehe folgende Tabelle):

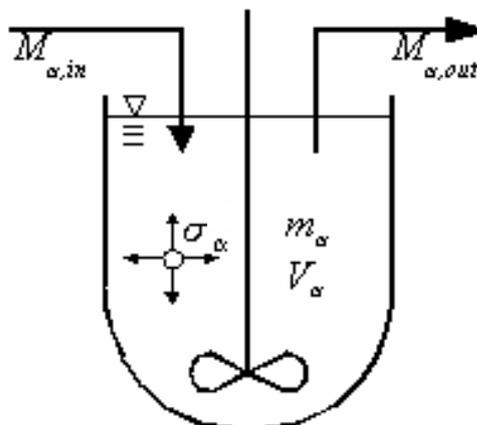
Fluss Bezugsfluss	Volumenstrom der Komp., F_α	Massenstrom der Komp., M_α	Mengenstrom der Komp., G_α
Volumenstrom $F [m^3/s]$	$F_\alpha = F \cdot r_\alpha$	$M_\alpha = F \cdot \rho_\alpha$	$G_\alpha = F \cdot c_\alpha$
Massenstrom $M [kg/s]$	$F_\alpha = M_\alpha \cdot \frac{r_\alpha}{\rho_\alpha} = M \cdot \frac{w_\alpha r_\alpha}{\rho_\alpha}$	$M_\alpha = M \cdot w_\alpha$	$G_\alpha = \frac{M_\alpha}{\bar{M}_\alpha} = M \cdot \frac{w_\alpha}{\bar{M}_\alpha}$
Stoffmengenstrom $G [mol/s]$	$F_\alpha = G_\alpha \cdot \frac{r_\alpha}{c_\alpha}$	$M_\alpha = G_\alpha \cdot \bar{M}_\alpha$ $= G \cdot x_\alpha \cdot \bar{M}_\alpha$	$G_\alpha = G \cdot x_\alpha$

Verwendete Symbole:

F	(Gesamt-)Volumenstrom	$m^3 \cdot s^{-1}$
M	(Gesamt-)Massenstrom	$kg \cdot s^{-1}$
G	(Gesamt-)Molenstrom	$mol \cdot s^{-1}$
F_α	Volumenstrom der Komponente α	$m^3 \cdot s^{-1}$
M_α	Massenstrom der Komponente α	$kg \cdot s^{-1}$
G_α	Molarer Stoffstrom der Komponente α	$mol \cdot s^{-1}$
\bar{M}_α	Molmasse der Komponente α	$kg \cdot mol^{-1}$

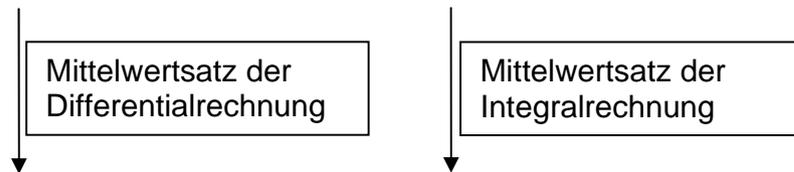
2.2.2 Massenbilanzen

- Die Gesamtmasse m eines Systems ist eine Erhaltungsgröße. Gesamtmasse kann nicht erzeugt oder verbraucht werden (d.h., es existieren keine Quellen/Senken für die Gesamtmasse).
- Die Partialmasse m_α bezieht sich dagegen auf eine bestimmte Komponente (oft auch „Spezies“ genannt).
- Für die Bilanz der Partialmasse gilt das Erhaltungsprinzip nicht, da sich die Masse einer Komponente α infolge chemischer Reaktionen verändern kann, d.h. es existieren Quellen/Senken.
- Anhand der folgenden Abbildung wird die partielle Massenbilanz für ein örtlich konzentriertes System (idealer Rührkesselreaktor) aufgestellt. Der Reaktor habe einen Zulaufstrom $M_{\alpha,in}$ und einen Ablaufstrom $M_{\alpha,out}$.



- **Ausgangspunkt: Integrale partielle Massenbilanz** über den Zeitraum Δt :

$$\underbrace{m_\alpha(t^* + \Delta t) - m_\alpha(t^*)}_{\text{Mittelwertsatz der Differentialrechnung}} = \underbrace{\int_{t^*}^{t^* + \Delta t} (M_{\alpha, in} - M_{\alpha, out} + V \cdot \sigma_\alpha) dt}_{\text{Mittelwertsatz der Integralrechnung}} \quad (2.2)$$



$$\left. \frac{dm_\alpha}{dt} \right|_{t^* + a \cdot \Delta t} \cdot \Delta t = (M_{\alpha, in} - M_{\alpha, out} + V \cdot \sigma_\alpha) \Big|_{t^* + b \cdot \Delta t} \cdot \Delta t \quad (2.3)$$

$$0 < a < 1$$

$$0 < b < 1$$

- Daraus folgt nach dem Grenzübergang $\Delta t \rightarrow 0$ folgende **differentielle partielle Massenbilanz**, die zu jedem beliebigen Zeitpunkt t gilt:

$$\boxed{\frac{dm_\alpha}{dt} = M_{\alpha, in} - M_{\alpha, out} + V \cdot \sigma_\alpha} \quad (2.4)$$

Verwendete Symbole:

m_α	Masse der Komponente α im Bilanzraum	kg
$M_{\alpha, in}$	Zulaufender Massenstrom der Komponente α	kg·s ⁻¹
$M_{\alpha, out}$	Ablaufender Massenstrom der Komponente α	kg·s ⁻¹
σ_α	Massenquellendichte der Komponente α	kg·m ⁻³ ·s ⁻¹

Die **differentielle totale Massenbilanz** ergibt sich aus der Addition der partiellen Bilanzen aller Komponenten:

$$\boxed{\frac{dm}{dt} = M_{in} - M_{out}} \quad (2.5)$$

Verwendete Symbole:

m	Gesamtmasse im Bilanzraum	kg
M_{in}	Zulaufender Massenstrom	kg·s ⁻¹
M_{out}	Ablaufender Massenstrom	kg·s ⁻¹

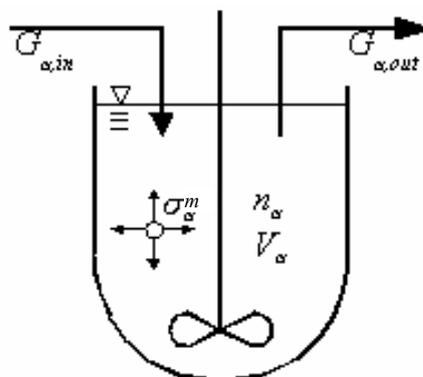
- Das Erhaltungsprinzip für die Gesamtmasse äußert sich darin, dass der Quellterm in der totalen Massenbilanz verschwindet. Da sich die Gesamtmasse aller Komponenten durch eine chemische Reaktion nicht ändern kann, ist die Summe der massenbezogenen Quellen aller Komponenten σ gleich Null:

$$\sigma = \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha} = 0 \quad (2.6)$$

- Treten mehrere Zuflüsse und/oder Abflüsse an den Systemgrenzen auf, so ist über diese Flüsse zu summieren. Die Gleichungen (2.4) und (2.5) gelten dann analog.

2.2.3 Stoffmengenbilanzen

- Stoffmengenbilanzen beschreiben die Änderungen der in einem System befindlichen Molmengen. Sie werden bevorzugt in chemisch reagierenden Systemen verwendet. Dabei wird zwischen stoffspezifischen (partiellen) Stoffmengenbilanzen und einer alle Stoffe umfassenden Gesamtstoffmengenbilanz unterschieden. Als Beispiel wird hier wieder ein idealer Rührkesselreaktor mit einem Zu- und einem Ablauf betrachtet.



- Die Änderung der Stoffmenge der Komponente α im Reaktor, n_{α} , wird durch die partielle Stoffmengenbilanz beschrieben. Ursachen für diese Änderung sind die Stoffströme, G_{α} , sowie chemische Reaktionen, durch die Stoffe erzeugt oder verbraucht werden.
- Letzteres wird als Quellterm in Form einer molaren Quelldichte σ_{α}^m berücksichtigt.

- Damit lautet die **partielle Stoffmengenbilanz**:

$$\boxed{\frac{dn_{\alpha}}{dt} = G_{\alpha,in} - G_{\alpha,out} + V \cdot \sigma_{\alpha}^m} \quad (2.7)$$

- Der Zusammenhang zwischen der molaren Quelldichte in (2.7) und der massenbezogenen Quelldichte in (2.4) ist gegeben durch:

$$\sigma_{\alpha}^m \cdot \bar{M}_{\alpha} = \sigma_{\alpha} \quad (2.8)$$

Verwendete Symbole:

n_{α}	Stoffmenge der Komponente α im Bilanzraum	<i>mol</i>
$G_{\alpha,in}$	Molarer Zulaufstrom der Komponente α	<i>mol·s⁻¹</i>
$G_{\alpha,out}$	Molarer Ablaufstrom der Komponente α	<i>mol·s⁻¹</i>
σ_{α}^m	Molare Quelldichte der Komponente α	<i>mol·m⁻³·s⁻¹</i>
\bar{M}_{α}	Molmasse der Komponente α	<i>kg·mol⁻¹</i>

- Die totale Stoffmenge n ergibt sich aus der Addition der Molmengen aller Komponenten n_{α} :

$$n = \sum_{\alpha} n_{\alpha} \quad (2.9)$$

- Für die totalen Stoffströme in [mol/s] gilt

$$G_{in} = \sum_{\alpha} G_{\alpha,in} \quad (2.10a)$$

$$G_{out} = \sum_{\alpha} G_{\alpha,out} \quad (2.10b)$$

und für die gesamte molare Stoffmengenquelldichte [mol·m⁻³·s⁻¹] gilt:

$$\sigma^m = \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha}^m \quad (2.11)$$

- Damit ergibt sich die folgende **totale Stoffmengenbilanz**:

$$\boxed{\frac{dn}{dt} = G_{in} - G_{out} + V \cdot \sigma^m} \quad (2.12)$$

- Bei einem System mit mehreren Zu- und Abläufen werden die Stoffströme summiert (analog gilt dies auch für die Massenbilanzen!):

$$\frac{dn_\alpha}{dt} = \sum_k G_{\alpha,in}^{(k)} - \sum_l G_{\alpha,out}^{(l)} + V \cdot \sigma_\alpha^m \quad (2.13)$$

$$\frac{dn}{dt} = \sum_k G_{in}^{(k)} - \sum_l G_{out}^{(l)} + V \cdot \sigma^m \quad (2.14)$$

2.2.4 Abgeleitete Gleichungen

- Die bisher vorgestellten Bilanzen beschreiben die Dynamik extensiver Stoffmengen in massenbezogenen oder molaren Einheiten. Extensive Variable sind der absoluten Größe des Systems proportional.
- Oftmals ist aber eine Zustandsbeschreibung in intensiven Größen zweckmäßiger. Daher werden im Folgenden aus den Bilanzgleichungen dynamische Modellgleichungen in Termen des Molenbruchs bzw. der molaren Konzentration einer Komponente abgeleitet.

2.2.4.1 Molenbruch

- Der Molenbruch der Komponente α ist definiert als das Verhältnis der Molmenge dieser Komponente in einer Phase des Bilanzraums zur Gesamtstoffmenge dieser Phase:

$$x_\alpha = \frac{n_\alpha}{n} \quad (2.15)$$

- Gesucht ist die Differentialgleichung, die die zeitliche Änderung des Molenbruchs im Bilanzraum beschreibt. Zu diesem Zweck wird zunächst die zeitliche Ableitung des Molenbruchs, (2.15), gebildet:

$$\begin{aligned}\frac{dx_\alpha}{dt} &= \frac{d}{dt} \left(\frac{n_\alpha}{n} \right) = \frac{1}{n} \cdot \frac{dn_\alpha}{dt} + n_\alpha \cdot \frac{d(1/n)}{dt} = \\ &= \frac{1}{n} \cdot \frac{dn_\alpha}{dt} - \frac{n_\alpha}{n^2} \cdot \frac{dn}{dt} = \frac{1}{n} \cdot \left(\frac{dn_\alpha}{dt} - x_\alpha \cdot \frac{dn}{dt} \right)\end{aligned}\quad (2.16)$$

- In (2.16) werden die partielle und die totale Stoffbilanz, (2.7) bzw. (2.12), eingesetzt. Dann erhält man die gesuchte Gleichung in Termen des Molenbruchs x_α :

$$\boxed{\frac{dx_\alpha}{dt} = \frac{G_{in}}{n} (x_{\alpha,in} - x_\alpha) + \frac{V}{n} \cdot (\sigma_\alpha^m - x_\alpha \cdot \sigma^m)}\quad (2.17)$$

2.2.4.2 Molare Konzentration

- Die molare Konzentration einer Komponente α ist definiert als die Stoffmenge dieser Komponente n_α bezogen auf das Gesamtvolumen der Phase V , in der sich diese Komponente befindet:

$$c_\alpha = \frac{n_\alpha}{V}\quad (2.18)$$

- Die Ableitung von (2.18) nach der Zeit ergibt:

$$\begin{aligned}\frac{dc_\alpha}{dt} &= \frac{d}{dt} \left(\frac{n_\alpha}{V} \right) = \frac{1}{V} \cdot \frac{dn_\alpha}{dt} + n_\alpha \cdot \frac{dV^{-1}}{dt} = \\ &= \frac{1}{V} \cdot \frac{dn_\alpha}{dt} - \frac{n_\alpha}{V^2} \cdot \frac{dV}{dt} = \frac{1}{V} \cdot \left(\frac{dn_\alpha}{dt} - c_\alpha \cdot \frac{dV}{dt} \right)\end{aligned}\quad (2.19)$$

- Einsetzen der partiellen Stoffmengenbilanz (2.7) in (2.19) liefert:

$$V \cdot \frac{dc_\alpha}{dt} = (G_{\alpha,in} - G_{\alpha,out} + V \cdot \sigma_\alpha^m) - c_\alpha \cdot \frac{dV}{dt}\quad (2.20)$$

- Die Molmengenströme G in (2.20) werden zweckmäßigerweise über die Volumenströme F ausgedrückt. Mit

$$G_{\alpha,in} = F_{in} \cdot c_{\alpha,in} \quad ; \quad G_{\alpha,out} = F_{out} \cdot c_{\alpha,out}\quad (2.21)$$

folgt wegen $c_{\alpha,out} = c_\alpha$:

$$\boxed{V \cdot \frac{dc_\alpha}{dt} = (F_{in} \cdot c_{\alpha,in} - F \cdot c_\alpha + V \cdot \sigma_\alpha^m) - c_\alpha \cdot \frac{dV}{dt}} \quad (2.22)$$

- Für den (häufig vorkommenden) Sonderfall, dass das Gesamtvolumen des betrachteten Systems sich zeitlich nicht verändert ($dV/dt = 0$), folgt aus (2.22):

$$V \cdot \frac{dc_\alpha}{dt} = F_{in} \cdot c_{\alpha,in} - F \cdot c_\alpha + V \cdot \sigma_\alpha^m, \text{ falls } V = \text{const.} \quad (2.23)$$

- Wenn das Volumen V dagegen zeitlich variiert, muss eine **Volumenbilanz** aufgestellt werden, um (2.22) lösen zu können. Dabei ist zu berücksichtigen, dass das Volumen V von den Stoffmengen n_α , dem Gesamtdruck p und der Temperatur T abhängig ist:

$$V = V(n_\alpha, p, T) \quad (2.24)$$

- Die zeitliche Ableitung des Volumens nach der Zeit ist

$$\frac{dV}{dt} = \sum_\alpha \left(\frac{\partial V}{\partial n_\alpha} \right) \cdot \frac{dn_\alpha}{dt} + \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right) \cdot \frac{dp}{dt} + \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right) \cdot \frac{dT}{dt}, \quad (2.25)$$

wobei die partiellen Differentiale bezeichnet werden als:

$$v_\alpha = \left(\frac{\partial V}{\partial n_\alpha} \right) \quad \text{partielles molares Volumen bzgl. der Komp. } \alpha \quad (2.26a)$$

$$\left(\frac{\partial V}{\partial p} \right) \quad \text{Kompressibilität} \quad (2.26b)$$

$$\left(\frac{\partial V}{\partial T} \right) \quad \text{thermischer Expansionskoeffizient} \quad (2.26c)$$

- Falls isotherme und isobare Bedingungen vorliegen, gilt $dp=0$, $dT=0$. Dann folgt für die Volumenänderung

$$\frac{dV}{dt} = \sum_\alpha v_\alpha \frac{dn_\alpha}{dt} = \sum_\alpha v_\alpha \cdot (F_{in} c_{\alpha,in} - F c_\alpha + V \cdot \sigma_\alpha^m) \quad (2.27)$$

- Falls das molare Volumen aller Stoffe in einer Mischung gleich ist (z.B. bei einer Mischung idealer Gase), gilt $v_\alpha = v$ und dann folgt aus (2.27):

$$\frac{dV}{dt} = \sum_{\alpha} v \cdot (F_{in} c_{\alpha, in} - F c_{\alpha} + V \cdot \sigma_{\alpha}^m) = v \cdot (F_{in} c_{t, in} - F c_t + V \cdot \sigma^m) \quad (2.28)$$

- Das molare Volumen v der Mischung ist gerade der Kehrwert der totalen molaren Konzentration c_t , d.h. $v = 1/c_t$. Damit folgt aus (2.28) die Volumenbilanz (falls $dT=0$, $dp=0$):

$$\boxed{\frac{dV}{dt} = F_{in} \frac{c_{t, in}}{c_t} - F + \frac{V}{c_t} \cdot \sigma^m \quad \xrightarrow{\text{falls } c_{t, in} = c_t} \quad \frac{dV}{dt} = F_{in} - F + \frac{V}{c_t} \cdot \sigma^m} \quad (2.29)$$

2.3 Energiebilanzen

- Energiebilanzen sind wesentlicher Bestandteil von Prozessmodellen in zahlreichen Zweigen der Verfahrenstechnik.
- Wie aus der Thermodynamik bekannt, werden je nach Aufgabenstellung und Zweckmäßigkeit unterschiedliche Energiemaße verwendet. Von Bedeutung sind insbesondere die Gesamtenergie E , die innere Energie U und die Enthalpie H .
- Nur für die Gesamtenergie E gilt das physikalische Erhaltungsprinzip. Daher wird diese Bilanz als Ausgangspunkt für die Herleitung der anderen Energiebilanzen gewählt.
- Wir formulieren die Energiebilanzen in massenbezogenen Größen. Es bleibt dem Anwender dieser Gleichungen überlassen, diese in eine andere, auf seine Anwendung zugeschnittene Form umzugestalten.

2.3.1 Bilanz der Gesamtenergie

- Die zeitliche Änderung der Gesamtenergie E in einem beliebigen, örtlich konzentrierten, technischen System wird durch einen Akkumulationsterm erfasst, dem mehrere Terme gegenüberstehen, die die Ursachen für diese Änderung beschreiben:

$$\frac{dE}{dt} = \sum \text{Ursachen} \quad ; \quad \text{Einheit} : [\text{J/s}] = [\text{W}] \quad (2.30)$$

- Die **Ursachen** für die Änderung der Gesamtenergie lassen sich in drei Kategorien einteilen:

- (1) Zu- und Abfuhr von Energie infolge von (konvektiven = mitführenden) Materialflüssen, die die Systemgrenze überschreiten;
- (2) Wärme, die dem Bilanzvolumen von der Umgebung zugeführt wird, oder in die Umgebung abgeführt wird;
- (3) Kräfte, die an dem Fluid des Bilanzvolumens Arbeit verrichten.

- Im folgenden werden diese drei Ursachen näher ausgeführt:

ad (1): Energieeintrag durch konvektiven Zulauf und Energieaustrag durch konvektiven Ablauf:

$$+ F_{in} \cdot \rho_{in} \cdot e_{in} - F_{out} \cdot \rho_{out} \cdot e_{out} \quad \text{in [J/s]} \quad (2.30)$$

mit e_{in} und e_{out} als spezifische massenbezogene Gesamtenergien, [J/kg], im Zulauf bzw. im Ablauf.

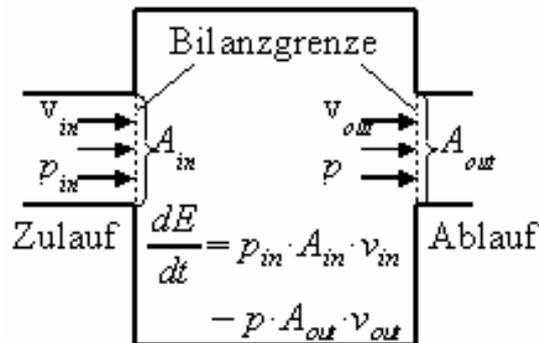
ad (2): Zufuhr von Energie mit einem Wärmefluss Q , in [W]. Dies geschieht nicht materialgebunden, d.h. ohne dass Materialströme über die Bilanzgrenzen fließen.

ad (3):

(a) Arbeit von Kräften, die an der Oberfläche des Bilanzraumes verrichtet werden. Hier treten nochmals die konvektiven Zu- und Abflüsse auf. Da die Materialströme des Zu- und Ablaufs über die Bilanzgrenze gegen einen bestimmten statischen Druck p [Pa] transportiert werden, verrichten diese Kräfte pro Zeiteinheit folgende Arbeit am Bilanzvolumen:

$$+ F_{in} \cdot p_{in} - F_{out} \cdot p_{out} \quad \text{in [J/s]} \quad (2.31)$$

Für den häufig auftretenden Spezialfall, in dem ein- und austretender Volumenstrom gleich groß sind und kein Druckunterschied zwischen Zu- und Ablauf besteht, heben sich diese Terme gegenseitig auf.



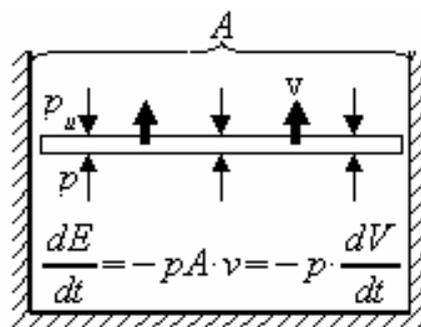
In (2.31) kann man das Produkt (Volumenstrom $F \cdot$ Druck p) auch schreiben als (Fläche $A \cdot$ Geschwindigkeit $v \cdot$ Druck p). Daraus folgt:

$$+ A_{in} \cdot p_{in} \cdot v_{in} - A_{out} \cdot p_{out} \cdot v_{out} \quad \text{in [J/s]} \quad (2.32)$$

(b) Volumenänderungsarbeit tritt zum Beispiel an einem Kolben auf, der sich in einem Zylinder bewegt. Das Bilanzvolumen ist dann zeitlich nicht konstant. Ändert es sich, so wollen wir annehmen, daß dies gegen einen Außendruck geschieht, der praktisch genauso groß ist wie der Druck im Bilanzvolumen selbst (reversible Volumenänderung). Die von der Umgebung am Bilanzvolumen pro Zeiteinheit verrichtete Arbeit bei einer Kompression bzw. die vom Bilanzvolumen an der Umgebung pro Zeiteinheit verrichtete Arbeit im Falle einer Expansion beträgt:

$$- p \cdot \frac{dV}{dt} \quad (2.33)$$

(2.33) entspricht der bekannten Definition der mechanischen Arbeit als "Kraft mal Weg", wobei über die gesamte Bilanzgrenze integriert wird.

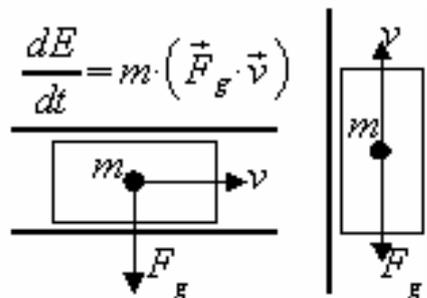


(c) Arbeit von Kräften, die auf die im Volumen befindlichen Massen wirken. Diese Volumenkräfte sind zum Beispiel die Schwerkraft, die Fliehkraft in einem rotierenden System oder die elektrische Kraft, die ein äußeres elektrisches Feld auf geladene Teilchen im Bilanzvolumen ausübt. Wir beschreiben die massenbezogene Kraft mittels eines Vektors. Um den Schwerpunkt der Masse im Bilanzvolumen entgegen dieser Kräfte zu bewegen, gibt das System Energie ab, bewegt er sich hingegen entlang dieser Kräfte, so nimmt die Gesamtenergie zu:

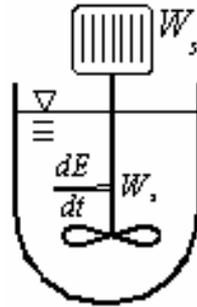
$$\sum_{\alpha} m_{\alpha} \cdot (\vec{f}_{\alpha} \cdot \vec{v}) \quad (2.34)$$

m_{α}	Masse der Komponente α im Bilanzvolumen	kg
\vec{f}_{α}	Vektor der massenspezifischen Volumenkräfte auf die Komponente α	$N \cdot kg^{-1}$
\vec{v}	Vektor der Massenschwerpunktsgeschwindigkeit	$m \cdot s^{-1}$

Die Abbildung unten illustriert die Zunahme der Energie E infolge des Wirkens der Schwerkraft. Bewegt sich die Masse entlang der Krafrichtung, so wird gemäß der Definition Arbeit = „Kraft mal Weg“ an dem System Arbeit verrichtet (Änderung der potentiellen Energie).



(d) Je nach Anwendungsfall existieren weitere Energieübertragungen, durch die die Energie eines Systems verändert werden kann. Diese Energiebeträge werden in der "**sonstigen Arbeit**" W_s zusammengefasst. Ein Beispiel hierfür ist die Arbeit, die von einem angetriebenen Rührer in einem chemischen Reaktor am Reaktionsmedium verrichtet wird. (Strenggenommen ist diese Form der Energieübertragung in die Kategorie „Arbeit der Oberflächenkräfte“ einzuordnen.)



- Die Zusammenfassung aller Terme ergibt die **Gesamtenergiebilanz** eines örtlich konzentrierten Systems:

$$\frac{dE}{dt} = (F_{in}\rho_{in}e_{in} - F_{out}\rho e) + Q + (F_{in}p_{in} - F_{out}p) - p \frac{dV}{dt} + W_s + \sum_{\alpha} m_{\alpha} \cdot (\vec{f}_{\alpha} \cdot \vec{v}) \quad (2.35)$$

(2.35) berücksichtigt einen einzigen Zufluss und einen einzigen Abfluss. Zur Berücksichtigung weiterer konvektiver Stoffströme wird in Analogie zu (2.13) und (2.14) über diese summiert.

2.3.2 Bilanz der inneren Energie

- Die Gesamtenergie E setzt sich zusammen aus der inneren Energie U und der kinetischen Energie:

$$E = U + \frac{1}{2}mv^2 \quad [\text{J}] \quad (2.36)$$

- Für die massenbezogenen spezifischen Energiegrößen, $e=E/m$ und $u=U/m$, gilt analog:

$$e = u + \frac{1}{2}v^2 \quad [\text{J/kg}] \quad (2.37)$$

Der Anteil der kinetischen Energie an der Gesamtenergie ist bei vielen verfahrenstechnischen Prozessen vernachlässigbar. D.h., in erster Näherung sind die Gesamtenergie E und die innere Energie U gleich groß. (Es sei aber ausdrücklich darauf hingewiesen, dass diese Annahme im Einzelfall kritisch zu prüfen ist!) Unter dieser Annahme folgt die **Bilanz der inneren Energie** eines örtlich konzentrierten Systems:

$$\boxed{\frac{dU}{dt} = (F_{in}\rho_{in}u_{in} - F_{out}\rho u) + Q + (F_{in}p_{in} - F_{out}p) - p\frac{dV}{dt} + W_S + \sum_{\alpha} m_{\alpha} \cdot (\vec{f}_{\alpha} \cdot \vec{v})} \quad (2.38)$$

- Falls die Arbeit der Volumenkräfte in (2.38) vernachlässigt werden kann und ein isochores System ($V = \text{const.}$) vorliegt, folgt die Bilanz:

$$\frac{dU}{dt} = (F_{in}\rho_{in}u_{in} - F_{out}\rho u) + Q + (F_{in}p_{in} - F_{out}p) + W_S \quad (2.39)$$

- (2.39) wird in der Prozesstechnik häufig zur Beschreibung von Batch-Prozessen (Chargenprozessen) verwendet.

2.3.3 Bilanz der Enthalpie

- Die Enthalpie H ist eine extensive thermodynamische Zustandsgröße, für die die folgende kanonische Zustandsgleichung gilt:

$$H = U + p \cdot V \quad [\text{J}] \quad (2.40)$$

- Für die massenbezogene spezifische Enthalpie, $h=H/m$, gilt analog:

$$h = u + p \cdot \frac{V}{m} = u + \frac{p}{\rho} \quad [\text{J/kg}] \quad (2.41)$$

- Mit (2.41) lässt sich (2.38) auch schreiben als:

$$\frac{dU}{dt} = (F_{in}\rho_{in}h_{in} - F_{out}\rho h) + Q - p\frac{dV}{dt} + W_S + \sum_{\alpha} m_{\alpha} \cdot (\vec{f}_{\alpha} \cdot \vec{v}) \quad (2.42)$$

- Um zu einer **Bilanz für die Enthalpie H** zu gelangen, wird (2.40) zunächst nach U umgestellt und dann nach t differenziert:

$$\frac{dU}{dt} = \frac{dH}{dt} - \frac{d}{dt}(pV) = \frac{dH}{dt} - p \frac{dV}{dt} - V \frac{dp}{dt} \quad (2.43)$$

- (2.43) in (2.42) eingesetzt liefert:

$$\boxed{\frac{dH}{dt} = (F_{in}\rho_{in}h_{in} - F_{out}\rho h) + Q + V \frac{dp}{dt} + W_S + \sum_{\alpha} m_{\alpha} \cdot (\vec{f}_{\alpha} \cdot \vec{v})} \quad (2.44)$$

- Falls die Arbeit der Volumenkräfte in (2.44) vernachlässigt werden kann und ein isobares System ($p = \text{const.}$) vorliegt, folgt die Enthalpiebilanz:

$$\frac{dH}{dt} = (F_{in}\rho_{in}h_{in} - F_{out}\rho h) + Q + W_S \quad (2.45)$$

- (2.45) wird in der Prozesstechnik häufig zur Beschreibung von offenen Fließprozessen (Durchflussbetrieb) verwendet.

2.3.4 Enthalpiebilanz in der Temperaturform

- Die bislang vorgestellten Energiebilanzen liefern keine unmittelbare Information über die eigentlich interessierende (messbare) Prozess-temperatur T .
- Um eine direkte Beschreibung der Temperatur zu ermöglichen, werden zusätzliche konstitutive Gleichungen benötigt, die die jeweils betrachtete Energieform mit der Temperatur, dem Druck und der stofflichen Zusammensetzung des Gemisches verknüpfen.
- Ausgangspunkt sei hier die Enthalpiebilanz (2.45). Das totale Differential der Enthalpie H nach der Zeit t ist gegeben durch:

$$\frac{dH}{dt} = \sum_{\alpha} \left(\frac{\partial H}{\partial m_{\alpha}} \right) \frac{dm_{\alpha}}{dt} + \left(\frac{\partial H}{\partial p} \right) \cdot \frac{dp}{dt} + \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right) \cdot \frac{dT}{dt} \quad (2.46)$$

- Einsetzen von (2.46) in (2.44) ergibt für $p=\text{const.}$ (isobares System):

$$\sum_{\alpha} \left(\frac{\partial H}{\partial m_{\alpha}} \right) \frac{dm_{\alpha}}{dt} + \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right) \cdot \frac{dT}{dt} = (F_{in}\rho_{in}h_{in} - F_{out}\rho h) + Q + W_S \quad (2.47)$$

- Wird die Massenbilanz (2.4) in (2.47) eingesetzt, so ergibt sich nach einigen Umformungen eine **Enthalpiebilanz in der Temperaturform**:

$$V \cdot \rho \cdot c_p \cdot \frac{dT}{dt} = F_{in} \rho_{in} c_{p,in} \cdot (T_{in} - T) + V \cdot \left(- \sum_{\alpha} h_{\alpha} \cdot \sigma_{\alpha} \right) + Q + W_S \quad (2.48)$$

mit

$$c_p = \left(\frac{\partial(H/m)}{\partial T} \right) \text{ spez. isobare Wärmekapazität, [J/(kg·K)]} \quad (2.49)$$

$$h_{\alpha} = \left(\frac{\partial H}{\partial m_{\alpha}} \right) \text{ partielle Enthalpie der Komponente } \alpha, \text{ [J/kg]} \quad (2.50)$$

- Für die Anwendung ist es häufig auch zweckmäßig, (2.48) in molaren Größen auszudrücken (c_t : totale molare Konzentration der Mischung):

$$V \cdot c_t \cdot c_p^m \cdot \frac{dT}{dt} = F_{in} c_{t,in} c_{p,in}^m \cdot (T_{in} - T) + V \cdot \left(- \sum_{\alpha} h_{\alpha}^m \cdot \sigma_{\alpha}^m \right) + Q + W_S \quad (2.51)$$

$$c_p^m = \left(\frac{\partial(H/n)}{\partial T} \right) \text{ molare isobare Wärmekapazität, [J/(mol·K)]} \quad (2.52)$$

$$h_{\alpha}^m = \left(\frac{\partial H}{\partial n_{\alpha}} \right) \text{ partielle molare Enthalpie der Komp. } \alpha, \text{ [J/mol]} \quad (2.53)$$

- Anhand der Terme auf der rechten Seite von (2.48) bzw. (2.51) kann man die Ursachen für Temperaturänderungen in einem verfahrenstechnischen Prozess erkennen:
 - ⇒ Die Temperatur des Zulaufes T_{in} kann von der aktuellen Temperatur im System T verschieden sein;
 - ⇒ chemische Reaktionen können Energie (= Reaktionsenthalpie) freisetzen oder verzehren;
 - ⇒ Wärme kann mit der Umgebung ausgetauscht werden;
 - ⇒ sonstige Arbeit (z.B. Arbeit des Rührers in einem Reaktor) kann am System verrichtet werden.
- Wie schnell sich die genannten Ursachen tatsächlich in einer Temperaturänderung äußern, wird durch den Vorfaktor ($V\rho c_p^m$) in (2.48)

bestimmt, d.h. durch die im System gespeicherte Gesamtmasse sowie durch die Wärmekapazität des Gemisches.

- Es ist zu beachten, daß bei der Herleitung von (2.48) bzw. (2.51) einige Annahmen getroffen wurden. So wurden kinetische und potentielle Energien vernachlässigt und es wurde eine isobare Betriebsweise des Systems unterstellt. Somit dürfen diese Formen der Energiebilanz nicht als generelle Energiebilanz für konzentrierte Systeme angesehen werden. Sie stellen einen Sonderfall dar, der in der Verfahrenstechnik allerdings sehr häufig Verwendung findet.

3 Konstitutive Gleichungen

- Neben den Bilanzgleichungen werden zur Formulierung von Prozessmodellen konstitutive Gleichungen (auch: Stoffgesetze) herangezogen. Diese sind zum einen kinetische Ansätze und zum anderen thermodynamische Zustandsgleichungen.

3.1 Kinetische Ansätze

- Kinetische Ansätze werden meistens durch algebraische Gleichungen beschrieben, die in die Bilanzgleichungen einzusetzen sind, um die dort auftretenden Ratenterme zu modellieren.
- Allgemeine Form: $Rate = Funktion(Triebkraft)$
- Beispiel: $Wärmestrom = Funktion(Temperaturdifferenz)$

3.1.1 Chemische Reaktionen

- In der partiellen Stoffmengenbilanz einer Komponente α , (2.7), tritt deren molare Quelldichte σ_α^m in $[\text{mol}/(\text{m}^3\text{s})]$ auf.
- Läuft in einem Reaktionsgemisch nur eine einzige chemische Reaktion ab, so gilt für die Quelldichten:

$$\sigma_\alpha^m = \nu_\alpha \cdot r \quad (3.1)$$

mit

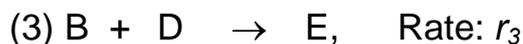
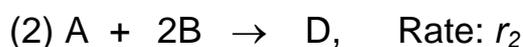
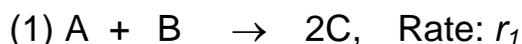
ν_α stöchiometrischer Koeffizient der Komponente α

r vol.bezogene Reaktionsgeschwindigkeit (auch: Rate), $[\text{mol}/(\text{m}^3\text{s})]$

- Vorzeichenkonvention für die stöchiometrischen Koeffizienten:
für Edukte: $\nu_\alpha < 0$; für Produkte: $\nu_\alpha > 0$.
- Beispielreaktion: 1 mol A + 1 mol B \rightarrow 1 mol C (kurz: A + B \rightarrow C)
Stöchiometrische Koeffizienten: $\nu_A = -1$, $\nu_B = -1$, $\nu_C = +1$
Quelldichten: $\sigma_A^m = (-1) \cdot r$, $\sigma_B^m = (-1) \cdot r$, $\sigma_C^m = (+1) \cdot r$ (3.2)
- Finden in einem Reaktionsgemisch gleichzeitig mehrere Reaktionen statt, so gilt für die Quelldichte einer bestimmten Komponente α :

$$\sigma_\alpha^m = \sum_{j=1}^M \nu_{\alpha,j} \cdot r_j \quad j : \text{Reaktionsindex}, \alpha : \text{Komponentenindex} \quad (3.3)$$

- (3.3) besagt, dass die Quelldichte der Komponente α sich aus den Geschwindigkeiten r_j aller Reaktionen ergibt, an denen die betrachtete Komponente beteiligt ist. M bezeichnet die Anzahl aller Reaktionen.
- Beispiel: Gegeben sei das Reaktionsnetzwerk



Stöchiometrische Koeffizienten:

$$\nu_{A,1} = -1, \nu_{B,1} = -1, \nu_{C,1} = +2, \nu_{D,1} = 0, \nu_{E,1} = 0$$

$$\nu_{A,2} = -1, \nu_{B,2} = -2, \nu_{C,2} = 0, \nu_{D,2} = +1, \nu_{E,2} = 0$$

$$\nu_{A,3} = 0, \nu_{B,3} = -1, \nu_{C,3} = 0, \nu_{D,3} = -1, \nu_{E,3} = +1$$

Quelldichten der Komponenten:

$$\sigma_A^m = (-1) \cdot r_1 + (-1) \cdot r_2$$

$$\sigma_B^m = (-1) \cdot r_1 + (-2) \cdot r_2 + (-1) \cdot r_3$$

$$\sigma_C^m = (+2) \cdot r_1$$

$$\sigma_D^m = (+1) \cdot r_2 + (-1) \cdot r_3$$

$$\sigma_E^m = (+1) \cdot r_3$$

- Irreversible Reaktionen laufen nur in eine Richtung (Reaktionspfeil: \rightarrow); reversible Reaktionen sind umkehrbar und können in die Vorwärts- und auch in die Rückwärtsrichtung laufen (Reaktionspfeil: \Leftrightarrow). Streng genommen sind alle chemischen Reaktionen reversibel.
- Die Reaktionsgeschwindigkeit r einer chemischen Reaktion ist abhängig von der stofflichen Zusammensetzung der Mischung, von der Temperatur und vom Druck. Die Druckabhängigkeit ist bei Flüssigphasenreaktionen vernachlässigbar.
- Als Konzentrationsmaße zur Quantifizierung der stofflichen Zusammensetzung bieten sich an:
 - bei Gasphasenreaktionen: Partialdrücke der Komponente p_α
 - bei Flüssigphasenreaktionen: molare Konzentrationen c_α oder Molenbrüche x_α

- Reaktionsgeschwindigkeitsansatz; Bsp. einer Flüssigphasenreaktion:

$$r = r(c_A, c_B, c_C, \dots, T) \quad (3.4)$$

- Für (3.4) hat sich folgender Separationsansatz als hilfreich erwiesen:

$$r = k(T) \cdot f(c_A, c_B, c_C, \dots) \quad (3.5)$$

mit $k(T)$ als Reaktionsgeschwindigkeitskonstante. Die physikalische Einheit von k hängt vom gewählten Ansatz für die Funktion f ab.

3.1.1.1 Potenzansätze

- Für die Funktion f wird oftmals ein Potenzansatz gewählt.

Beispiel: $A + 2 B \rightarrow C + D \Rightarrow$ Ansatz: $r = k(T) \cdot c_A^{m_A} \cdot c_B^{m_B} \quad (3.6)$

- In (3.6) sind die Exponenten m_A und m_B neben k reaktionskinetische Parameter, die in der Regel aus Experimenten ermittelt werden müssen. m_A und m_B werden als Reaktionsordnungen bzgl. der Komponente A bzw. bzgl. der Komponente B bezeichnet. Die m_α können positive und auch negative reelle Werte annehmen.
- Für den Fall, dass es sich bei der betrachteten Reaktion um eine Elementarreaktion handelt, stimmen die Reaktionsordnungen mit den Beträgen der stöchiometrischen Koeffizienten überein ($m_\alpha = |\nu_\alpha|$). Allerdings sind die zugrunde liegenden Elementarreaktionen meistens nicht bekannt, so dass die Werte der Reaktionsordnungen aus experimentellen Daten bestimmt werden müssen.
- Die Temperaturabhängigkeit der Reaktionsgeschwindigkeitskonstante wird oft mit Hilfe des Arrhenius-Ansatzes beschrieben:

$$k(T) = k_0 \cdot e^{-E_A/(RT)} \quad (3.7)$$

mit

k_0 Stoßfaktor (auch: präexponentieller Faktor), [mol/(m³s)]

E_A Aktivierungsenergie, [J/mol]

R allgemeine Gaskonstante, = 8.314 J/(mol K)

T Temperatur, [K]

- Bei einer reversiblen Reaktion, z.B. $A + B \rightleftharpoons C + D$, kann folgender Potenzansatz für die Rate gewählt werden:

$$r = r_+ - r_- = k_+(T) \cdot c_A^{m_A} \cdot c_B^{m_B} - k_-(T) \cdot c_C^{m_C} \cdot c_D^{m_D} \quad (3.8)$$

mit

r_+ Reaktionsgeschwindigkeit der Vorwärtsreaktion, [mol/(m³s)]

r_- Reaktionsgeschwindigkeit der Rückwärtsreaktion, [mol/(m³s)]

k_+ Geschwindigkeitskonstante der Vorwärtsreaktion, [mol/(m³s)]

k_- Geschwindigkeitskonstante der Rückwärtsreaktion, [mol/(m³s)]

- Man kann zeigen, dass die beiden Geschwindigkeitskonstanten durch die (ebenfalls temperaturabhängige) chemische Gleichgewichtskonstante K_{eq} miteinander verknüpft sind:

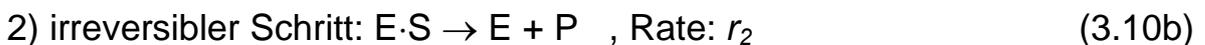
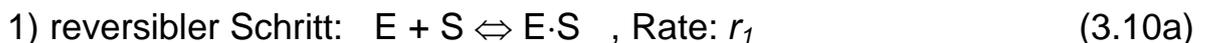
$$K_{eq}(T) = \frac{k_+(T)}{k_-(T)} \quad (3.9)$$

- (3.9) folgt aus dem Massenwirkungsgesetz der physikalischen Chemie.

3.1.1.2 Michaelis-Menten-Kinetik

- Die Kinetik von chemischen Reaktionen kann in einigen Fällen durch Potenzansätze nicht vernünftig beschrieben werden. Dies gilt insbesondere für heterogen-katalysierte Reaktionen, wie z.B. enzymkatalysierte Reaktionen in der Biochemie.

- Typisches Reaktionsschema einer enzymkatalysierten Reaktion:



mit

E Enzym

S Substrat

E·S Enzym-Substrat-Komplex

P Produkt

- Reaktionskinetische Ansätze in molaren Konzentrationen c_α mit der Annahme, es handele sich um Elementarreaktionen:

$$r_1 = k_{1+} \cdot c_E \cdot c_S - k_{1-} \cdot c_{ES} \quad (3.11a)$$

$$r_2 = k_2 \cdot c_{ES} \quad (3.11b)$$

- Um (3.11a) und (3.11b) zusammenzufassen, wird die folgende Quasistationaritätshypothese angewendet:

$$\frac{dn_{ES}}{dt} = r_1 - r_2 \stackrel{!}{=} 0 \quad (3.12)$$

- (3.12) besagt, dass in der ersten Reaktion gebildete ES-Komplexe direkt in der zweiten Reaktion zerfallen und nicht angereichert werden. Derartige Hypothesen werden für schnelllebige Zwischenprodukte in chemischen Reaktionsnetzwerken häufig getroffen, um zu vereinfachten Geschwindigkeitsansätzen zu kommen.

- Weiterhin ist bedeutsam, dass die Gesamtkonzentration aller Enzym-Moleküle, die entweder frei vorliegen (c_E) oder im Komplex gebunden sind (c_{ES}), während des Reaktionsablaufes konstant bleibt. Dies bedeutet, dass die Gesamtkonzentration aller Enzym-Moleküle gleich der Anfangskonzentration ist:

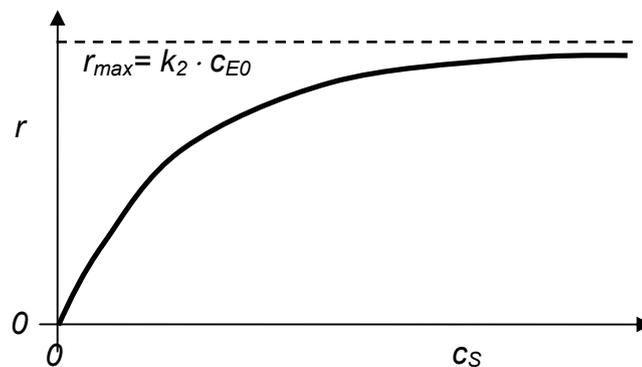
$$c_E(t=0) = c_{E,0} = c_E + c_{ES} \quad (3.13)$$

- Mit (3.11a,b), (3.12), (3.13) folgt der Ratenansatz nach Michaelis-Menten:

$$r = r_2 = k_2 \cdot \frac{c_{E,0} \cdot c_S}{k_M + c_S} \quad ; \quad k_M = \frac{k_{1-} + k_2}{k_{1+}} \quad (3.14a,b)$$

mit k_M als Michaelis-Menten-Konstante in $[\text{mol}/\text{m}^3]$.

- Fazit: Liegt ein Schema mehrerer gekoppelter Reaktionen vor und wird der Potenzansatz für die Kinetik jedes einzelnen Reaktionschrittes verwendet, so gelangt man – unter Verwendung von Quasi-stationariätsannahmen – oft zu einer Gesamtrate r , die einem gebrochen rationalen Ansatz, (3.14), folgt.
- Trägt man r gegen c_S auf (siehe unten), so erkennt man die inhibierende Wirkung des Substrates S in der Gesamtkinetik (3.14).



3.1.1.3 Reaktionsenthalpie

- Die Geschwindigkeit chemischer Reaktionen spielt auch eine Rolle für die Energiebilanz eines verfahrenstechnischen Prozesses. In (2.51) tritt ein Term auf, der die durch Reaktionen pro Zeiteinheit freigesetzte Energie erfasst:

$$-\sum_{\alpha} h_{\alpha}^m \cdot \sigma_{\alpha}^m \quad [\text{J}/\text{m}^3\text{s}] \quad (3.15)$$

- Einsetzen von (3.3) in (3.15) liefert folgenden Ausdruck:

$$-\sum_{\alpha=1}^N h_{\alpha}^m \left(\sum_{j=1}^M \nu_{\alpha,j} \cdot r_j \right) = -\sum_{j=1}^M \sum_{\alpha=1}^N (\nu_{\alpha,j} h_{\alpha}^m) \cdot r_j = \sum_{j=1}^M (-\Delta_R h_j^m) \cdot r_j \quad (3.16)$$

- In (3.16) bezeichnet $(-\Delta_R h_j)$ die in der Reaktion j freigesetzte Reaktionsenthalpie:

$$\Delta_R h_j^m = \sum_{\alpha} \nu_{\alpha,j} \cdot h_{\alpha}^m \quad (3.17)$$

3.1.2 Wärmetransport

- Für die Energiebilanz wird häufig ein Ratenausdruck benötigt, der beschreibt, welche Wärmemenge pro Zeiteinheit von einem Reservoir der Temperatur T^I in ein Reservoir mit der Temperatur T^{II} fließt.
- Transportansatz:

$$Q = A_W \cdot q = A_W \cdot k^h \cdot (T^I - T^{II}) \quad (3.18)$$

mit

Q Wärmestrom, [J/s] = [W]

q Wärmestromdichte, [W/m²]

A_W Wärmeübertragungsfläche, [m²]

k^h Wärmedurchgangskoeffizient, [W/(m²K)]

3.1.3 Ventilkennlinien

- In verfahrenstechnischen Prozessen sind häufig Ventile als wichtiges Prozesselement vertreten, deren kinetisches Verhalten durch Kennlinien abgebildet werden kann. Für den Volumenstrom F durch das Ventil wird häufig folgender Ansatz gewählt:

$$F = c_V \cdot f(l) \cdot \sqrt{\Delta p_V} \quad (3.19)$$

mit

c_V Ventilkoeffizient, [m³/s⁻¹/Pa^{1/2}]

$f(l)$ Ventilcharakteristik, [-]

l Ventilöffnungsgrad, [%]

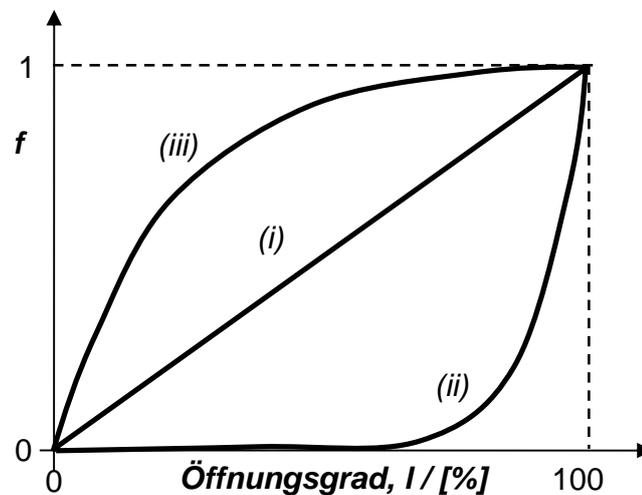
Δp_V Druckabfall am Ventil, [Pa]

- Man unterscheidet folgende Ventilcharakteristiken:

(i) linear: $f(l) = l$

(ii) gleichprozentig: $f(l) = R^{l-1}$, R : Ventilparameter ($\approx 20 \dots 50$)

(iii) schnellöffnend: $f(l) = \sqrt{l}$



3.2 Thermodynamische Zusammenhänge

- Zustandsgleichungen beschreiben das thermische und kalorische Verhalten von Reinstoffen und Gemischen. An dieser Stelle wollen wir uns auf einige wenige Zustandsgleichungen beschränken; weiterführende Zusammenhänge werden in der Vorlesung Thermodynamik behandelt.

3.2.1 Thermische Zustandsgleichung

3.2.1.1 Ideales Gas

- Das ideale Gas ist ein Modellfluid mit der thermischen Zustandsgleichung

$$p \cdot V = n \cdot R \cdot T \quad \text{bzw.} \quad p \cdot v = R \cdot T \quad (3.20)$$

mit

p Druck, [Pa]

V Volumen, [m³]

v molares Volumen, $v = V/n$, [m³/mol]

n Stoffmenge, [mol]

R allgemeine Gaskonstante, = 8,314 [J/(mol·K)]

3.2.1.2 Reales Gas

- Die bekannteste thermische Zustandsgleichung für reale Gase ist die van der Waals-Gleichung:

$$\left(p + \frac{a}{v^2}\right) \cdot (v - b) = R \cdot T \quad (3.21)$$

mit a und b als substanzspezifischen van der Waals-Parametern. Für $a = b = 0$ geht (3.21) direkt in (3.20) über.

3.2.2 Ideale Flüssigkeiten

- Flüssigkeiten sind in erster Näherung inkompressibel, d.h. ihr Volumen ist unabhängig vom Systemdruck. Für einen reinen Stoff gilt dann:

$$v_{\alpha}(T, p) = v_{\alpha}(T) \quad ; \quad \frac{\partial v_{\alpha}}{\partial p} = 0 \quad (3.22)$$

- Ideale Mischungen von Flüssigkeiten sind dadurch gekennzeichnet, dass sich das Gesamtvolumen anteilig aus den Volumenanteilen der Einzelkomponenten ergibt:

$$V(T) = \sum_{\alpha=1}^N n_{\alpha} \cdot v_{\alpha}(T) \quad (3.23)$$

mit

v_{α} molares Volumen der Komponente α , [m³/mol]

n_{α} Stoffmenge der Komponente α , [mol]

3.2.3 Phasengleichgewichte

- In verfahrenstechnischen Prozessen stehen häufig mehrere Phasen miteinander in Kontakt.

- Beispiele:

Destillationskolonnen \Rightarrow Gasphase / Flüssigphase

Extraktionskolonnen \Rightarrow Flüssigphase 1 / Flüssigphase 2

Flüssig-Chromatographie \Rightarrow Flüssigphase / Feste Phase

- Das thermodynamische Gleichgewicht hat sich eingestellt, wenn zwischen den Phasen keine Austauschströme von Masse, Energie und Impuls mehr auftreten. Für zwei Phasen, die im thermodynamischen Gleichgewicht stehen, gilt:

$$(i) \text{ mechanisches Gleichgewicht: } p^{\text{Phase I}} = p^{\text{Phase II}} \quad (3.24a)$$

$$(ii) \text{ thermisches Gleichgewicht: } T^{\text{Phase I}} = T^{\text{Phase II}} \quad (3.24b)$$

$$(iii) \text{ stoffliches Gleichgewicht: } \mu_{\alpha}^{\text{Phase I}} = \mu_{\alpha}^{\text{Phase II}} \quad (3.24c)$$

In (3.24c) bezeichnet μ_{α} das chemische Potential der Komponente α (siehe Vorlesung Physikalische Chemie). Es ist ein Funktion des Drucks, der Temperatur und der stofflichen Zusammensetzung der betreffenden Phase. Für praktische Anwendungen wird (3.24c) häufig auch geschrieben als:

$$x_{\alpha}^{\text{Phase I}} = K_{\alpha} \cdot x_{\alpha}^{\text{Phase II}} \quad (3.24d)$$

- Der Verteilungskoeffizient K_{α} in (3.24d) gibt an, wie sich die in einer Mischung befindlichen Komponenten zwischen Phase I und Phase II verteilen. Dieser Koeffizient ist im allgemeinen eine Funktion aller Zustandsgrößen im System (Druck, Temperatur, Zusammensetzung beider Phasen):

$$K_{\alpha} = K_{\alpha}(p, T, x^{\text{Phase I}}, x^{\text{Phase II}}) \quad (3.25)$$

- Zur Beschreibung von Phasengleichgewichten werden häufig auch Trennfaktoren (auch: relative Flüchtigkeiten) $K_{\alpha,\beta}$ verwendet:

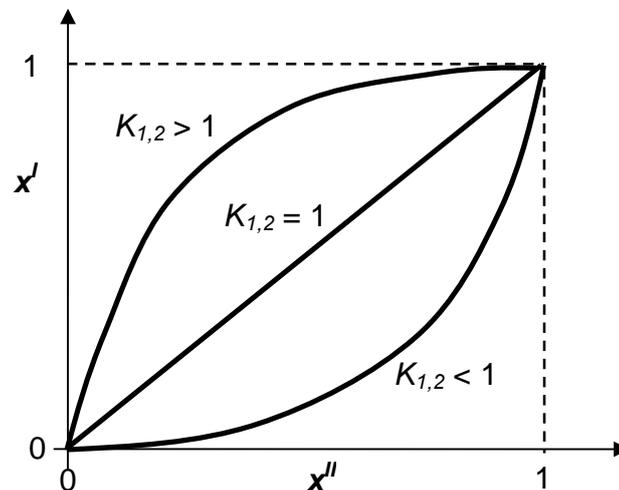
$$K_{\alpha,\beta} = \frac{(x_{\alpha}^I / x_{\alpha}^{II})}{(x_{\beta}^I / x_{\beta}^{II})} \Rightarrow K_{\alpha,\beta} = \frac{K_{\alpha}}{K_{\beta}} \quad (3.26)$$

- In einem Gemisch mit N Komponenten existieren $(N - 1)$ unabhängige Trennfaktoren. Für ein binäres Gemisch (= System mit zwei Komponenten) gilt:

$$x_1^I = x^I ; x_1^{II} = x^{II} ; x_2^I = 1 - x^I ; x_2^{II} = 1 - x^{II} \quad (3.27)$$

$$K_{1,2} = \left(\frac{x^I}{1 - x^I} \right) \cdot \left(\frac{1 - x^{II}}{x^{II}} \right) \Rightarrow x^I = \frac{K_{1,2} \cdot x^{II}}{1 + (K_{1,2} - 1) \cdot x^{II}} \quad (3.28)$$

- In grober Näherung kann der Trennfaktor $K_{1,2}$ als Konstante angesehen werden. Dann erhält man die hier dargestellten qualitativen Phasengleichgewichtskurven.



4 Allgemeine Form dynamischer Modelle

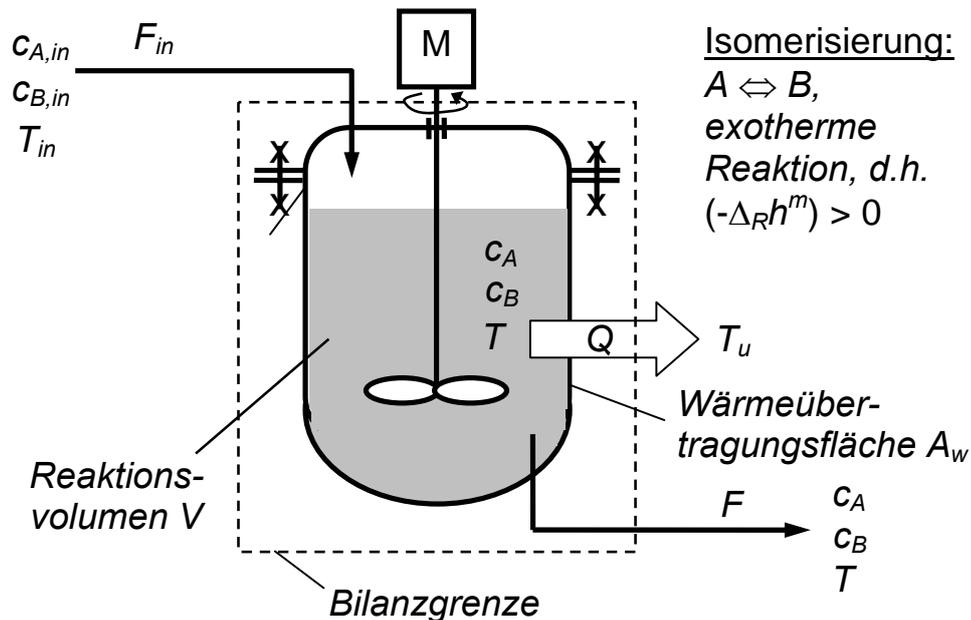
- Zur Formulierung eines dynamischen Prozessmodells sind folgende Informationen zusammengetragen:
- Bilanzgleichungen für
 - Stoffmengen, Energie (und ggf. Impuls)
 - ⇒ gekoppelte gewöhnliche Differentialgleichungen erster Ordnung bzgl. der Zeit t (engl. Ordinary Differential Equations = ODE)
- Kinetische Ansätze für
 - Chemische Reaktionen
 - Wärmeübertragung
 - Kennlinien der Ventile, Motoren etc.
 - ⇒ algebraische Gleichungen (meistens Fluss-explizit)

(engl. Algebraic Equations = AE)

- Thermodynamische Zusammenhänge:
 - Thermische Zustandsgleichungen
 - Kalorische Zustandsgleichungen
 - Phasengleichgewichte
 - Reaktionsgleichgewichte (Massenwirkungsgesetze)
 - ⇒ algebraische Gleichungen (explizit oder auch implizit bzgl. der thermodynamischen Zustandsgrößen)
(engl. Algebraic Equations = AE)

4.1 Beispiel: Isomerisierung im kontinuierlichen Rührkessel

- Wir betrachten einen **CSTR** (engl. Continuous Stirred Tank Reactor = kontinuierlich betriebener Rührkesselreaktor).
- Merkmal: Perfekt durchmisches System, d.h. alle Zustandsgrößen sind im gesamten Reaktor gleich.
- Die Zustandsgrößen im Ablaufstrom sind gleich den Zustandsgrößen im Reaktor selbst.
- Annahmen: $V = \text{const.}$, $\rho = \text{const.}$, $c_p^m = \text{const.}$, $F_{in} = F$, mechanische Leistung des Motors vernachlässigt.
- Skizze:



Bilanzgleichungen (\Rightarrow Modellgleichungen für c_A, c_B, T):

- Stoffmengenbilanz für Komponente A, in [mol/s]:

$$V \cdot \frac{dc_A}{dt} = F_{in} (c_{A,in} - c_A) + V \cdot \sigma_A^m \quad \text{mit } \sigma_A^m = -r \quad (4.1)$$

- Stoffmengenbilanz für Komponente B, in [mol/s]:

$$V \cdot \frac{dc_B}{dt} = F_{in} (c_{B,in} - c_B) + V \cdot \sigma_B^m \quad \text{mit } \sigma_B^m = +r \quad (4.2)$$

- Energiebilanz, in [J/s]:

$$V \rho c_p \frac{dT}{dt} = F_{in} \rho c_p (T_{in} - T) + V (-\Delta_R h^m) \cdot r - Q \quad (4.3)$$

Kinetische Ansätze (\Rightarrow Modellgleichungen für r, Q)

- Volumenbezogene chem. Reaktionsgeschwindigkeit, in [mol/(m³s)]:

$$r = k_+ c_A^{m_A} - k_- c_B^{m_B} \quad (\text{Potenzansatz}) \quad (4.4)$$

- Wärmeübertragung zwischen Reaktor und Umgebung, in [J/s]:

$$Q = A_w \cdot k^h \cdot (T - T_u) \quad (4.5)$$

Klassifizierung der beteiligten Prozessgrößen:

- **Zustandsgrößen:** zeitveränderliche Variable, die den Systemzustand kennzeichnen

$$x^T(t) = (x_1(t), x_2(t), x_3(t)) \stackrel{\text{hier}}{=} (c_A(t), c_B(t), T(t)) \quad (4.6)$$

- **Eingangsgrößen:** zeitveränderliche messbare Variable, die verändert werden können, um auf das System in gewünschter Weise einzuwirken (regelungstechnisch: Stellgrößen); Beispiel:

$$u^T(t) = (u_1(t), u_2(t), u_3(t)) \stackrel{\text{hier}}{=} (c_{A,in}(t), c_{B,in}(t), T_{in}(t)) \quad (4.7)$$

- **Ausgangsgrößen:** zeitveränderliche messbare Variable, die gesteuert bzw. geregelt werden sollen (Wahl hängt von der jeweiligen Aufgabenstellung ab); Beispiel:

$$y^T(t) = (y_1(t), y_2(t)) \stackrel{\text{hier}}{=} (c_B(t), T(t)) \quad (4.8)$$

- **Systemparameter:** Größen, die im Betrieb nicht zeitveränderlich sind (Zulaufgrößen, Geometriegrößen, Stoffwerte, kinetische Parameter)

$$p^T \stackrel{\text{hier}}{=} (F_{in}, T_u, V, A_W, \rho c_p^m, (-\Delta_R h^m), k_+, k_-, m_A, m_B, k^h) \quad (4.9)$$

4.2 Formalisierte Schreibweise des Modells

- Nach Einsetzen der kinetischen Ansätze (4.4) und (4.5) in die Bilanzgleichungen (4.1) bis (4.3) erhält man nach kurzer Umstellung das Prozessmodell in folgender Form:

$$\boxed{\frac{dx(t)}{dt} = f(x(t), u(t), p)} \quad (4.10)$$

$$\boxed{y(t) = g(x(t), u(t), p)} \quad (4.11)$$

- Für (4.10) müssen geeignete Anfangsbedingungen (AB) angegeben werden:

$$x(t=0) = x_0 \quad (4.12)$$

- **Anmerk.:** Zwecks Schreibvereinfachung wird die Zeitabhängigkeit in (4.10) und (4.11) häufig unterdrückt.

- Funktionsvektoren f und g (im allg. nichtlineare Funktionen!):

$$f = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \end{pmatrix} \stackrel{\text{hier}}{=} \begin{pmatrix} \frac{F_{in}}{V}(c_{A,in} - c_A) - (k_+ c_A^{m_A} - k_- c_B^{m_B}) \\ \frac{F_{in}}{V}(c_{B,in} - c_B) + (k_+ c_A^{m_A} - k_- c_B^{m_B}) \\ \frac{1}{V\rho c_p} (F_{in}\rho c_p (T_{in} - T) + V(-\Delta_R h^m) \cdot (k_+ c_A^{m_A} - k_- c_B^{m_B}) - Ak_h (T - T_u)) \end{pmatrix} \quad (4.13)$$

$$g = \begin{pmatrix} g_1 \\ g_2 \end{pmatrix} \stackrel{\text{hier}}{=} \begin{pmatrix} c_B \\ T \end{pmatrix} \quad (4.14)$$

- Die Lösung $x(t)$ von (4.10) mit den AB (4.12) wird in der Regel mittels numerischer Simulation mit Hilfe der in Abschnitt 5.1 vorgestellten Integrationsmethoden (Euler-Verfahren, Runge-Kutta-Verfahren) bestimmt.

4.3 Stationärer Betriebszustand

- Der stationäre Betriebszustand eines Prozesses x_s ist dann erreicht, wenn sich die Zustandsgrößen x bei konstanten Eingangsgrößen u_s und gegebenen Parameterwerten p zeitlich nicht mehr verändern. Dann gilt:

$$\boxed{\frac{dx_s(t)}{dt} = 0 = f(x_s, u_s, p)} \quad (4.15)$$

$$\boxed{y_s = g(x_s, u_s, p)} \quad (4.16)$$

- In (4.16) bezeichnet y_s die Ausgangsgrößen des Prozesses am stationären Betriebspunkt.
- (4.15) ist ein System gekoppelter algebraischer Gleichungen, dessen Lösung den stationären Betriebszustand x_s liefert.
- Die Lösung des algebraischen Gleichungssystems kann mit Hilfe des Newton-Raphson-Verfahrens (siehe Abschnitt 5.2) erfolgen.
- Alternativ kann x_s auch als stationärer Endwert einer dynamischen Simulation von (4.10) gewonnen werden.

5 Numerische Simulation

5.1 Instationäre Prozesse

- Wie in Abschnitt 4 gesehen, liegen Prozessmodelle häufig in Form von Systemen gewöhnlicher DGLn erster Ordnung vor.
- Im eindimensionalen Fall ist eine skalare DGL 1. Ordnung mit einer gegebenen Anfangsbedingung zu lösen:

$$\dot{x} = \frac{dx}{dt} = f(x) \quad \text{mit} \quad x(t = t_0) = x_0 \quad (5.1)$$

- Die Lösung $x(t)$ der DGL beschreibt die gesuchte Dynamik des Prozesses. Wenn f eine nichtlineare Funktion bzgl. x ist, existiert in der Regel keine analytische Lösung.
- Daher müssen numerische Simulationsverfahren eingesetzt werden, um eine Näherung an die exakte Lösung der DGL zu erhalten.

5.1.1 Explizites Euler-Verfahren (Polygonzug-Verfahren)

- Grundidee: Da $x(t = t_0) = x_0$ bekannt ist, ist die Steigung der Tangente an der Lösung bei $t = t_0$, nämlich $dx/dt|_{t=t_0} = f(x_0)$, auch bekannt.
- Legt man diese Tangente an die Lösung bei $t = t_0$ an und extrapoliert bis $t = t_1$, so erhalten wir einen Näherungswert $x^{(1)}$:

$$x(t = t_1) \approx x^{(1)} = x_0 + f(x_0) \cdot (t_1 - t_0) \quad (5.2)$$

- (5.2) unterstellt, dass die mittlere Steigung im Intervall $[t_0, t_1]$ durch die Steigung an der Stelle t_0 angenähert werden kann.
- In dieser Weise kann man fortfahren, um jeweils die Steigung der Näherung für den nächsten Schritt zu bestimmen.
- Allgemeine Formel für die explizite Euler-Approximation:

$$\boxed{x(t = t_{k+1}) \approx x^{(k+1)} = x^{(k)} + f(x^{(k)}) \cdot (t_{k+1} - t_k)} \quad (5.3)$$

- $x^{(k+1)}$ bezeichnet die Näherungslösung an der Stützstelle t_k . $x(t=t_{k+1})$ dagegen bezieht sich auf die (wahre) Lösung.
- (5.3) ist eine explizite Gleichung, da $x^{(k+1)}$ als Funktion bekannter Größen aus dem vorangegangenen Approximationsschritt, $x^{(k)}$ und $f(x^{(k)})$, bestimmt wird. Die Auswertung von (5.3) ist somit einfach.
- (5.3) ist anfällig für numerische Instabilitäten, insbesondere wenn die Zeitschrittweite $(t_{k+1} - t_k)$ zu groß gewählt wird.

- Die Approximationsformel (5.3) kann man umstellen zu:

$$\frac{x^{(k+1)} - x^{(k)}}{t_{k+1} - t_k} = f(x^{(k)}) \quad (5.4)$$

- (5.4) zeigt, dass beim expliziten Euler-Verfahren die Steigung $f(x^{(k)})$ durch den Vorwärts-Differenzenquotienten approximiert wird.

5.1.2 Implizites Euler-Verfahren

- Beim impliziten Euler-Verfahren wird die mittlere Steigung im Intervall $[t_k, t_{k+1}]$ durch die Steigung an der Stelle t_{k+1} angenähert.
- Allgemeine Formel für die implizite Euler-Approximation:

$$\boxed{x(t = t_{k+1}) \approx x^{(k+1)} = x^{(k)} + f(x^{(k+1)}) \cdot (t_{k+1} - t_k)} \quad (5.5)$$

- (5.5) ist eine implizite Gleichung, da zur Bestimmung der gesuchten Größe $x^{(k+1)}$ u.a. die unbekannte Steigung $f(x^{(k+1)})$ herangezogen wird.
- Die Bestimmung von $x^{(k+1)}$ muss somit durch iterative Lösung von (5.5) erfolgen. Der Rechenaufwand pro Schritt ist also größer als beim expliziten Verfahren.
- (5.5) zeigt numerisch stabiles Lösungsverhalten, auch wenn große Schrittweiten $(t_{k+1} - t_k)$ gewählt werden.
- Die Approximationsformel (5.5) kann man umstellen zu:

$$\frac{x^{(k+1)} - x^{(k)}}{t_{k+1} - t_k} = f(x^{(k+1)}) \quad (5.6)$$

- (5.6) zeigt, dass beim impliziten Euler-Verfahren die Steigung $f(x^{(k+1)})$ durch den Rückwärts-Differenzenquotienten approximiert wird.

5.1.3 Numerische Stabilität

- Betrachte folgende einfache DGL:

$$\frac{dx}{dt} = -\frac{1}{\tau} \cdot x \quad \text{mit} \quad x(t = 0) = x_0 \quad (5.7)$$

- Die analytische Lösung für (5.7) lautet: $x(t) = x_0 \cdot e^{-t/\tau}$.
- Explizites Euler-Verfahren für (5.7) liefert bei fester Schrittweite Δt :

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \left(\frac{-x^{(k)}}{\tau} \right) \cdot \Delta t = \left(1 - \frac{\Delta t}{\tau} \right) \cdot x^{(k)} \quad (5.8)$$

- Bei Wiedereinsetzen der jeweils vorangegangenen Lösung ergibt sich nach dem (k+1)-ten Schritt:

$$x^{(k+1)} = \left(1 - \frac{\Delta t}{\tau} \right)^{k+1} \cdot x_0 \quad (5.9)$$

- (5.9) liefert eine stabile, monoton fallende Folge von x-Werten, falls $|1 - \Delta t / \tau| < 1$. D.h., die Zeitschrittweite Δt darf nicht größer sein als die Zeitkonstante τ , damit die Folge der Lösungspunkte $x^{(k)}$ nicht „wegläuft“ (Zeitschritt-Begrenzung des expl. Euler-Verfahrens):

$$0 < \Delta t < \tau \quad (5.10)$$

- Implizites Euler-Verfahren für (5.7) liefert bei fester Schrittweite Δt :

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \left(\frac{-x^{(k+1)}}{\tau} \right) \cdot \Delta t \Leftrightarrow x^{(k+1)} = \frac{1}{1 + \Delta t / \tau} \cdot x^{(k)} \quad (5.11)$$

- Bei Wiedereinsetzen der jeweils vorangegangenen Lösung ergibt sich nach dem (k+1)-ten Schritt:

$$x^{(k+1)} = \left(\frac{1}{1 + \Delta t / \tau} \right)^{k+1} \cdot x_0 \quad (5.12)$$

- (5.12) liefert eine stabile, monoton fallende Folge von x-Werten, falls $|1 / (1 + \Delta t / \tau)| < 1$. D.h., die Zeitschrittweite Δt kann beliebig groß sein, ohne dass die Folge der Lösungspunkte $x^{(k)}$ „wegläuft“ (keine Zeitschritt-Begrenzung des impliziten Euler-Verfahrens).
- Allerdings wird man Δt nicht beliebig groß wählen, sondern gerade so, dass die exakte Lösung hinreichend gut approximiert wird und die Rechenzeiten in einem vertretbaren Rahmen bleiben.

5.1.4 Runge-Kutta-Verfahren zweiter Ordnung

- Es existieren zahlreiche weitere Verfahren zur Integration von gewöhnlichen Differentialgleichungen. Besonders oft werden Runge-Kutta-Verfahren verwendet.
- Der Begriff der Ordnung eines Runge-Kutta-Verfahrens bezieht sich auf die Fehlerordnung des Verfahrens. Diese Verfahren erreichen im Vergleich zum Eulerschen Verfahren eine bessere Approximation dadurch, dass die Steigung der Funktion über einem Intervall durch gewichtete Mittelwertbildung der Steigungen an mehreren Stützstellen angenähert wird.
- Das Runge-Kutta-Verfahren 2. Ordnung verwendet nur die Steigung der Funktion in der Mitte des Intervalls zur Approximation der Funktion.

- 1. Schritt: Bestimmung der Steigung m_1 an der Stelle $x^{(k)}$

$$m_1 = f(x^{(k)}) \quad (5.13)$$

- 2. Schritt: Schätzung des x -Wertes in der Mitte des Intervalls $[t_k, t_{k+1}]$

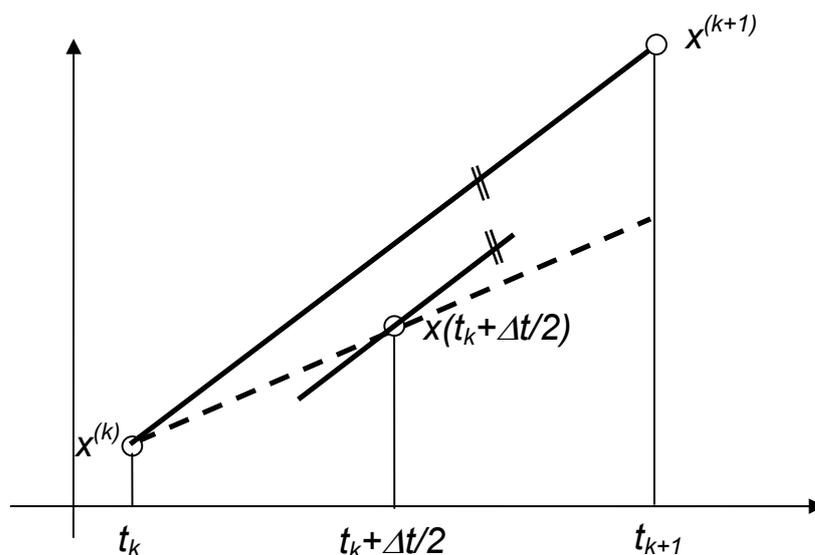
$$x(t_k + \Delta t / 2) = x^{(k)} + \Delta t / 2 \cdot m_1 \quad (5.14)$$

- 3. Schritt: Bestimmung des Steigungswertes m_2 an der Stelle $t_k + \Delta t / 2$:

$$m_2 = f(x(t_k + \Delta t / 2)) = f(x^{(k)} + \Delta t / 2 \cdot m_1) \quad (5.15)$$

- 4. Schritt: Bestimmung des gesuchten Wertes $x^{(k+1)}$

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \Delta t \cdot m_2 \quad (5.16)$$



5.2 Stationäre Prozesse

- Soll der stationäre Betriebszustand eines Prozesses bestimmt werden, so ist folgendes algebraisches Gleichungssystem der Dimension n zu lösen:

$$f(x_s) = 0 \quad (5.17)$$

- Anmerk.: In (5.17) sind zusätzlich im Argument der Funktion f auftretende konstante Eingangsgrößen und Parameter nicht explizit aufgeführt.
- Die Newton-Raphson-Methode ist ein iteratives Verfahren zur Lösung eines Systems von nichtlinearen algebraischen Gln. des Typs (5.17).

5.2.1 Eindimensionale Probleme

- In diesem Fall ist f eine skalare Funktion, die in eine Taylor-Reihe entwickelt wird:

$$f(x^{(k+1)}) = f(x^{(k)}) + f'(x^{(k)}) \cdot \Delta x^{(k+1)} + \frac{1}{2!} f''(x^{(k)}) \cdot (\Delta x^{(k+1)})^2 + \dots \quad (5.18)$$

mit $\Delta x^{(k+1)} = x^{(k+1)} - x^{(k)}$ und

$$f'(x^{(k)}) = \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{x^{(k)}}; \quad f''(x^{(k)}) = \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_{x^{(k)}} \quad (5.19)$$

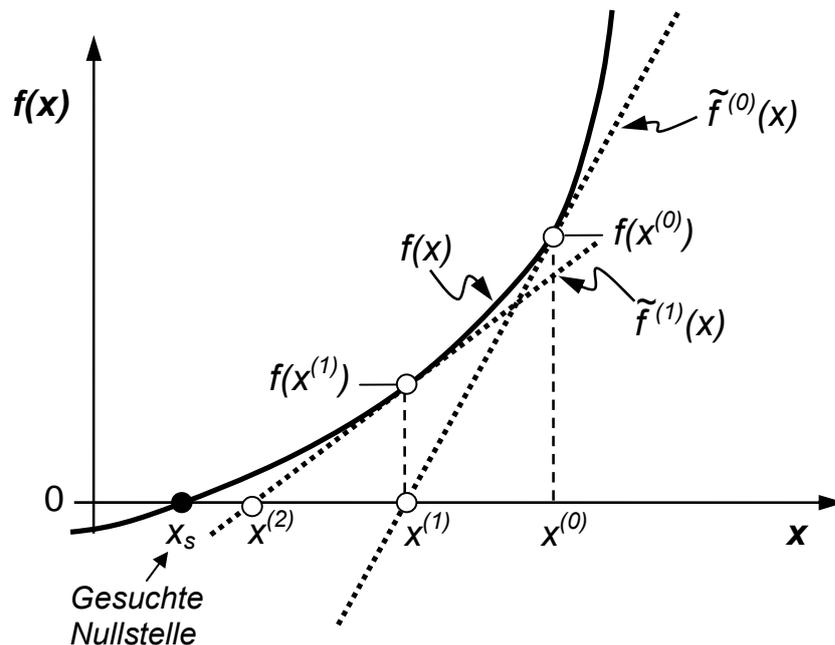
- Abbruch der Taylorreihe nach dem linearen Glied liefert im k -ten Schritt des Newton-Verfahrens folgende lineare Ersatzfunktion:

$$\tilde{f}^{(k)}(x^{(k+1)}) = f(x^{(k)}) + f'(x^{(k)}) \cdot \Delta x^{(k+1)} \stackrel{!}{=} 0, \quad (5.20)$$

deren Nullstelle man leicht bestimmen kann. Dies liefert die Iterationsvorschrift:

$$\boxed{x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{f(x^{(k)})}{f'(x^{(k)})}} \quad \text{Newton-Vorschrift} \quad (5.21)$$

- In (5.21) ist $x^{(k+1)}$ eine Näherung für die gesuchte Nullstelle x_s in (5.17). Die Lösung von (5.21) konvergiert ausgehend von dem Startwert $x^{(0)}$ quadratisch gegen die Lösung von (5.17).
- Graphische Veranschaulichung des Newton-Verfahrens:



5.2.2 Mehrdimensionale Probleme

- In diesem Fall ist $f^T = (f_1, f_2, \dots, f_n)$ eine Vektor-Funktion, die in eine Taylor-Reihe entwickelt wird:

$$f(x^{(k+1)}) = f(x^{(k)}) + J(x^{(k)}) \cdot \Delta x^{(k+1)} + \dots \quad (5.22)$$

$$\text{mit } \Delta x^{(k+1)} = x^{(k+1)} - x^{(k)}$$

- In (5.22) bezeichnet $J(x^{(k)})$ die Jacobi-Matrix des Funktionsvektors f an der Stelle $x^{(k)}$. Diese Matrix enthält die partiellen Ableitungen der einzelnen Funktionen f_i nach den Variablen x_j :

$$J(x^{(k)}) = \begin{bmatrix} \left. \frac{\partial f_1}{\partial x_1} \right|_{x^{(k)}} & \left. \frac{\partial f_1}{\partial x_2} \right|_{x^{(k)}} & \dots & \left. \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \right|_{x^{(k)}} \\ \left. \frac{\partial f_2}{\partial x_1} \right|_{x^{(k)}} & \left. \frac{\partial f_2}{\partial x_2} \right|_{x^{(k)}} & \dots & \left. \frac{\partial f_2}{\partial x_n} \right|_{x^{(k)}} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \left. \frac{\partial f_n}{\partial x_1} \right|_{x^{(k)}} & \left. \frac{\partial f_n}{\partial x_2} \right|_{x^{(k)}} & \dots & \left. \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \right|_{x^{(k)}} \end{bmatrix} \quad (5.23)$$

- Nun: Analoges Vorgehen zum eindimensionalen Fall \Rightarrow Abbruch der Taylorreihe (5.22) nach dem linearen Glied liefert im k-ten Schritt des Newton-Verfahrens folgende lineare Ersatzfunktion:

$$\tilde{f}^{(k)}(x^{(k+1)}) = f(x^{(k)}) + J(x^{(k)}) \cdot \Delta x^{(k+1)} \stackrel{!}{=} 0, \quad (5.24)$$

- Nach Umstellung erhält man aus (5.24) folgende Iterationsvorschrift:

$$\boxed{x^{(k+1)} = x^{(k)} - J^{-1}(x^{(k)}) \cdot f(x^{(k)})} \quad \text{Newton-Raphson-Vorschrift} \quad (5.25)$$

- (5.25) erfordert die Invertierung der Jacobi-Matrix. Dies ist aufwändig und wird in der Praxis umgangen, indem statt dessen das (lineare) Gleichungssystem

$$J(x^{(k)}) \cdot \Delta x^{(k+1)} = -f(x^{(k)}) \quad (5.26)$$

mittels bewährter Verfahren (z.B. Gaußsche Elimination oder LR-Zerlegung) gelöst wird.

- Anmerk.: (5.26) muss in jedem Iterationsschritt gelöst werden, d.h. die Lösung des nichtlinearen Problems (5.17) wird durch Lösung einer Folge linearer Probleme (5.26) gefunden bzw. angenähert.
- Das Newton-Raphson-Verfahren arbeitet insbesondere dann zuverlässig, wenn der gewählte Startwert $x^{(0)}$ von der (unbekannten) Lösung x_s nicht zu weit entfernt liegt.
- Die Iteration (5.26) wird solange fortgesetzt, bis das Abbruchkriterium

$$\|\Delta x^{(k+1)}\| < \varepsilon \quad (5.27)$$

erfüllt ist.

6 Linearisierung nichtlinearer Modelle

6.1 Zustandsraummodell

- Wie in Abschnitt 4 gezeigt, wird ein dynamisches Prozessmodell häufig als Satz nichtlinearer, gewöhnlicher Differentialgleichungen erster Ordnung angeschrieben, der sich aus den Material- und Energiebilanzen des betrachteten Prozesses ergibt:

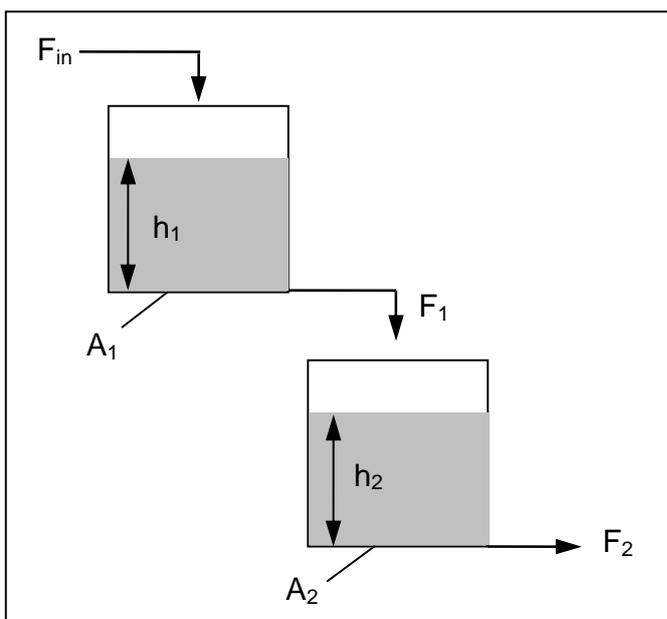
$$\dot{x} = \frac{dx}{dt} = f(x, u) \quad \text{mit} \quad x(t=0) = x_0 \quad (6.1)$$

x : Vektor der Zustandsgrößen, $\dim(x)=n$

u : Vektor der Eingangsgrößen, $\dim(u)=m$

f : (im allgemeinen nichtlinearer) Funktionsvektor, $\dim(f)=n$

- Durch Linearisierung von (6.1) an einem beliebigen, festen Betriebspunkt des Systems erhält man ein lineares Prozessmodell, das auch als Zustandsraummodell bezeichnet wird.
- In manchen Fällen liegt direkt ein lineares Prozessmodell vor, so dass eine Linearisierung von (6.1) nicht mehr erforderlich ist.
- Beispiel für lineares Prozessmodell: Zwei Rührtanks ohne Rückwirkung



Materialbilanzen in volumetrischen Einheiten (m^3):

Tank 1: (6.2)

$$A_1 \frac{dh_1}{dt} = F_{in} - F_1$$

Tank 2: (6.3)

$$A_2 \frac{dh_2}{dt} = F_1 - F_2$$

A_i : Querschnittsfläche (m^2)

- Folgende kinetische Ansätze mögen das Ausflussverhalten beschreiben:

$$F_1 = \beta_1 \cdot h_1 \quad , \quad F_2 = \beta_2 \cdot h_2 \quad (6.4a,b)$$

mit den Ausflusskoeffizienten β_i .

- Resultierendes Prozessmodell:

$$\frac{dh_1}{dt} = \frac{F_{in}}{A_1} - \frac{\beta_1}{A_1} \cdot h_1 \quad (6.5a,b)$$

$$\frac{dh_2}{dt} = \frac{F_1}{A_2} - \frac{\beta_2}{A_2} \cdot h_2 = \frac{\beta_1}{A_2} \cdot h_1 - \frac{\beta_2}{A_2} \cdot h_2$$

- In Vektor-Matrix-Schreibweise:

$$\begin{pmatrix} \dot{h}_1 \\ \dot{h}_2 \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} -\beta_1 / A_1 & 0 \\ \beta_1 / A_2 & -\beta_2 / A_2 \end{bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} h_1 \\ h_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 / A_1 \\ 0 \end{pmatrix} \cdot F_{in} \quad (6.6)$$

- Bzw. in allgemeinerer Schreibweise:

$$\dot{x} = A \cdot x + B \cdot u \quad (6.7)$$

mit

$$A = \begin{bmatrix} -\beta_1 / A_1 & 0 \\ \beta_1 / A_2 & -\beta_2 / A_2 \end{bmatrix} \quad \text{und} \quad B = \begin{pmatrix} 1 / A_1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (6.8a,b)$$

- Zustandsgrößen / Eingangsgröße:

$$x = \begin{pmatrix} h_1 \\ h_2 \end{pmatrix} \quad ; \quad u = F_{in} \quad (6.9a,b)$$

- Das Zustandsraummodell wird ergänzt durch den Ausgangsvektor y (Größen, die gemessen werden können oder die von besonderem Interesse für die Prozesssimulation sind):

$$y = C \cdot x + D \cdot u \quad (6.10)$$

- Falls beide Höhenstände in den Tanks als Ausgangsgrößen betrachtet werden, gilt:

$$y = \begin{pmatrix} h_1 \\ h_2 \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} h_1 \\ h_2 \end{pmatrix} = C \cdot x \quad \text{mit} \quad C = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (6.11)$$

- Falls die Eingangsgröße F_{in} als dritte Ausgangsgröße mitbetrachtet wird, gilt:

$$y = \begin{pmatrix} h_1 \\ h_2 \\ F_{in} \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} h_1 \\ h_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \cdot F_{in} = C \cdot x + D \cdot u \quad (6.12)$$

mit

$$C = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} ; \quad D = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (6.13a,b)$$

6.1.1 Allgemeine Form des Zustandsraummodells

- Für n Zustandsgrößen, m Eingangsgrößen und p Ausgangsgrößen lautet das allgemeine Zustandsraummodell:

$$\frac{dx}{dt} = A \cdot x + B \cdot u \quad (6.14)$$

$$y = C \cdot x + D \cdot u \quad (6.15)$$

mit

$$x^T = (x_1, x_2, \dots, x_n) \quad \text{Zustandsvektor}$$

$$u^T = (u_1, u_2, \dots, u_m) \quad \text{Eingangsvektor}$$

$$y^T = (y_1, y_2, \dots, y_p) \quad \text{Ausgangsvektor}$$

und der Systemmatrix A , der Eingangsmatrix B , der Ausgangsmatrix C und der Durchgriffsmatrix D :

$$A = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \dots & A_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ A_{n1} & A_{n2} & \dots & A_{nn} \end{bmatrix} ; \quad B = \begin{bmatrix} B_{11} & B_{12} & \dots & B_{1m} \\ B_{21} & B_{22} & \dots & B_{2m} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ B_{n1} & B_{n2} & \dots & B_{nm} \end{bmatrix} \quad (6.16)$$

$$C = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & \dots & C_{1n} \\ C_{21} & C_{22} & \dots & C_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ C_{p1} & C_{p2} & \dots & C_{pn} \end{bmatrix} ; \quad D = \begin{bmatrix} D_{11} & D_{12} & \dots & D_{1m} \\ D_{21} & D_{22} & \dots & D_{2m} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ D_{p1} & D_{p2} & \dots & D_{pm} \end{bmatrix} \quad (6.17)$$

6.2 Linearisierung nichtlinearer Modelle

- In den meisten Fällen der Verfahrenstechnik und Prozesstechnik liegen Prozessmodelle vor, deren „rechte Seiten“ in (6.1) nichtlineare Funktionen der Zustandsgrößen und/oder der Eingangsgrößen sind.
- Um die Methoden der linearen Systemanalyse trotzdem anwenden zu können, muss man den Vektor $f(x,u)$ in (6.1) durch lineare Funktionszusammenhänge approximieren.
- Dies geschieht durch eine Taylor-Reihenentwicklung bezüglich x und u an einem stationären Arbeitspunkt x_s .

6.2.1 Eine einzige (skalare) Zustandsgröße

- Man betrachte ein einfaches Prozessmodell mit einer Zustandsgröße:

$$\frac{dx}{dt} = f(x) \quad (6.18)$$

- Entwicklung der Funktion f in eine Taylor-Reihe am Punkt x_s :

$$f(x) = f(x_s) + \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{x_s} \cdot (x - x_s) + THO \quad (6.19)$$

THO: Terme höherer Ordnung

- x_s bezeichnet die Zustandsgröße am stationären Arbeitspunkt, d.h.:

$$\frac{dx_s}{dt} = f(x_s) = 0 \quad (6.20)$$

- Abbruch der Taylor-Reihenentwicklung nach dem linearen Glied in (6.19) liefert das linearisierte Prozessmodell:

$$\frac{dx}{dt} = \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{x_s} \cdot (x - x_s) \quad (6.21)$$

- Die linke Seite von (6.21) kann man wegen (6.20) auch so schreiben:

$$\frac{dx}{dt} = \frac{d}{dt}(x - x_s) \quad (6.22)$$

- (6.21) und (6.22) kombiniert ergibt:

$$\frac{d\Delta x}{dt} = a \cdot \Delta x \quad \text{mit} \quad a = \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{x_s} \quad (6.23a,b)$$

mit der Abstandsvariable (auch: Distanzvariable)

$$\Delta x \equiv x - x_s \quad (6.24)$$

- Für (6.23a) gilt die Anfangsbedingung

$$\Delta x(t=0) = x(t=0) - x_s = 0, \quad (6.25)$$

falls der Anfangszustand ein stationärer Arbeitspunkt ist.

6.2.2 Eine Zustandsgröße und eine Eingangsgröße

- Das Prozessmodell lautet dann allgemein:

$$\frac{dx}{dt} = f(x, u) \quad (6.26)$$

- Die Taylor-Reihe der Funktion f bzgl. x und u ist gegeben durch:

$$f(x, u) = f(x_s, u_s) + \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{x_s, u_s} \cdot (x - x_s) + \left. \frac{\partial f}{\partial u} \right|_{x_s, u_s} \cdot (u - u_s) + THO \quad (6.27)$$

- Der stationäre Arbeitspunkt ist hier definiert durch:

$$\frac{dx_s}{dt} = f(x_s, u_s) = 0 \quad (6.28)$$

- Abbruch der Taylor-Reihenentwicklung nach den linearen Gliedern in (6.27) liefert das linearisierte Prozessmodell:

$$\frac{dx}{dt} = \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{x_s, u_s} \cdot (x - x_s) + \left. \frac{\partial f}{\partial u} \right|_{x_s, u_s} \cdot (u - u_s) \quad (6.29)$$

- Mit den Abstandsvariablen (auch: Distanzvariablen)

$$\Delta x \equiv x - x_s \quad \text{und} \quad \Delta u \equiv u - u_s \quad (6.30)$$

folgt:

$$\frac{d\Delta x}{dt} = a \cdot \Delta x + b \cdot \Delta u \quad \text{mit} \quad a = \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{x_s, u_s} \quad \text{und} \quad b = \left. \frac{\partial f}{\partial u} \right|_{x_s, u_s} \quad (6.31)$$

- Für (6.31) gilt die Anfangsbedingung

$$\Delta x(t=0) = x(t=0) - x_s = 0, \quad (6.32)$$

falls sich der Anfangszustand $x(t=0)$ am stationären Arbeitspunkt x_s befindet.

- Im Sinne der Zustandsraumformulierung, (6.14) und (6.15), wird nun die Ausgangsgröße y als Funktion der Zustandsgröße x und der Eingangsgröße u eingeführt. Auch diese Funktion ist im allgemeinen nichtlinearer Art:

$$y = g(x, u) \quad (6.33)$$

- Auch (6.33) kann analog zu (6.26) mit Hilfe einer Taylor-Reihenentwicklung und Abbruch nach den linearen Gliedern linearisiert werden:

$$g(x, u) = g(x_s, u_s) + \left. \frac{\partial g}{\partial x} \right|_{x_s, u_s} \cdot (x - x_s) + \left. \frac{\partial g}{\partial u} \right|_{x_s, u_s} \cdot (u - u_s) + THO \quad (6.34)$$

- Die Ausgangsgröße am stationären Arbeitspunkt ist gegeben durch:

$$y_s = g(x_s, u_s) \quad (6.35)$$

- Mit der Abstandsvariablen (auch: Distanzvariablen)

$$\Delta y \equiv y - y_s \quad (6.36)$$

folgt:

$$\Delta y = c \cdot \Delta x + d \cdot \Delta u \quad \text{mit } c = \left. \frac{\partial g}{\partial x} \right|_{x_s, u_s} \quad \text{und } d = \left. \frac{\partial g}{\partial u} \right|_{x_s, u_s} \quad (6.37)$$

6.2.3 Verallgemeinerung: Mehrgrößensysteme

- Wenn

$$x^T = (x_1, x_2, \dots, x_n) \quad \text{Zustandsvektor}$$

$$u^T = (u_1, u_2, \dots, u_m) \quad \text{Eingangsvektor}$$

$$y^T = (y_1, y_2, \dots, y_p) \quad \text{Ausgangsvektor}$$

dann kann man ein (nichtlineares) Prozessmodell allgemein so schreiben:

$$\frac{dx}{dt} = f(x, u) \quad (6.38)$$

$$y = g(x, u) \quad (6.39)$$

mit

$$f^T = (f_1(x, u), f_2(x, u), \dots, f_n(x, u))$$

$$g^T = (g_1(x, u), g_2(x, u), \dots, g_p(x, u))$$

- Einführung der Abstandsvariablen:

$$\Delta x = x - x_s \quad (6.40)$$

$$\Delta u = u - u_s \quad (6.41)$$

$$\Delta y = y - y_s \quad (6.42)$$

- Linearisiertes Prozessmodell („Zustandsraummodell“):

$$\frac{d\Delta x}{dt} = A \cdot \Delta x + B \cdot \Delta u \quad (6.43)$$

$$\Delta y = C \cdot \Delta x + D \cdot \Delta u \quad (6.44)$$

wobei die Matrizen A , B , C und D die partiellen Ableitungen der Funktionsvektoren f und g nach den Zustandsgrößen x bzw. den Eingangsgrößen u als Elemente enthalten:

$$A = \left[\frac{\partial f_i}{\partial x_j} \Big|_{x_s, u_s} \right] \quad B = \left[\frac{\partial f_i}{\partial u_k} \Big|_{x_s, u_s} \right] \quad (6.45a,b)$$

$$i = 1, \dots, n; \quad j = 1, \dots, n \quad i = 1, \dots, n; \quad k = 1, \dots, m$$

$$C = \left[\frac{\partial g_l}{\partial x_j} \Big|_{x_s, u_s} \right] \quad D = \left[\frac{\partial g_l}{\partial u_k} \Big|_{x_s, u_s} \right] \quad (6.45c,d)$$

$$l = 1, \dots, p; \quad j = 1, \dots, n \quad l = 1, \dots, p; \quad k = 1, \dots, m$$

- Wichtig: Häufig werden in der Literatur zwecks Schreibvereinfachung die „ Δ “ in (6.43) und (6.44) unterdrückt. (Gemeint ist aber stets die Abweichung vom stationären Arbeitspunkt!)

7 Stabilität autonomer Systeme

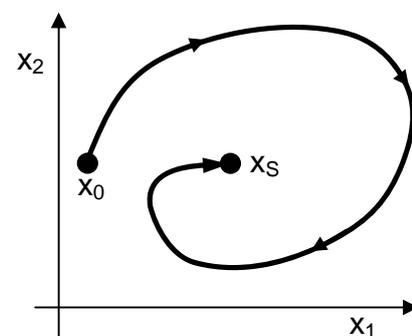
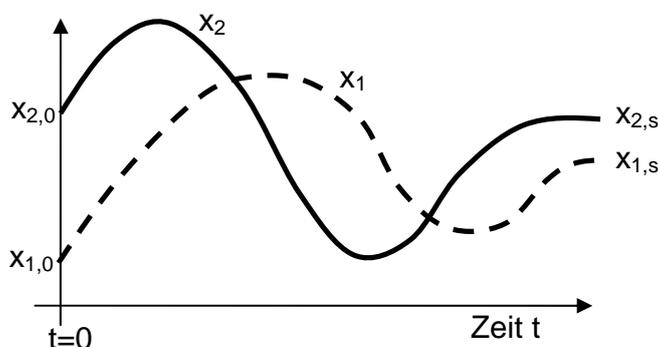
- Für den Fall, dass die Eingangsgrößen eines Systems konstant gehalten werden, ist die Distanzvariable $\Delta u = 0$ (engl. *zero-input form*).
- Das verbleibende Prozessmodell beschreibt dann das autonome dynamische Prozessverhalten nach der Auslenkung des Systems aus seinem stationären Arbeitspunkt.
- Die Analyse des autonomen Verhaltens liefert Informationen über die Stabilität des stationären Arbeitspunktes eines Systems nach Aufprägen einer Störung/Auslenkung.

7.1 Trajektorien und Phasenebene

- Betrachte ein zweidimensionales dynamisches System, d.h. einen Prozess mit nur zwei Zustandsgrößen, z.B. der Konzentration eines Stoffes und der Temperatur:

$$\begin{pmatrix} \dot{x}_1 \\ \dot{x}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1(x_1, x_2) \\ f_2(x_1, x_2) \end{pmatrix} \quad \text{mit den AB} \quad \begin{pmatrix} x_1(t=0) \\ x_2(t=0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_{1,0} \\ x_{2,0} \end{pmatrix} \quad (7.1)$$

- Eine Lösung von (7.1), $x(t)$, kann als die Parameterdarstellung einer Kurve in der x_1 - x_2 -Ebene dargestellt werden. Dabei wird die Zeit t als Parameter aufgefasst.
- Es ist oftmals hilfreich, diese Kurve als eine Bahn oder Trajektorie zu betrachten, die von einem sich bewegenden Teilchen durchlaufen wird, dessen Geschwindigkeit dx/dt durch die DGL (7.1) beschrieben wird.
- Die x_1 - x_2 -Ebene ist die Phasenebene, und die Menge aller Trajektorien für verschiedene AB wird auch Phasenporträt genannt.



7.2 Stabilität und Instabilität

- Ein stationärer Arbeitspunkt eines zweidimensionalen dynamischen Systems erfüllt die Gleichungen

$$\begin{pmatrix} \dot{x}_1 \\ \dot{x}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1(x_{1,s}, x_{2,s}) \\ f_2(x_{1,s}, x_{2,s}) \end{pmatrix} \quad (7.2)$$

und heißt stabil, wenn für ein gegebenes $\varepsilon > 0$ ein $\delta > 0$ existiert, so dass jede Lösung $x = x(t)$ des Systems

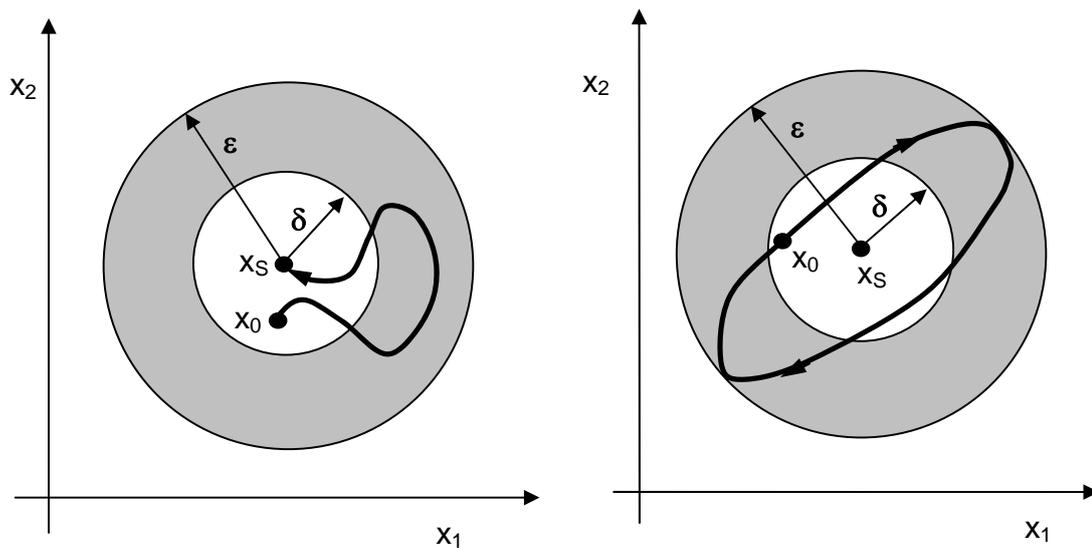
$$\dot{x} = f(x) \quad \text{mit} \quad x(t=0) = x_0,$$

die zur Zeit $t = 0$ $\|x(t=0) - x_s\| < \delta$ erfüllt, existiert und $\|x(t) - x_s\| < \varepsilon$ für alle $t \geq 0$ erfüllt.

- D.h., alle Lösungen, die „ausreichend nah“ (innerhalb einer Entfernung δ) um x_s beginnen, verbleiben „nah“ (innerhalb einer Entfernung ε) bei x_s . Die Trajektorie der Lösung muss sich jedoch für $t \rightarrow \infty$ nicht unbedingt dem stationären Arbeitspunkt nähern.
- Ein stationärer Punkt, der nicht stabil ist, heißt instabil.

7.3 Asymptotische Stabilität

- Ein betrachteter stationärer Arbeitspunkt heißt asymptotisch stabil, wenn er stabil ist und wenn ein δ_0 mit $0 < \delta_0 < \delta$ existiert, für welches bei Vorhandensein einer Lösung $x = x(t)$, die $\|x(t=0) - x_s\| < \delta_0$ erfüllt, $\lim_{t \rightarrow \infty} x(t) = x_s$ gilt. D. h., dass Trajektorien des Systems, die genügend nahe bei x_s beginnen, nicht nur „nah“ bei x_s verbleiben, sondern dass sie sich für $t \rightarrow \infty$ dem stationären Punkt auch nähern. Dies gilt für die Trajektorie in der Abbildung unten links, nicht jedoch für die Trajektorie im rechten Bild.



- Für den Zusammenhang zwischen der Stabilität des nichtlinearen Originalsystems und des korrespondierenden linearisierten Systems (vgl. Kap.6)

$$\dot{x} = A \cdot x \quad \text{mit den AB: } x(t=0) = x_0, \quad \text{wobei } A = \left[\frac{\partial f_i}{\partial x_j} \Big|_{x_s} \right] \quad (7.3)$$

haben die Mathematiker Ljapunov und Poincaré gegen Ende des 19. Jahrhunderts das folgende fundamentale Theorem aufgestellt (hier ohne Beweis angegeben, siehe dazu [4]):

- Der stationäre Arbeitspunkt x_s ist asymptotisch stabil, wenn das korrespondierende linearisierte System asymptotisch stabil ist.
 - Das stationäre Arbeitspunkt x_s ist instabil, wenn das korrespondierende linearisierte System instabil ist.
- Dies bedeutet: Stabilitätsaussagen des linearisierten Systems (7.3) lassen sich auf das nichtlineare System (7.1) übertragen, sofern man sich auf (genügend) kleine Auslenkungen aus dem stationären Arbeitspunkt beschränkt.

7.4 Stabilität linearer Systeme

- Eine Lösung für (7.3) lautet (siehe [4]):

$$x = \xi \cdot e^{\lambda t} \quad (7.4)$$

mit dem Eigenwert λ und dem zugehörigen Eigenvektor ξ .

- Einsetzen von (7.4) in (7.3) liefert:

$$\lambda \cdot \xi \cdot e^{\lambda t} = A \cdot \xi \cdot e^{\lambda t} \quad (7.5)$$

- Da der Exponentialterm in (7.5) von Null verschieden ist, gilt:

$$A \cdot \xi = \lambda \cdot \xi \quad \text{oder} \quad (A - \lambda I) \cdot \xi = 0 \quad (7.6)$$

I : ($n \times n$)-Einheitsmatrix.

- Um das DGL-System (7.3) lösen zu können, muss man also zunächst das algebraische Gleichungssystem (7.6) lösen. Dies ist genau das Problem, bei dem die Eigenwerte und die zugehörigen Eigenvektoren der Matrix A bestimmt werden. Der durch (7.4) gegebene Vektor x ist daher eine Lösung von (7.3), wenn λ ein Eigenwert und ξ ein zugehöriger Eigenvektor der Koeffizientenmatrix A ist.

- (7.6) besitzt nur dann von Null verschiedene Lösungen, wenn λ so gewählt werden kann, dass

$$\det(A - \lambda I) = 0 \quad (7.7)$$

- (7.7) ist das charakteristische Polynom. Für ein n -dimensionales dynamisches System besitzt dieses Polynom den Grad n bezgl. λ , d.h. es gibt n Eigenwerte $\lambda_1, \dots, \lambda_n$, von denen einige auch mehrfach vorkommen können. Tritt ein gegebener Eigenwert als eine m -fache Wurzel von (7.7) auf, so sagt man, dass er die Multiplizität m besitzt.

- Die allgemeine Lösung von (7.3) lässt sich als Linearkombination von linear unabhängigen Lösungen des Typs (7.4) darstellen:

$$x = c_1 \cdot \xi_1 \cdot e^{\lambda_1 t} + c_2 \cdot \xi_2 \cdot e^{\lambda_2 t} + \dots + c_n \cdot \xi_n \cdot e^{\lambda_n t}, \quad (7.8)$$

wobei c_1 bis c_n willkürliche Konstanten sind.

- Für die Stabilität eines autonomen linearen Systems mit konstanten Koeffizienten gilt (hier ohne Beweis angegeben, vgl. [4]):

- (1) Wenn alle Eigenwerte λ_i der Systemmatrix A negative Realteile besitzen, ist der betrachtete Arbeitspunkt asymptotisch stabil.
- (2) Wenn ein einziger Eigenwerte λ_i der Systemmatrix A einen positiven Realteil besitzt, ist der betrachtete Arbeitspunkt instabil.
- (3) Wenn die Eigenwerte der Systemmatrix A rein imaginär sind, d.h. die Realteile verschwinden, ist der betrachtete Arbeitspunkt stabil, jedoch nicht asymptotisch stabil.

7.5 Zweidimensionale Systeme

- Betrachte: Lineares dynamisches System, das beschrieben wird durch

$$\begin{pmatrix} \dot{x}_1 \\ \dot{x}_2 \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \quad \text{mit den AB} \quad \begin{pmatrix} x_1(t=0) \\ x_2(t=0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_{1,0} \\ x_{2,0} \end{pmatrix} \quad (7.9)$$

7.5.1 Stabilität

- Anwendung von (7.7) liefert die charakteristische Gleichung:

$$\lambda^2 - sp(A) \cdot \lambda + \det(A) = 0 \quad (7.10)$$

Spur: $sp(A) = A_{11} + A_{22}$, Determinante: $\det(A) = A_{11}A_{22} - A_{21}A_{12}$

- Eigenwerte (Lösungen der charakt. Gleichung):

$$\lambda_{1,2} = \frac{sp(A)}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{sp(A)}{2}\right)^2 - \det(A)} \quad (7.11)$$

Die Eigenwerte können rein reell, rein imaginär oder ein Paar konjugiert komplexer Zahlen sein.

- Das System ist asymptotisch stabil, wenn die Eigenwerte negative Realteile haben. Dies ist der Fall, wenn (siehe z.B. [3]):

$$sp(A) < 0 \quad \text{und} \quad \det(A) > 0 \quad (7.12)$$

gleichgültig, ob die Eigenwerte rein reelle oder komplexe Zahlen sind.

7.5.2 Fallunterscheidung

- Je nach Lage der Eigenwerte der Matrix A , können unterschiedliche Fälle betrachtet werden. Im folgenden soll für diese unterschiedlichen Fälle das dynamische Verhalten anhand des Phasenporträts charakterisiert werden.

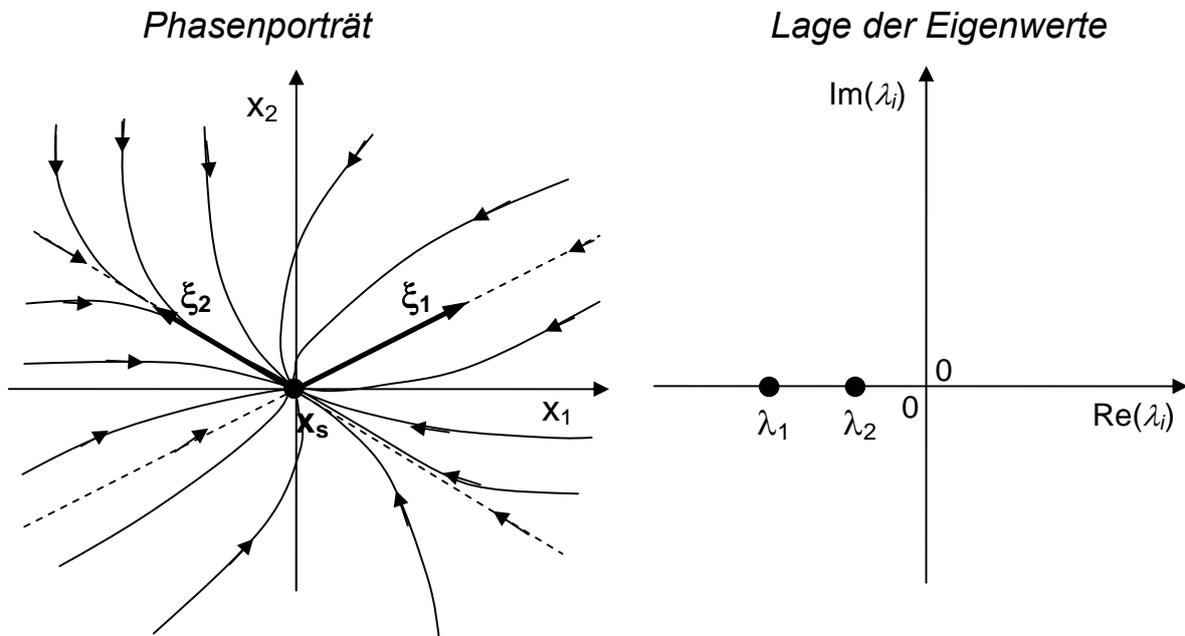
Fall (a): Zwei verschiedene reelle Eigenwerte mit gleichem Vorzeichen

- Allg. Lösung: $x(t) = c_1 \cdot \xi_1 \cdot e^{\lambda_1 t} + c_2 \cdot \xi_2 \cdot e^{\lambda_2 t}$ (7.13)

- Der stationäre Arbeitspunkt wird in diesem Fall als Knoten bezeichnet.

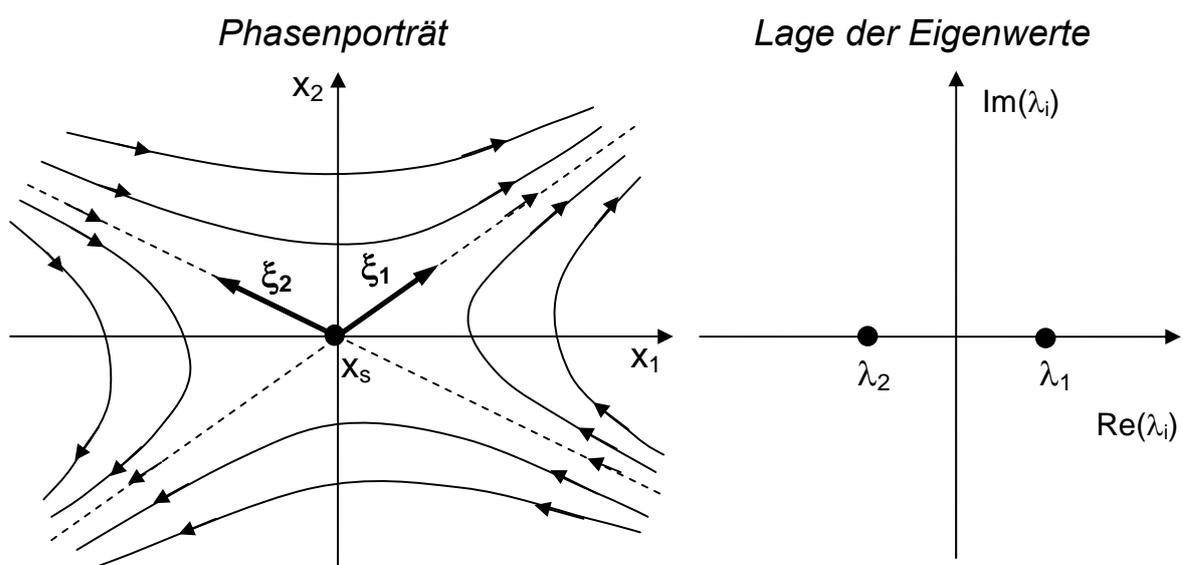
- **Fall (a.1): stabiler Knoten**, falls Eigenwerte $\lambda_1 < 0, \lambda_2 < 0$ (siehe Abb. links). Aus (7.13) folgt, dass $x(t) \rightarrow 0$ für $t \rightarrow \infty$, d.h. alle Lösungen nähern sich dem stationären Betriebspunkt.

- **Fall (a.2): instabiler Knoten**, falls Eigenwerte: $\lambda_1 > 0, \lambda_2 > 0$; qualitativ gleiches Trajektorienbild, aber mit nach außen weisenden Zeitpfeilen. Alle Lösungen laufen für $t \rightarrow \infty$ vom stationären Betriebspunkt weg.



Fall (b): Reelle Eigenwerte mit entgegengesetztem Vorzeichen

- Allg. Lösung: $x(t) = c_1 \xi_1 \cdot e^{\lambda_1 t} + c_2 \xi_2 \cdot e^{\lambda_2 t}$ (7.14)
- Stationärer Arbeitspunkt wird als Sattelpunkt bezeichnet.
- Eigenwerte: $\lambda_1 > 0, \lambda_2 < 0$



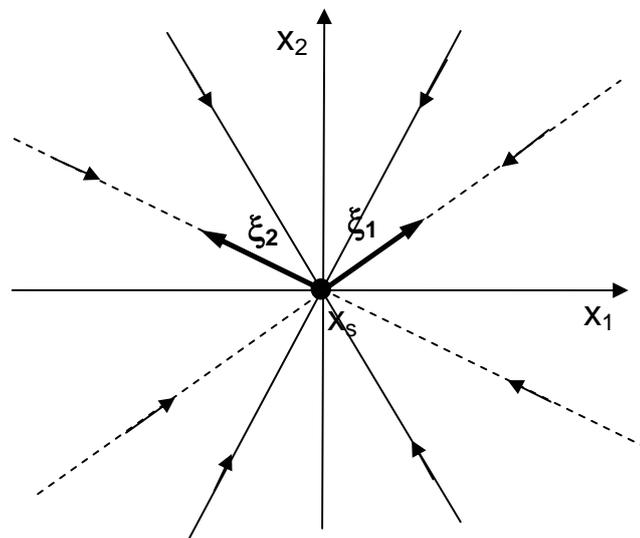
- Der positive Exponentialterm in (7.14) ist für große t -Werte der dominierende Term. Daher nähern sich alle Lösungen für $t \rightarrow \infty$ asymptotisch jener Geraden, die durch die zum positiven Eigenwert $\lambda_1 > 0$ zugehörigen Eigenvektor ξ_1 festgelegt ist.
- Die einzigen Lösungen, die sich dem stationären Punkt x_s nähern, sind diejenigen, die auf der durch ξ_2 vorgegebenen Geraden beginnen.

Fall (c): Gleiche reelle Eigenwerte ($\lambda_1 = \lambda_2$)

- Wir betrachten den Fall, dass $\lambda < 0$. Es existieren zwei Unterfälle, je nachdem ob der doppelte Eigenwert zwei Eigenvektoren oder nur einen unabhängigen Eigenvektor besitzt.

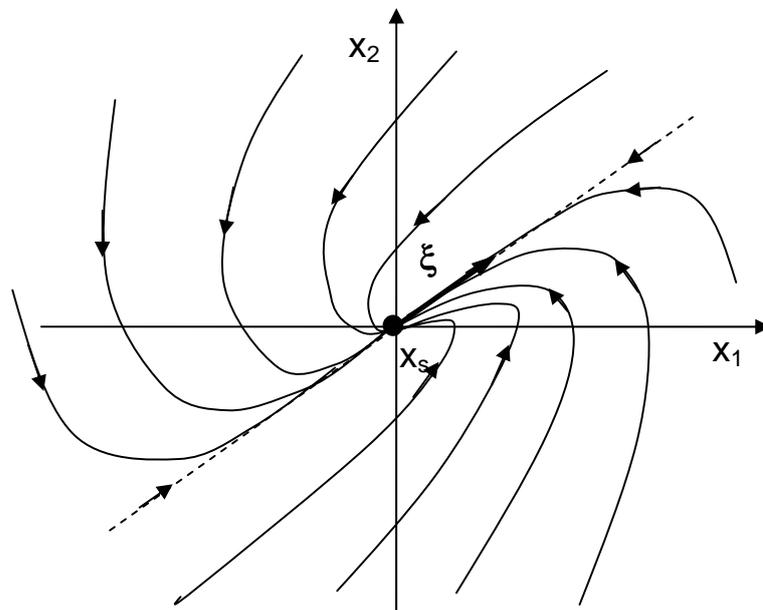
• Fall (c.1): Zwei unabhängige Eigenvektoren

- Allg. Lösung: $x(t) = c_1 \xi_1 \cdot e^{\lambda t} + c_2 \xi_2 \cdot e^{\lambda t}$ (7.15)
- Der stationäre Punkt wird ebenfalls als Knoten bezeichnet. Das Verhältnis x_2/x_1 ist unabhängig von t . Folglich liegt jede Trajektorie auf einer Geraden, die durch den stationären Punkt läuft (vgl. Abb.).



• Fall (c.2): Ein unabhängiger Eigenvektor

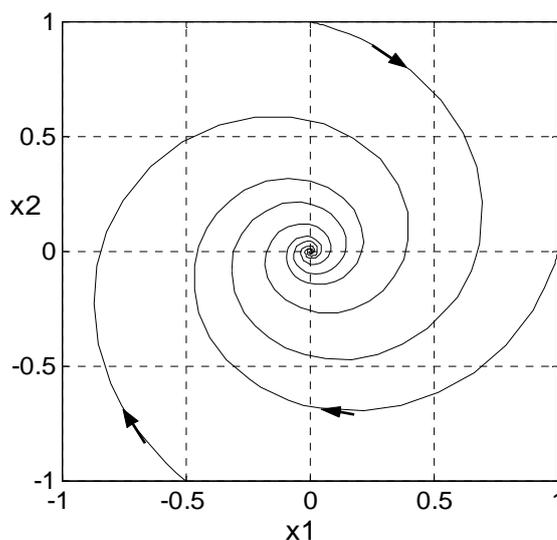
- Allg. Lösung: $x(t) = c_1 \xi \cdot e^{\lambda t} + c_2 (\xi t e^{\lambda t} + \eta e^{\lambda t})$ (7.16)
- wobei ξ der Eigenvektor und η der verallgem. Eigenvektor ist, der mit dem doppelten Eigenwert verbunden ist.



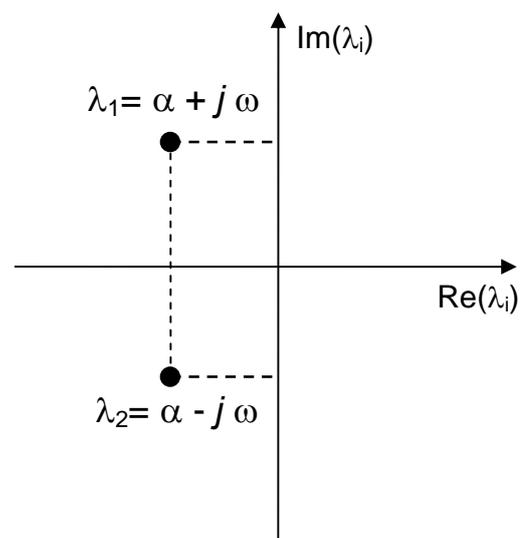
Fall (d): Zwei konjugiert komplexe Eigenwerte ($\lambda_{1,2} = \alpha \pm j\omega$)

- Allg. Lösung: $x(t) = c_1 \xi_1 \cdot e^{\alpha t} \cos(\omega t) + c_2 \xi_2 \cdot e^{\alpha t} \sin(\omega t)$ (7.17)
- Der stationäre Arbeitspunkt wird in diesem Fall als Strudel bezeichnet.
- **Fall (d.1): stabiler Strudel**, falls $\text{Re}(\lambda_i) = \alpha < 0$. Aus (7.17) folgt, dass $x(t) \rightarrow 0$ für $t \rightarrow \infty$; alle Lösungen nähern sich spiralförmig dem stationären Betriebspunkt.

Phasenporträt



Lage der Eigenwerte

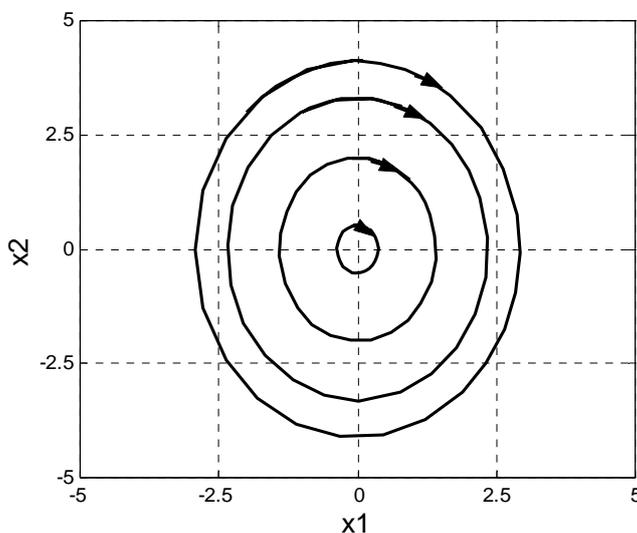


- **Fall (d.2): instabiler Strudel**, falls $\text{Re}(\lambda_i) = \alpha > 0$. Qualitativ gleiches Trajektorienbild, aber mit nach außen weisenden Zeitpfeilen. Alle Lösungen laufen für $t \rightarrow \infty$ spiralförmig vom stationären Betriebspunkt weg.

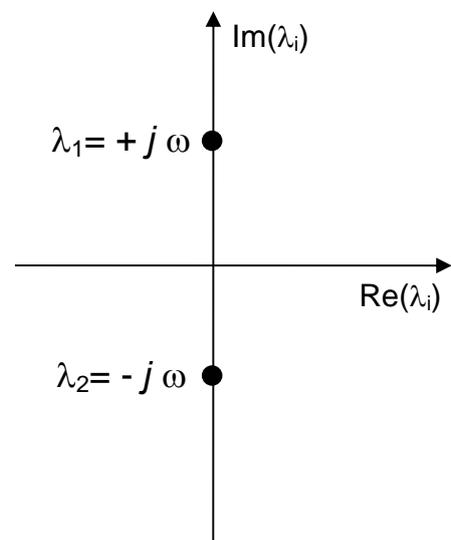
Fall (e): Rein imaginäre Eigenwerte ($\lambda_{1,2} = \pm j\omega$)

- Allg. Lösung: $x(t) = c_1 \xi_1 \cdot \cos(\omega t) + c_2 \xi_2 \cdot \sin(\omega t)$ (7.18)
- Der stationäre Arbeitspunkt wird in diesem Fall als Wirbel bzw. Zentrum bezeichnet (siehe Abb. unten)
- Die Trajektorien umlaufen, entsprechend der periodischen Lösung (7.18), den stationären Arbeitspunkt. Es sind Ellipsen, die ein Zentrum im Ursprung besitzen.
- Wird das System gestört, so rutscht der Zustand auf eine andere Bahnkurve und nähert sich dem stationären Arbeitspunkt nicht wieder. Das System wird als grenzstabil bezeichnet.

Phasenporträt



Lage der Eigenwerte



7.5.3 Zusammenfassung der Typen stationärer Arbeitspunkte

- Die Tabelle unten fasst die oben angesprochenen Fälle zusammen.
- Unter Nutzung von (7.11) kann die Stabilität zweidimensionaler Systeme in der $\text{sp}(A)$ - $\text{det}(A)$ -Ebene kompakt dargestellt werden.

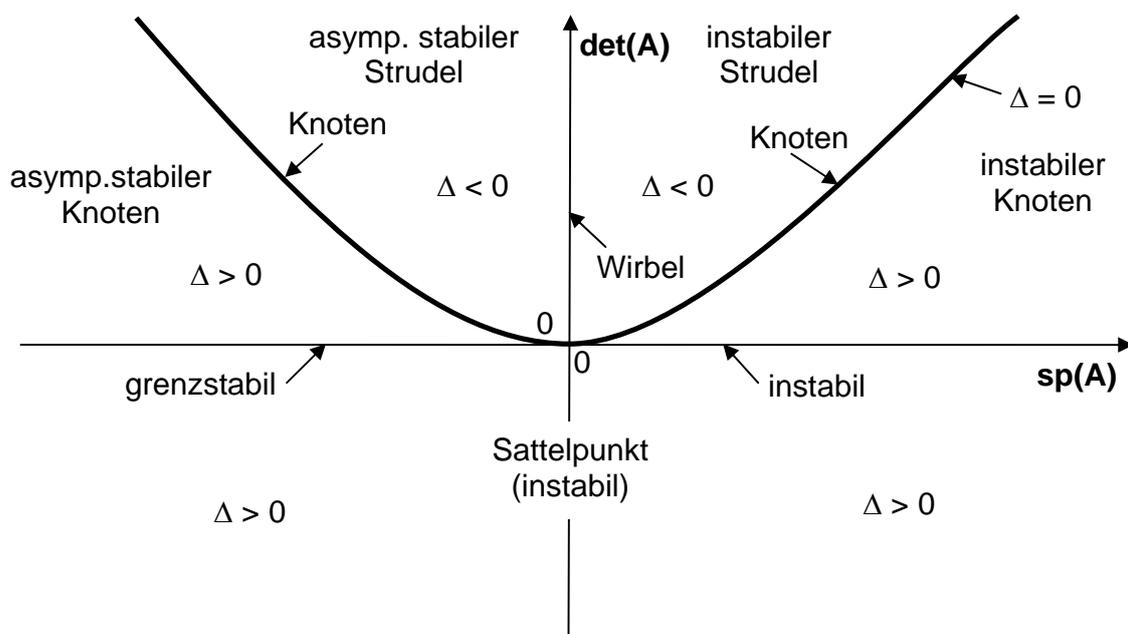
Tabelle: Typen und Stabilitätscharakter stationärer Arbeitspunkte

Eigenwerte	Typ	Stabilitätscharakter
$\lambda_2 < \lambda_1 < 0$	Knoten	asymptotisch stabil
$\lambda_2 > \lambda_1 > 0$	Knoten	instabil
$\lambda_2 = \lambda_1 = \lambda$	Knoten	asymptotisch stabil, falls $\lambda < 0$; instabil, falls $\lambda > 0$
$\lambda_1 < 0 < \lambda_2$	Sattelpunkt	instabil
$\lambda_{1,2} = \alpha \pm j \omega$	Strudel/Spirale	asymptotisch stabil, falls $\alpha < 0$; instabil, falls $\alpha > 0$
$\lambda_{1,2} = \pm j \omega$	Wirbel/Zentrum	grenzstabil

Eigenwerte:

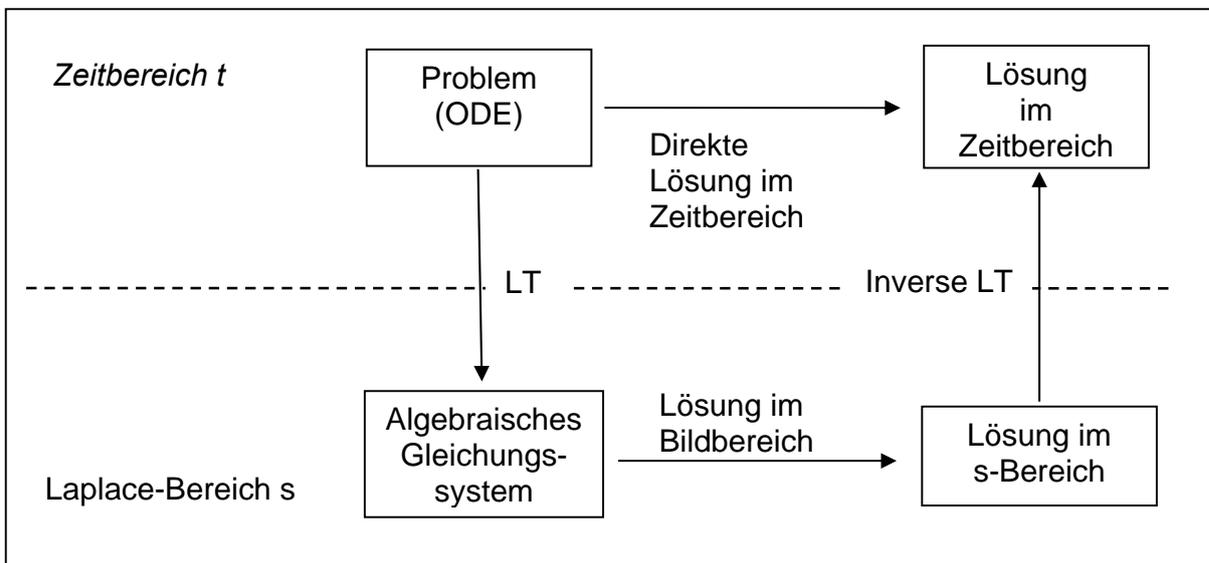
$$\lambda_{1,2} = \frac{sp(A)}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{sp(A)}{2}\right)^2 - \det(A)} = \frac{1}{2} \{sp(A) \pm \sqrt{\Delta}\}$$

$$\Delta = (sp(A))^2 - 4 \cdot \det(A)$$

Stabilitätskarte:

8 Einführung der Laplace-Transformation (LT)

8.1 Grundidee



- Hauptanwendung: Lösung von DGL-Systemen (Gewöhnliche DGL, *engl.* Ordinary Differential Equations = ODE)
- Einschränkung: LT funktioniert als Lösungsmethode nur bei linearen DGL

8.2 Definition der Laplace-Transformation

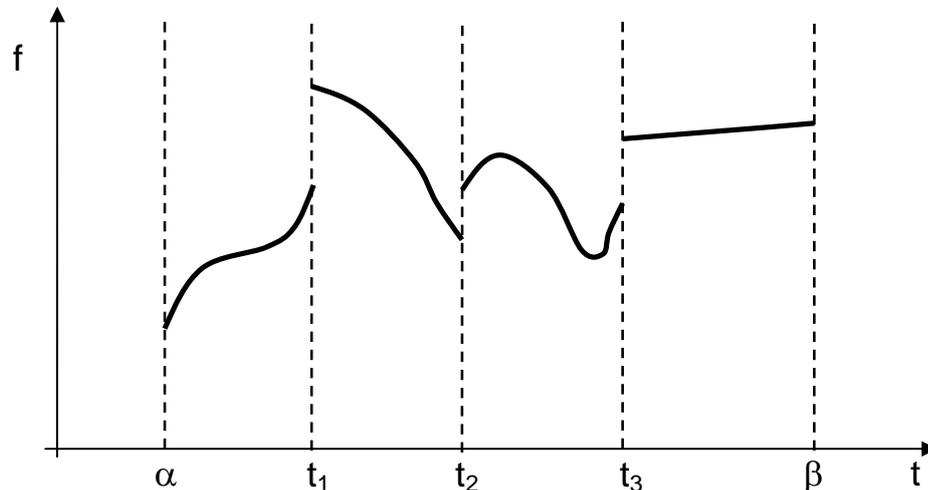
- Definition: Sei $f(t)$ eine Funktion im Zeitbereich t . Dann ist die Laplace-Transformierte $L[f(t)]$ definiert als

$$L[f(t)] = F(s) = \int_0^{\infty} f(t) \cdot e^{-st} dt \quad (8.1)$$

wobei $s \in \mathbb{C}$; einschränkend ist $s \in \mathbb{R}$ ausreichend.

- $L[f(t)]$ existiert, falls das Integral für einen Wert von s konvergiert.
- Hinreichende Bedingung für die **Existenz** des Integrals:
Satz: Ist die Funktion $f(t)$ in jedem endlichen Intervall $0 \leq t \leq N$ stückweise stetig und von exponentieller Ordnung γ , dann existiert ihre Laplace-Transformierte $F(s)$ für alle $s > \gamma$.
- Stückweise stetige Funktionen:
 An den Endpunkten der Teilintervalle existieren die rechts- und linksseitigen Grenzwerte der Funktion:

$$\left. \begin{aligned} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} f(t_2 + \varepsilon) = f(t_2 + 0) = f(t_{2+}) \\ \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} f(t_2 - \varepsilon) = f(t_2 - 0) = f(t_{2-}) \end{aligned} \right\} \text{mit } \varepsilon > 0 \quad (8.2)$$



- Funktionen von exponentieller Ordnung:

Existieren Konstanten $M > 0$ und γ , so dass für alle $t > 0$ gilt

$$\left| e^{-\gamma t} \cdot f(t) \right| < M \quad \text{oder} \quad \left| f(t) \right| < M \cdot e^{\gamma t} \quad (8.3)$$

so sagen wir, dass $f(t)$ für $t \rightarrow \infty$ von exponentieller Ordnung γ ist.

Bsp. 1: $f(t) = t^2$ ist von exp. Ordnung, da für alle $t > 0$ gilt: $\left| t^2 \right| = t^2 < e^{3t}$.

Bsp. 2: $f(t) = e^{t^3}$ ist nicht von exp. Ordnung, da $\left| e^{-\gamma t} \cdot e^{t^3} \right| = e^{t^3 - \gamma t}$ für $t \rightarrow \infty$ nicht beschränkt ist.

- Die Laplace-Transformation ist eine lineare Operation:

$$\begin{aligned} L[a_1 f_1(t) + a_2 f_2(t)] &= \int_0^{\infty} (a_1 f_1(t) + a_2 f_2(t)) e^{-st} dt = \int_0^{\infty} a_1 f_1(t) e^{-st} dt + \int_0^{\infty} a_2 f_2(t) e^{-st} dt = \\ &= a_1 \int_0^{\infty} f_1(t) e^{-st} dt + a_2 \int_0^{\infty} f_2(t) e^{-st} dt = a_1 L[f_1(t)] + a_2 L[f_2(t)] \end{aligned} \quad (8.4)$$

⇒ Additivität und Homogenität sind erfüllt; daher liegt eine lineare Operation vor.

- Inverse Laplace-Transformation:

$$L^{-1}[F(s)] = f(t) \quad (8.5)$$

8.3 Beispiele für Laplace-Transformierte

8.3.1 Exponentialfunktion

- Diese Funktion tritt bei der Lösung linearer DGL häufig auf.

$$f(t) = e^{-at} \quad \text{mit } a > 0 \quad (8.6)$$

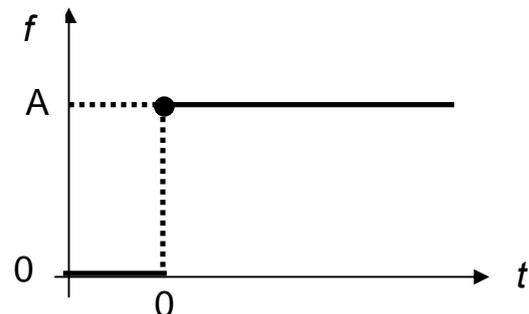
$$\begin{aligned} L[f(t)] &= \int_0^{\infty} f(t) \cdot e^{-st} dt = \int_0^{\infty} e^{-(s+a)t} dt = -\frac{1}{s+a} \left[e^{-(s+a)t} \right]_0^{\infty} = \\ &= -\frac{1}{s+a} [0 - 1] = \frac{1}{s+a} \end{aligned} \quad (8.7)$$

Die Laplace-Transformierte ist nur beschränkt, wenn $s > -a$ gilt. Wir nehmen an, dass diese Bedingung erfüllt ist.

8.3.2 Sprungfunktion

- Sie ist ein wichtiges Befragungssignal in der Prozessdynamik.

$$f(t) = \begin{cases} 0 & \text{für } t < 0 \\ A & \text{für } t \geq 0 \end{cases} \quad (8.8)$$



$$\begin{aligned} L[f(t)] &= \lim_{\substack{\text{für } t > 0 \\ T \rightarrow \infty \\ \varepsilon \rightarrow 0}} \left(\int_{\varepsilon}^T A \cdot e^{-st} dt \right) = A \cdot \lim_{\substack{T \rightarrow \infty \\ \varepsilon \rightarrow 0}} \left[-\frac{1}{s} e^{-st} \right]_{\varepsilon}^T = \\ &= -\frac{A}{s} \left(\lim_{T \rightarrow \infty} (e^{-sT}) - \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} (e^{-s\varepsilon}) \right) = -\frac{A}{s} (0 - 1) = \frac{A}{s} \end{aligned} \quad (8.9)$$

- Inverse Laplace-Transformation:

$$L^{-1} \left[\frac{A}{s} \right] = A \quad (8.10)$$

8.3.3 Ableitungen

- Für die LT der ersten Ableitung nach der Zeit gilt:

$$L\left[\frac{df(t)}{dt}\right] = \int_0^{\infty} \left(\frac{df(t)}{dt}\right) \cdot e^{-st} dt \quad (8.11)$$

Lösung des Integrals mit Hilfe der partiellen Integration:

$$\int_a^b u \cdot v' dt = [u \cdot v]_a^b - \int_a^b u' \cdot v dt \quad (8.12)$$

Anwendung von (8.12) auf (8.11) liefert:

$$\begin{aligned} L\left[\frac{df(t)}{dt}\right] &= \left[e^{-st} f(t)\right]_0^{\infty} - \int_0^{\infty} f(t) \cdot (-se^{-st}) dt = \\ &= (0 - f(0)) + s \cdot F(s) = s \cdot F(s) - f(0) \end{aligned} \quad (8.13)$$

für $|s| > \gamma$

#) Anmerk.: Wegen $|f(t)| < M \cdot e^{\gamma t}$, d.h. $f(t)$ ist für $t \rightarrow \infty$ von exponentieller Ordnung γ .

- Für die LT höherer Ableitungen gilt: (8.14)

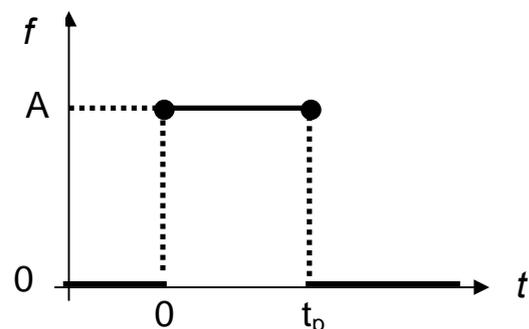
$$L\left[\frac{d^n f(t)}{dt^n}\right] = s^n F(s) - s^{n-1} f(0) - s^{n-2} \left.\frac{df}{dt}\right|_0 - \dots - s \left.\frac{d^{(n-2)} f}{dt^{(n-2)}}\right|_0 - \left.\frac{d^{(n-1)} f}{dt^{(n-1)}}\right|_0$$

Zur Auswertung von (8.14) werden also n Anfangsbedingungen für die Funktion f benötigt.

8.3.4 Pulsfunktion (auch: Stoßfunktion)

- Ein Puls der Dauer t_p mit der Amplitude A ist definiert durch:

$$f(t) = \begin{cases} A & \text{für } 0 \leq t \leq t_p \\ 0 & \text{für } t > t_p \end{cases} \quad (8.15)$$



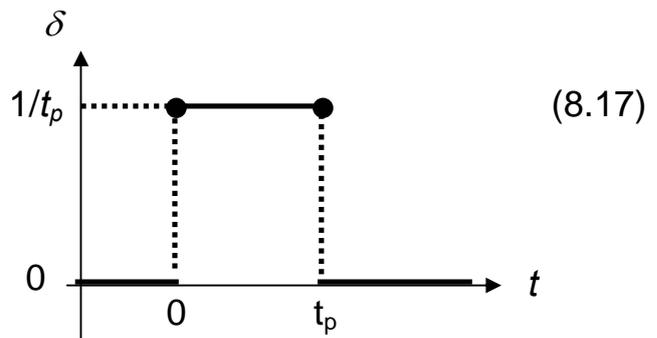
$$L[f(t)] = \int_0^{\infty} f(t) \cdot e^{-st} dt = \int_0^{t_p} A e^{-st} dt = -\frac{A}{s} \left[e^{-st}\right]_0^{t_p} = \frac{A}{s} (1 - e^{-st_p}) \quad (8.16)$$

8.3.5 Dirac-Puls

- Der Dirac-Puls ist ein Puls unendlich kurzer Dauer t_p mit dem Flächeninhalt 1. Es handelt sich um ein Signal, das sich experimentell nicht realisieren lässt, aber in theoretischen Betrachtungen häufig als Modellsignal herangezogen wird.

- Definition:

$$\delta(t) = \lim_{t_p \rightarrow 0} \begin{cases} 1/t_p & \text{für } 0 \leq t \leq t_p \\ 0 & \text{für } t > t_p \end{cases}$$



(8.17)

$$L[\delta(t)] = \lim_{t_p \rightarrow 0} \left(\int_0^{\infty} \frac{1}{t_p} \cdot e^{-st} dt \right) = \lim_{t_p \rightarrow 0} \left(\frac{1}{t_p s} (1 - e^{-st_p}) \right) \stackrel{\text{Regel von de l'Hospital}}{=} 1$$

$$= \lim_{t_p \rightarrow 0} \left(\frac{s \cdot e^{-st_p}}{s} \right) = 1 \quad (8.18)$$

- Inverse Laplace-Transformation:

$$L^{-1}[1] = \delta(t) \quad (8.19)$$

8.3.6 Integrale

- Die LT von Integralen ist wichtig in der Regelungstechnik, da dort oftmals Regler verwendet werden, deren Eingangsgröße das Integral des Fehlers zwischen dem Sollwert und dem tatsächlichen Wert der Regelgröße ist.

$$L \left[\int_0^t f(\tau) d\tau \right] = \int_0^{\infty} \left[\int_0^t f(\tau) d\tau \right] \cdot e^{-st} dt \quad (8.20)$$

Die Lösung von (8.20) gelingt mit Hilfe der partiellen Integration (8.12):

$$L \left[\int_0^t f(\tau) d\tau \right] = \int_0^{\infty} \left[\int_0^t f(\tau) d\tau \right] \cdot e^{-st} dt = -\frac{1}{s} \left[e^{-st} \int_0^t f(\tau) d\tau \right]_0^{\infty} + \frac{1}{s} \int_0^{\infty} e^{-st} f(t) dt \quad (8.21)$$

Der erste Term der rechten Seite von (8.21) liefert 0, sofern die Funktion $f(\tau)$ beschränkt ist. Das Integral im zweiten Term entspricht genau der Definition der Laplace-Transformierten. Somit ergibt sich:

$$L\left[\int_0^t f(\tau)d\tau\right] = \frac{1}{s} F(s) \quad (8.22)$$

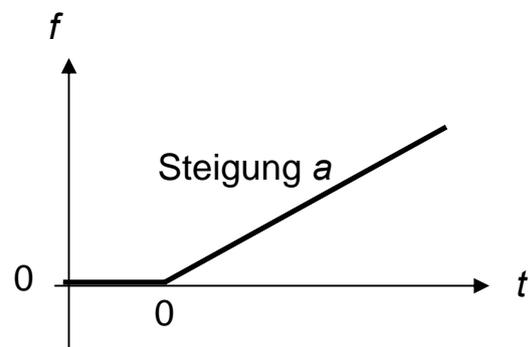
8.3.7 Rampenfunktion

- Definition:

$$f(t) = \begin{cases} 0 & \text{für } t < 0 \\ a \cdot t & \text{für } t \geq 0 \end{cases} \quad (8.23)$$

Man kann leicht zeigen, dass gilt:

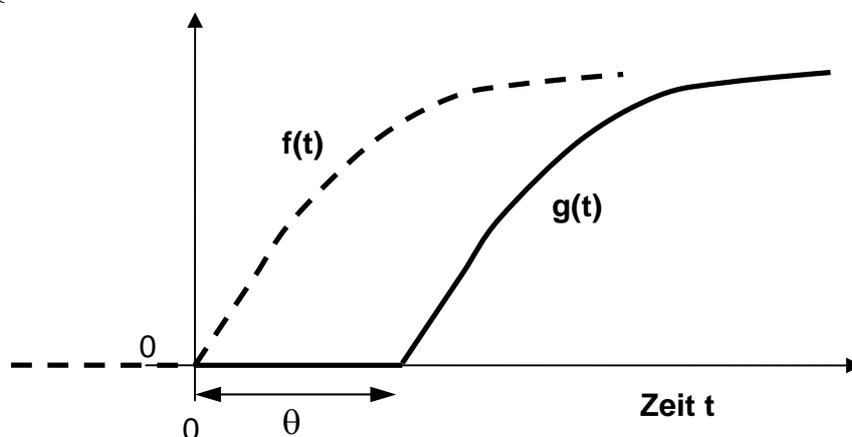
$$L[f(t)] = \frac{a}{s^2} \quad (8.24)$$



8.3.8 Verschiebungssatz

- Zeitverschobene Signale treten häufig infolge von Totzeitgliedern auf. Beispiel: Durch eine Rohrleitung vor einem Rührreaktor wird eine Konzentrationsveränderung vor der Rohrleitung erst nach einer Totzeit θ (die für die Rohrleitung charakteristisch ist) vor dem Reaktor registriert.

$$g(t) = \begin{cases} 0 & \text{für } t < \theta \\ f(t - \theta) & \text{für } t \geq \theta \end{cases} \quad (8.25)$$



Bestimmung der Laplace-Transformierten:

$$\begin{aligned} L[g(t)] &= \int_0^{\infty} g(t) \cdot e^{-st} dt = \int_{\theta}^{\infty} f(t-\theta) \cdot e^{-st} dt = \\ &= \int_{\theta}^{\infty} f(t-\theta) \cdot e^{-s(t-\theta)} \cdot e^{-s\theta} d(t-\theta) \end{aligned} \quad (8.26)$$

Mit $t^* = (t - \theta)$ als neuer Integrationsvariable erhält man aus (8.26):

$$L[g(t)] = e^{-s\theta} \cdot \int_0^{\infty} f(t^*) \cdot e^{-st^*} dt^* \quad (8.27)$$

Dies liefert den Verschiebungssatz:

$$L[f(t-\theta)] = e^{-s\theta} \cdot F(s) \quad \text{mit } t > \theta \quad (8.28)$$

Dieser Satz ist vor allem dann nützlich, wenn im Laplace-Bereich eine Transformierte vorliegt, die einen Term des Typs $e^{-s\theta}$ enthält.

8.3.9 Endwert- und Anfangswerttheorem

- Endwerttheorem:

Den asymptotischen Wert einer Größe $y(t)$ im Zeitbereich für $t \rightarrow \infty$ kann man direkt bestimmen aus der Laplace-Transformierten $Y(s)$, sofern der Grenzwert $\lim_{t \rightarrow \infty} y(t)$ existiert, d.h. vorausgesetzt dass der Grenzwert für alle $Re(s) > 0$ existiert. Es gilt dann:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} y(t) = \lim_{s \rightarrow 0} [s \cdot Y(s)] \quad (8.29)$$

Den Beweis hierfür findet man z.B. in [2].

- Anfangswerttheorem:

Den Anfangswert einer Größe $y(t)$ im Zeitbereich für $t = 0$ kann man ebenfalls direkt als Grenzwert aus der Laplace-Transformierten $Y(s)$ ermitteln:

$$y(t=0) = \lim_{s \rightarrow \infty} [s \cdot Y(s)] \quad (8.30)$$

8.3.10 Lösung von Differentialgleichungen

1. Beispiel:

$$5 \frac{dy}{dt} + 4y = 2 \quad \text{mit der Anfangsbedingung (AB): } y(t=0) = 1 \quad (8.31)$$

Lösung:

LT auf beide Seiten der DGL anwenden:

$$L\left[5 \frac{dy}{dt} + 4y\right] = L[2] \quad (8.32)$$

Wegen des Superpositionsprinzips kann jeder Term individuell transformiert werden:

$$L\left[5 \frac{dy}{dt}\right] + L[4y] = L[2] \quad (8.33)$$

Die Transformaten der drei Terme lauten:

$$L\left[5 \frac{dy}{dt}\right] = 5L\left[\frac{dy}{dt}\right] = 5(sY(s) - y(0)) = 5sY(s) - 5 \quad (8.34)$$

$$L[4y] = 4L[y] = 4Y(s) \quad (8.35)$$

$$L[2] = \frac{2}{s} \quad (8.36)$$

Eingesetzt ergibt sich

$$Y(s)(5s + 4) = 5 + \frac{2}{s} \quad (8.37)$$

und daraus:

$$Y(s) = \frac{5s + 2}{s(5s + 4)} \quad (8.38)$$

Die Partialbruchzerlegung von (8.38) ergibt

$$Y(s) = \frac{c_1}{s} + \frac{c_2}{s + 4/5} = \frac{1/2}{s} + \frac{1/2}{s + 4/5} \quad (8.39)$$

und die Anwendung der Laplace-Tabelle (siehe S.71/72) zwecks Rücktransformation liefert dann für $t > 0$:

$$y(t) = \frac{1}{2} \left(1 + e^{-4/5t} \right) \quad (8.40)$$

2. Beispiel:

$$\frac{d^3 y}{dt^3} + 6 \frac{d^2 y}{dt^2} + 11 \frac{dy}{dt} + 6y = 1 \quad (8.41)$$

mit den Anfangsbedingungen (AB): $y(0) = y'(0) = y''(0) = 0$

Lösung:

LT auf beide Seiten der DGL anwenden und die Terme einzeln behandeln:

$$Y(s) \left(s^3 + 6s^2 + 11s + 6 \right) = \frac{1}{s} \quad (8.42)$$

Daraus ergibt sich:

$$Y(s) = \frac{1}{s(s^3 + 6s^2 + 11s + 6)} \quad (8.43)$$

Die Partialbruchzerlegung von (8.43) lautet

$$Y(s) = \frac{1/6}{s} - \frac{1/2}{s+1} + \frac{1/2}{s+2} - \frac{1/6}{s+3} = \quad (8.44)$$

und die Anwendung der Laplace-Tabelle (liegt bei) zwecks Rücktransformation liefert dann für $t > 0$:

$$y(t) = \frac{1}{6} - \frac{1}{2} e^{-t} + \frac{1}{2} e^{-2t} - \frac{1}{6} e^{-3t} \quad (8.45)$$

Table: Laplace-Transformierte einiger wichtiger Funktionen (aus [2])

Table 3.1 Laplace Transforms for Various Time-Domain Functions^a

$f(t)$	$F(s)$
1. $\delta(t)$ (unit impulse)	1
2. $S(t)$ (unit step)	$\frac{1}{s}$
3. t (ramp)	$\frac{1}{s^2}$
4. t^{n-1}	$\frac{(n-1)!}{s^n}$
5. e^{-bt}	$\frac{1}{s+b}$
6. $\frac{1}{\tau} e^{-t/\tau}$	$\frac{1}{\tau s + 1}$
7. $\frac{t^{n-1} e^{-bt}}{(n-1)!}$ ($n > 0$)	$\frac{1}{(s+b)^n}$
8. $\frac{1}{\tau^n (n-1)!} t^{n-1} e^{-t/\tau}$	$\frac{1}{(\tau s + 1)^n}$
9. $\frac{1}{b_1 - b_2} (e^{-b_2 t} - e^{-b_1 t})$	$\frac{1}{(s+b_1)(s+b_2)}$
10. $\frac{1}{\tau_1 - \tau_2} (e^{-t/\tau_1} - e^{-t/\tau_2})$	$\frac{1}{(\tau_1 s + 1)(\tau_2 s + 1)}$
11. $\frac{b_3 - b_1}{b_2 - b_1} e^{-b_1 t} + \frac{b_3 - b_2}{b_1 - b_2} e^{-b_2 t}$	$\frac{s + b_3}{(s+b_1)(s+b_2)}$
12. $\frac{1}{\tau_1 \tau_1 - \tau_2} e^{-t/\tau_1} + \frac{1}{\tau_2 \tau_2 - \tau_1} e^{-t/\tau_2}$	$\frac{\tau_3 s + 1}{(\tau_1 s + 1)(\tau_2 s + 1)}$
13. $1 - e^{-t/\tau}$	$\frac{1}{s(\tau s + 1)}$
14. $\sin \omega t$	$\frac{\omega}{s^2 + \omega^2}$
15. $\cos \omega t$	$\frac{s}{s^2 + \omega^2}$
16. $\sin(\omega t + \phi)$	$\frac{\omega \cos \phi + s \sin \phi}{s^2 + \omega^2}$
17. $e^{-bt} \sin \omega t$	$\left. \begin{array}{l} \frac{\omega}{(s+b)^2 + \omega^2} \\ \frac{s+b}{(s+b)^2 + \omega^2} \end{array} \right\} \begin{array}{l} b, \omega \text{ real} \end{array}$
18. $e^{-bt} \cos \omega t$	
19. $\frac{1}{\tau \sqrt{1 - \zeta^2}} e^{-\zeta t/\tau} \sin(\sqrt{1 - \zeta^2} t/\tau)$ ($0 \leq \zeta < 1$)	$\frac{1}{\tau^2 s^2 + 2\zeta \tau s + 1}$
20. $1 + \frac{1}{\tau_2 - \tau_1} (\tau_1 e^{-t/\tau_1} - \tau_2 e^{-t/\tau_2})$ ($\tau_1 \neq \tau_2$)	$\frac{1}{s(\tau_1 s + 1)(\tau_2 s + 1)}$

(continued on page 48)

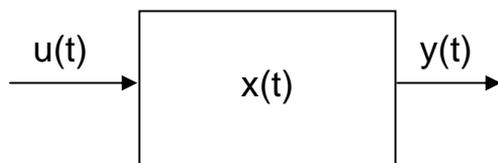
Table 3.1 (Continued)

	$f(t)$	$F(s)$
21.	$1 - \frac{1}{\sqrt{1 - \zeta^2}} e^{-\zeta t/\tau} \sin[\sqrt{1 - \zeta^2} t/\tau + \psi]$ $\psi = \tan^{-1} \frac{\sqrt{1 - \zeta^2}}{\zeta}$ $(0 \leq \zeta < 1)$	$\frac{1}{s(\tau^2 s^2 + 2\zeta\tau s + 1)}$
22.	$1 - e^{-\zeta t/\tau} [\cos(\sqrt{1 - \zeta^2} t/\tau)$ $+ \frac{\zeta}{1 - \zeta^2} \sin(\sqrt{1 - \zeta^2} t/\tau)]$ $(0 \leq \zeta < 1)$	$\frac{1}{s(\tau^2 s^2 + 2\zeta\tau s + 1)}$
23.	$1 + \frac{\tau_3 - \tau_1}{\tau_1 - \tau_2} e^{-t/\tau_1} + \frac{\tau_3 - \tau_2}{\tau_2 - \tau_1} e^{-t/\tau_2}$ $(\tau_1 \neq \tau_2)$	$\frac{\tau_3 s + 1}{s(\tau_1 s + 1)(\tau_2 s + 1)}$
24.	$\frac{df}{dt}$	$sF(s) - f(0)$
25.	$\frac{d^n f}{dt^n}$	$s^n F(s) - s^{n-1} f(0) - s^{n-2} f^{(1)}(0) - \dots$ $- s f^{(n-2)}(0) - f^{(n-1)}(0)$

*Note that $f(t)$ and $F(s)$ are defined for $t \geq 0$ only.

9 Übertragungsverhalten von SISO-Systemen erster Ordnung

- SISO-System = Single Input Single Output



$u(t)$: Eingangsgröße
 $x(t)$: Zustandsgröße
 $y(t)$: Ausgangsgröße

9.1 Antwortverhalten und Übertragungsfunktion

- System erster Ordnung, z.B. Rührtank ohne chemische Reaktion
- Es gehorcht der allgemeinen gewöhnlichen DGL erster Ordnung:

$$\tau \frac{dy(t)}{dt} + y(t) = k \cdot u(t) \quad \text{mit der AB: } y(t=0) = y_0 \quad (9.1)$$

τ Zeitkonstante (> 0)
 k Verstärkungsfaktor (beliebig, reell)

- Falls ein nichtlineares Prozessmodell vorliegt, muss dieses zunächst an einem stationären Betriebspunkt linearisiert werden
- Das linearisierte Modell wird in Abstandsvariablen angeschrieben und lässt sich dann in Form der Gl.(9.1) darstellen
- Nach Einführung von Abstandsvariablen sind folgende AB sinnvoll:
 $y(t=0) = 0$ sowie $u(t=0) = 0$

- Anwendung der LT auf (9.1) liefert:

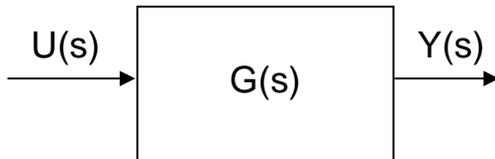
$$\tau(s \cdot Y(s) - y(t=0)) + Y(s) = k \cdot U(s)$$

$$\Leftrightarrow (\tau s + 1) \cdot Y(s) = k \cdot U(s) \Leftrightarrow Y(s) = \frac{k}{\tau s + 1} U(s) \quad (9.2)$$

- Daraus wird die Übertragungsfunktion $G(s)$ gewonnen:

$$Y(s) = G(s) \cdot U(s) \Rightarrow G(s) = \frac{k}{\tau s + 1} \quad (9.3)$$

- Häufig: Darstellung als Blockdiagramm



- $G(s)$ ist gültig für jeden beliebigen Prozess erster Ordnung (mit der o.a. AB) und unabhängig von der Wahl des Eingangssignals $U(s)$.

9.1.1 Standard-Eingangssignale

Tabelle: Wichtige Eingangssignale zur Systembefragung

Signaltyp	Zeitbereich $u(t)$	Laplace-Transf. $U(s) = L[u(t)]$
Einheits- sprung	$u(t) = S(t) = \begin{cases} 0 & \text{für } t < 0 \\ 1 & \text{für } t \geq 0 \end{cases}$	$U(s) = \frac{1}{s}$
Rampe	$u(t) = \begin{cases} 0 & \text{für } t < 0 \\ a \cdot t & \text{für } t \geq 0 \end{cases}$	$U(s) = \frac{a}{s^2}$
Rechteck- puls	$u(t) = \begin{cases} 0 & \text{für } t < 0 \\ A & \text{für } 0 \leq t \leq t_p \\ 0 & \text{für } t > t_p \end{cases}$	$U(s) = \frac{A}{s} (1 - e^{-t_p s})$
Dirac- Puls (Einheits- puls)	$u(t) = \delta(t) = \lim_{t_p \rightarrow 0} \left(\begin{cases} 0 & \text{für } t < 0 \\ 1/t_p & \text{für } 0 \leq t \leq t_p \\ 0 & \text{für } t > t_p \end{cases} \right)$	$U(s) = 1$
Sinus	$u(t) = \begin{cases} 0 & \text{für } t < 0 \\ A \cdot \sin(\omega t) & \text{für } t \geq 0 \end{cases}$	$U(s) = \frac{A\omega}{s^2 + \omega^2}$

- Anmerkung: In der Praxis ist der Dirac-Puls (wegen seiner unendlich kurzen Dauer) nicht realisierbar. Sinus-Befragungen werden in der Elektrotechnik häufig eingesetzt (z.B. Test von Lautsprechern \Rightarrow Frequenzganganalyse).

9.1.2 Sprungantwort

- Aufschaltung eines Eingangssprungs mit der Amplitude A führt zu folgendem Ausgangssignal im Laplace-Bereich

$$Y(s) = G(s) \cdot U(s) = \frac{k}{\tau s + 1} \cdot \frac{A}{s} \quad (9.4)$$

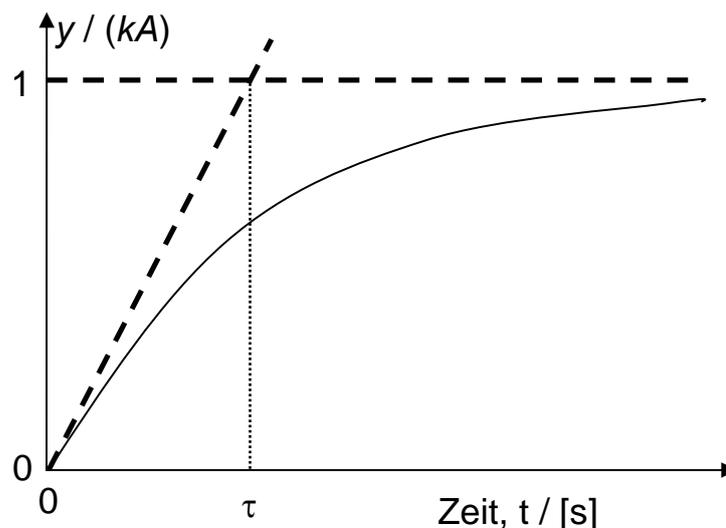
- Rücktransformation in den Zeitbereich wird erreicht, indem (9.3) zunächst in Partialbrüche zerlegt wird. Es gilt:

$$\frac{kA}{s(\tau s + 1)} = kA \left(\frac{1}{s} + \frac{-\tau}{\tau s + 1} \right) = kA \left(\frac{1}{s} - \frac{1}{s + 1/\tau} \right) \quad (9.5)$$

- Dies liefert nach Rücktransformation in den Zeitbereich für $t > 0$:

$$y(t) = kA \cdot \left(1 - e^{-t/\tau} \right) \quad (9.6)$$

- Die beiden Parameter τ und k können – wie in der Skizze zu sehen – aus einer gemessenen Sprungantwort des Systems ermittelt werden.



- An diesem Beispiel kann man die typischen Schritte bei der Berechnung von Systemantworten mit Hilfe der Laplace-Transformation erkennen:

Schritt 0: Ggf. Linearisierung des Prozessmodells im Zeitbereich an einem stationären Betriebspunkt und Einführung von Distanzvariablen

Schritt 1: LT aller Terme der dann vorliegenden Differentialgleichung im Zeitbereich (liefert algebraische Gl.)

Schritt 2: Auflösen der algebraischen Gleichung nach $Y(s) = Z(s)/N(s)$

Schritt 3a: Faktorisierung des charakteristischen Polynoms (Nennerpolynom $N(s)$)

Schritt 3b: Partialbruchzerlegung von $Y(s)$

Schritt 4: Anwendung der inversen Laplace-Transformation zur Bestimmung der Systemantwort im Zeitbereich, $y(t)$. (=> Einsatz der Laplace-Tabelle)

9.1.3 Rampenantwort

- Aufschaltung einer Rampe auf ein System erster Ordnung führt zu folgendem Ausgangssignal

$$Y(s) = G(s) \cdot U(s) = \frac{k}{\tau s + 1} \cdot \frac{a}{s^2} \quad (9.7)$$

- Faktorisierung und Partialbruchzerlegung (hier: ein doppelter Pol):

$$\frac{ka}{(\tau s + 1)s^2} = ka \left(\frac{\tau^2}{\tau s + 1} - \frac{\tau}{s} + \frac{1}{s^2} \right) \quad (9.8)$$

- Dies liefert nach Rücktransformation in den Zeitbereich für $t > 0$:

$$y(t) = k \cdot a \cdot \left(\tau \cdot (e^{-t/\tau} - 1) + t \right) \quad (9.9)$$

- Für $t \gg \tau$ gilt:

$$y(t) \approx k \cdot a \cdot (t - \tau) \quad (9.10)$$

9.1.4 Pulsantworten

- Aufschaltung eines Rechteckpulses auf ein System erster Ordnung führt zu folgendem Ausgangssignal

$$Y(s) = G(s) \cdot U(s) = \frac{k}{\tau s + 1} \cdot \frac{A}{s} (1 - e^{-t_p s}) = \frac{kA}{s(\tau s + 1)} - \frac{kA}{s(\tau s + 1)} e^{-t_p s} \quad (9.11)$$

- Unter Nutzung von (9.4) und (9.5) und unter Anwendung des Laplace-Verschiebungstheorems

$$Y(s) = L[f(t-t_0) \cdot S(t-t_0)] = e^{-st_0} \cdot F(s)$$

erhält man die folgende Systemantwort im Zeitbereich:

$$y(t) = kA \cdot \left(1 - e^{-t/\tau}\right) - kA \left(1 - e^{-(t-t_p)/\tau}\right) \cdot S(t-t_p) \quad (9.12)$$

- Für einen Dirac-Puls der Stärke A gilt:

$$Y(s) = G(s) \cdot U(s) = \frac{k}{\tau s + 1} \cdot A \quad (9.13)$$

- Dies liefert nach Rücktransformation in den Zeitbereich für $t > 0$:

$$y(t) = k \cdot A \cdot e^{-t/\tau} \quad (9.14)$$

9.1.5 Sinusantwort

- Aufschaltung einer Sinusfunktion auf ein System erster Ordnung führt zu folgendem Ausgangssignal

$$Y(s) = G(s) \cdot U(s) = \frac{k}{(\tau s + 1)} \cdot \frac{A\omega}{(s^2 + \omega^2)} \quad (9.15)$$

- Faktorisierung und Partialbruchzerlegung:

$$\frac{k}{(\tau s + 1)} \cdot \frac{A\omega}{(s^2 + \omega^2)} = \frac{kA}{\omega^2 \tau^2 + 1} \left(\frac{\omega \tau^2}{\tau s + 1} - \frac{s \omega \tau}{s^2 + \omega^2} + \frac{\omega}{s^2 + \omega^2} \right) \quad (9.16)$$

- Dies liefert nach Rücktransformation in den Zeitbereich:

$$y(t) = \frac{kA}{\omega^2 \tau^2 + 1} \cdot \left(\omega \tau \cdot e^{-t/\tau} - \omega \tau \cos \omega t + \sin \omega t \right) \quad (9.17)$$

- Für $t \rightarrow \infty$ gilt unter Anwendung trigonometrischer Sätze:

$$y(t) \approx \frac{kA}{\sqrt{\omega^2 \tau^2 + 1}} \sin(\omega t + \phi) \quad (9.18)$$

mit dem Phasenwinkel

$$\phi = -\arctan(\omega \tau) \quad (9.19)$$

- Die Betrachtung $t \rightarrow \infty$ bei sinoidalem Eingangssignal variabler Frequenz ω ist Gegenstand der Frequenzganganalyse dynamischer Systeme. Wie man anhand von (9.18) erkennt, ist das Antwortsignal des Systems eine amplituden- und phasenverschobene Sinusfunktion.

9.2 Integrierende Prozesse

- Bisher selbstregulierende Prozesse betrachtet \Rightarrow bei Veränderung des Eingangssignals $u(t)$ auf einen anderen stationären Wert geht das Ausgangssignal ebenfalls auf einen neuen stationären Wert.
- Beispiele: Rührkessel ohne Reaktion oder mit einer Reaktion erster Ordnung.
- Daneben gibt es in der Prozesstechnik auch Systeme, die keinen neuen stationären Systemzustand erreichen.
- Beispiel für ein integrierendes System: Flüssigkeitstank mit variablem Zulauf und konstantem Ablauf \Rightarrow DGL für den Höhenstand $h(t)$ im Tank:

$$\frac{dh(t)}{dt} = \frac{1}{A} (F_{in}(t) - F_{out}) \quad \text{mit der AB: } h(t=0) = h_0 \quad (9.20)$$

- In Abstandsvariablen

$$y(t) = h(t) - h_0; \quad u(t) = F_{in}(t) - F_{out} \quad (9.21)$$

sowie mit dem Parameter $k = 1/A$ lautet die DGL dieses Systems:

$$\frac{dy(t)}{dt} = k \cdot u(t) \quad \text{mit der AB: } y(t=0) = 0 \quad (9.22)$$

- Anwendung der LT auf (9.21) liefert die Übertragungsfunktion:

$$Y(s) = G(s) \cdot U(s) \quad \text{mit } G(s) = \frac{k}{s} \quad (9.23)$$

- Die Antwort dieses Systems auf einen Einheitssprung lautet:

$$Y(s) = \frac{k}{s} \cdot \frac{1}{s} \quad (9.24)$$

- Daraus folgt die Antwort im Zeitbereich für $t > 0$:

$$y(t) = k \cdot t \quad (9.25)$$

D.h., es stellt sich kein neuer stationärer Zustand ein.

10 Übertragungsverhalten von SISO-Systemen zweiter Ordnung

10.1 Antwortverhalten und Übertragungsfunktion

- Systeme zweiter Ordnung können physikalisch aus
 - ⇒ einer Reihenschaltung von zwei Prozessen erster Ordnung oder
 - ⇒ einem Prozessmodell aus einer DGL zweiter Ordnung oder
 - ⇒ einem Prozessmodell aus zwei gekoppelten DGL erster Ordnung hervorgehen.

- Es gehorcht der gewöhnlichen DGL zweiter Ordnung:

$$\tau^2 \frac{d^2 y(t)}{dt^2} + 2\zeta\tau \frac{dy(t)}{dt} + y(t) = k \cdot u(t) \quad (10.1)$$

mit den beiden AB: $y(t=0) = y_0$, $\dot{y}(t=0) = \dot{y}_0$

τ Periodendauer der Oszillation, die ohne Dämpfung einsetzt (> 0 , reell)

ζ Dämpfungsfaktor (> 0 , reell)

k Verstärkungsfaktor (beliebig, reell)

- Anwendung der LT auf (10.1) liefert mit den AB $y_0=0$ und $dy_0/dt=0$:

$$\tau^2 (s^2 Y(s) - s y_0 - \dot{y}_0) + 2\zeta\tau (s Y(s) - y_0) + Y(s) = k \cdot U(s) \quad (10.2)$$

- Daraus kann man die Übertragungsfunktion $G(s)$ gewinnen:

$$Y(s) = G(s) \cdot U(s) \quad \text{mit} \quad G(s) = \frac{k}{\tau^2 s^2 + 2\zeta\tau s + 1} \quad (10.3)$$

- Der allgemeinere Fall von (10.3) wäre, dass auch im Zähler von $G(s)$ ein Polynom in s auftritt (sog. Zählerdynamik). Dieser Fall wird in Kap. 11 behandelt.
- Der Nenner von $G(s)$ enthält Terme, die aus dem charakteristischen Polynom von (10.1) hervorgehen. Die charakteristische Gleichung lautet:

$$\tau^2 \lambda^2 + 2\zeta\tau \lambda + 1 = 0 \quad (10.4)$$

- Wichtig: Die Eigenwerte der DGL (10.1) (Wurzeln der charakt. Gl. (10.4)) sind identisch mit den Polen der Übertragungsfunktion $G(s)$ (Wurzeln des Nennerpolynoms von $G(s)$ in (10.2)).
- Aus der Analyse der Wurzeln des Nennerpolynoms von $G(s)$, ebenso wie aus den Eigenwerten, kann man Rückschlüsse auf die Stabilität des Systems ziehen.
- Wurzeln des Nennerpolynoms (Pole) $p_{1,2}$:

$$G(s) = \frac{k}{(s - p_1)(s - p_2)} \quad \text{mit} \quad p_{1,2} = -\frac{\zeta}{\tau} \pm \frac{\sqrt{\zeta^2 - 1}}{\tau} \quad (10.5)$$

- Bei $\zeta < 0$ haben die Pole positive Realteile (\Rightarrow instabiles Verhalten). Bei Beschränkung auf $\zeta > 0$ und $\tau > 0$ ist das System stabil und es lassen sich folgende Fälle unterscheiden:

Tabelle: Sonderfälle eines Systems zweiter Ordnung

<i>Fall</i>	<i>Dämpfungs- faktor</i>	<i>Pole p_1 und p_2</i>	<i>Systemverhalten</i>
a	$\zeta > 1$	reell und verschieden	überdämpft
b	$\zeta = 1$	reell und identisch	kritisch gedämpft
c	$0 < \zeta < 1$	konjugiert komplexe Pole (der Form $a + jb$ und $a - jb$)	unterdämpft (Oszillationen)

10.2 Sprungantwort

- Ausgangssignal im Laplace-Bereich:

$$Y(s) = \frac{kA}{s(\tau^2 s^2 + 2\zeta\tau s + 1)} \quad (10.6)$$

- Nach Umformung und Rücktransformation in den Zeitbereich (über Faktorisierung und PBZ) erhält man die Sprungantworten für die o.a. drei Sonderfälle im Zeitbereich:

$$\text{a) } \zeta > 1: y(t) = kA \cdot \left(1 - \frac{\tau_1 e^{-t/\tau_1} - \tau_2 e^{-t/\tau_2}}{\tau_1 - \tau_2} \right) \quad \text{mit} \quad (10.7)$$

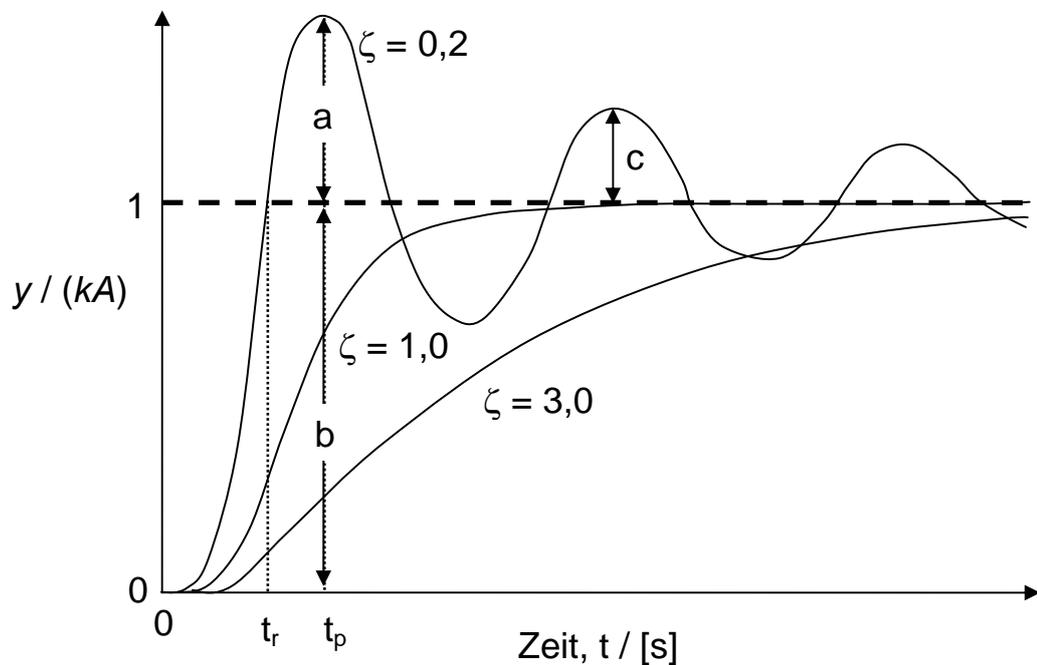
$$\tau_1 = \frac{\tau}{\zeta - \sqrt{\zeta^2 - 1}} > 0 \quad \text{und} \quad \tau_2 = \frac{\tau}{\zeta + \sqrt{\zeta^2 - 1}} > 0 \quad (10.8)$$

- Mit den so eingeführten Zeitkonstanten $\tau_{1,2}$ lässt sich das Nennerpolynom auch faktorisiert darstellen:

$$\tau^2 s^2 + 2\zeta\tau s + 1 = (\tau_1 s + 1) \cdot (\tau_2 s + 1)$$

$$\text{b) } \zeta = 1: y(t) = kA \cdot \left(1 - \left(1 + \frac{t}{\tau} \right) e^{-t/\tau} \right) \quad (10.9)$$

$$\text{c) } 0 < \zeta < 1: y(t) = kA \cdot \left(1 - e^{-\zeta t/\tau} \left(\cos\left(\frac{\sqrt{1-\zeta^2}}{\tau} t \right) + \frac{\zeta}{\sqrt{1-\zeta^2}} \sin\left(\frac{\sqrt{1-\zeta^2}}{\tau} t \right) \right) \right)$$



- Zur Charakterisierung des unterdämpften Antwortverhaltens ($0 < \zeta < 1$) werden sowohl bei geregelten als auch bei unregulierten Prozessen oft folgende Kenngrößen herangezogen:

- 1) Anstiegszeit t_r : Zeit bis zum erstmaligen Erreichen des neuen stationären Zustands
- 2) Zeit bis zum ersten Peak t_p : Ausgangssignal erreicht erstes Maximum
- 3) Überschwingen: OS = a/b
- 4) Abklingverhältnis (engl. Decay Ratio): DR=c/a
- 5) Periode der Oszillation P: Zeit zwischen zwei aufeinander folgenden Peaks

- Aus $y(t)$ für den Fall c folgt:

$$OS = \exp(-\pi\zeta / \sqrt{1-\zeta^2})$$

$$DR = OS^2$$

$$P = \frac{2\pi\tau}{\sqrt{1-\zeta^2}}$$

(10.10 a,b,c)

10.3 Antwortsignale auf andere Typen von Eingangssignalen

- Typischer Weg: $Y(s)$ aufstellen aus dem Produkt von $G(s)$ und dem jeweiligen Eingangssignal $U(s)$
- Faktorisierung, PBZ sowie/bzw. Anwendung der Laplace-Tabelle
- Rücktransformation in den Zeitbereich, um $y(t)$ zu erhalten
- Beispiel: Antwort auf einen Dirac-Puls der Stärke A liefert für $Y(s)$

$$Y(s) = \frac{kA}{\tau^2 s^2 + 2\zeta\tau s + 1} \quad (10.11)$$

Weg: Faktorisierung für $0 < \zeta < 1 \Rightarrow$ zwei konjugiert komplexe Pole:

$$Y(s) = \frac{kA/\tau^2}{(s-p_1)(s-p_2)} \quad \text{mit} \quad p_{1,2} = -\frac{\zeta}{\tau} \pm j \frac{\sqrt{1-\zeta^2}}{\tau} \quad (10.12)$$

Etwas anders geschrieben, lautet (10.11):

$$Y(s) = \frac{kA/\tau^2}{(s + \zeta/\tau)^2 + \omega^2} \quad \text{mit} \quad \omega = \frac{\sqrt{1-\zeta^2}}{\tau} \quad (10.13)$$

Antwortsignal im Zeitbereich (siehe Laplace-Tabelle):

$$y(t) = \frac{kA}{\tau^2} \left(\frac{1}{\omega} e^{-\zeta t/\tau} \sin(\omega t) \right) = \frac{kA}{\tau \sqrt{1-\zeta^2}} e^{-\zeta t/\tau} \sin\left(\frac{\sqrt{1-\zeta^2}}{\tau} t \right) \quad (10.14)$$

11 Übertragungsverhalten komplizierterer SISO-Systeme

11.1 Antwortverhalten und Übertragungsfunktion

- Lineare Systeme höherer Ordnung liegen vor, wenn
 - ⇒ mehrere lineare Teilprozesse niedrigerer Ordnung zu einem Gesamtprozess verschaltet werden,
 - ⇒ ein Prozessmodell vorliegt, das aus mehreren gekoppelten linearen DGL erster Ordnung besteht,
 - ⇒ ein Prozess vorliegt, der direkt durch eine lineare DGL höherer Ordnung beschrieben wird.
- Allg. Darstellung in der Eingangs-Ausgangsform (DGL höherer Ordnung):

$$\begin{aligned}
 a_n \frac{d^n y(t)}{dt^n} + a_{n-1} \frac{d^{n-1} y(t)}{dt^{n-1}} + \dots + a_1 \frac{dy(t)}{dt} + a_0 y(t) &= \\
 = b_m \frac{d^m u(t)}{dt^m} + b_{m-1} \frac{d^{m-1} u(t)}{dt^{m-1}} + \dots + b_1 \frac{du(t)}{dt} + b_0 u(t) & \quad (11.1)
 \end{aligned}$$

$y(t)$: Ausgangsgröße des Systems, $u(t)$: Eingangsgröße des Systems

Anmerk.: Bei manchen Systemen (geschlossener Regelkreis) tritt auf der rechten Seite von (11.1) zusätzlich ein Integralterm auf.

- Anwendung der LT auf (11.1) (Laplace-Tabelle nutzen!) mit den Null-Bedingungen als Anfangsbedingungen

$$y(t=0) = \left. \frac{dy}{dt} \right|_{t=0} = \left. \frac{d^2 y}{dt^2} \right|_{t=0} = \dots = \left. \frac{d^n y}{dt^n} \right|_{t=0} = 0 \quad (11.2)$$

$$u(t=0) = \left. \frac{du}{dt} \right|_{t=0} = \left. \frac{d^2 u}{dt^2} \right|_{t=0} = \dots = \left. \frac{d^m u}{dt^m} \right|_{t=0} = 0 \quad (11.3)$$

liefert das transformierte Antwortverhalten

$$Y(s) = G(s) \cdot U(s)$$

mit der Übertragungsfunktion (polynomiale Darstellung):

$$G(s) = \frac{b_m s^m + b_{m-1} s^{m-1} + \dots + b_1 s + b_0}{a_n s^n + a_{n-1} s^{n-1} + \dots + a_1 s + a_0} \sim \frac{\text{Zählerpolynom } Z(s)}{\text{Nennerpolynom } N(s)} \quad (11.4)$$

Alternativ wird die Übertragungsfunktion auch angegeben in der Verstärkungsfaktor-Zeitkonstanten-Form

$$G(s) = k \frac{(\tau_{z1} s + 1)(\tau_{z2} s + 1) \dots (\tau_{zm} s + 1)}{(\tau_{p1} s + 1)(\tau_{p2} s + 1) \dots (\tau_{pn} s + 1)} \quad (11.5)$$

oder in der Pol-Nullstellen-Form

$$G(s) = k_{pz} \frac{(s - z_1)(s - z_2) \dots (s - z_m)}{(s - p_1)(s - p_2) \dots (s - p_n)} \quad (11.6)$$

mit

$$k_{pz} = k \frac{\prod_{i=1}^n (-p_i)}{\prod_{i=1}^m (-z_i)} \quad p_i = -\frac{1}{\tau_{pi}} \quad z_i = -\frac{1}{\tau_{zi}} \quad (11.7)$$

- Diese drei Darstellungen für $G(s)$ sind einander äquivalent.

11.2 Pole und Nullstellen der Übertragungsfunktion

- Für die weitere Analyse des dynamischen Verhaltens ist die Pol-Nullstellen-Darstellung besonders zweckmäßig.
- Nullstellen von $G(s)$ = Nullstellen/Wurzeln des Zählerpolynoms $Z(s)$
- Pole von $G(s)$ = Nullstellen/Wurzeln des Nennerpolynoms $N(s)$
- Das qualitative dynamische Verhalten eines linearen Systems kann man aus der Lage der Pole und der Nullstellen in der komplexen s -Ebene ablesen (vgl. Abb.11.1, Abb.11.2).

Abb. 11.1: Wirkungen der Lage der Pole auf die Prozessdynamik

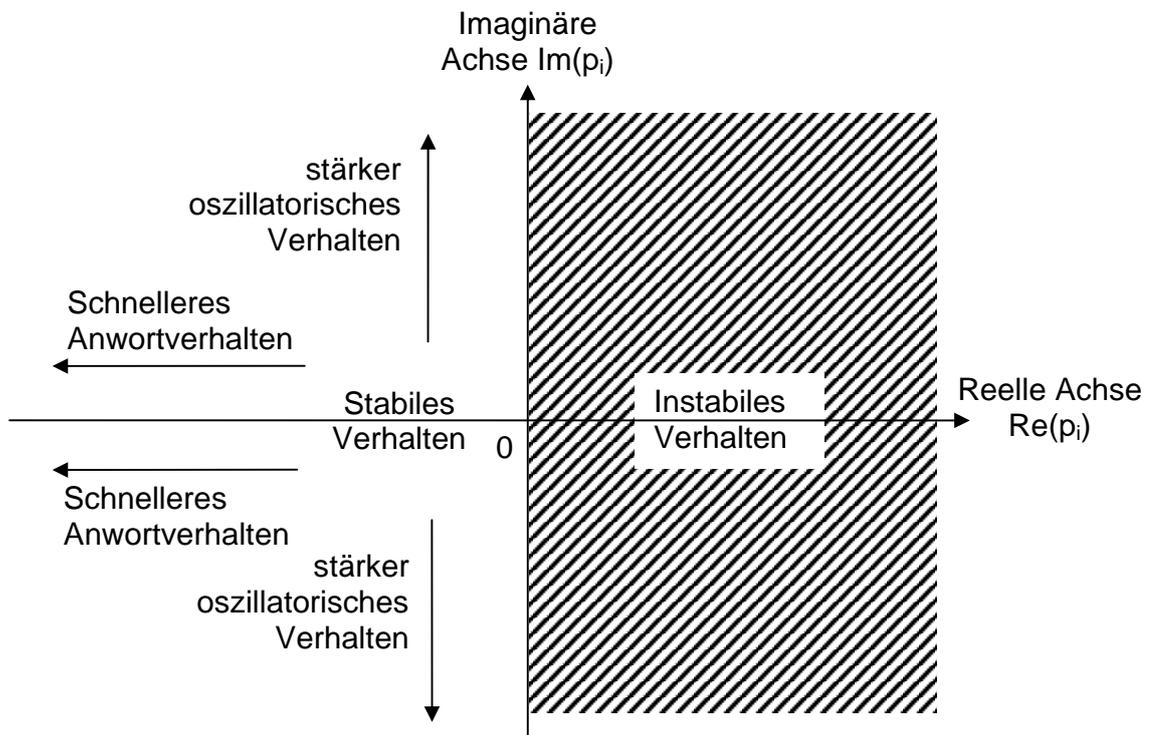
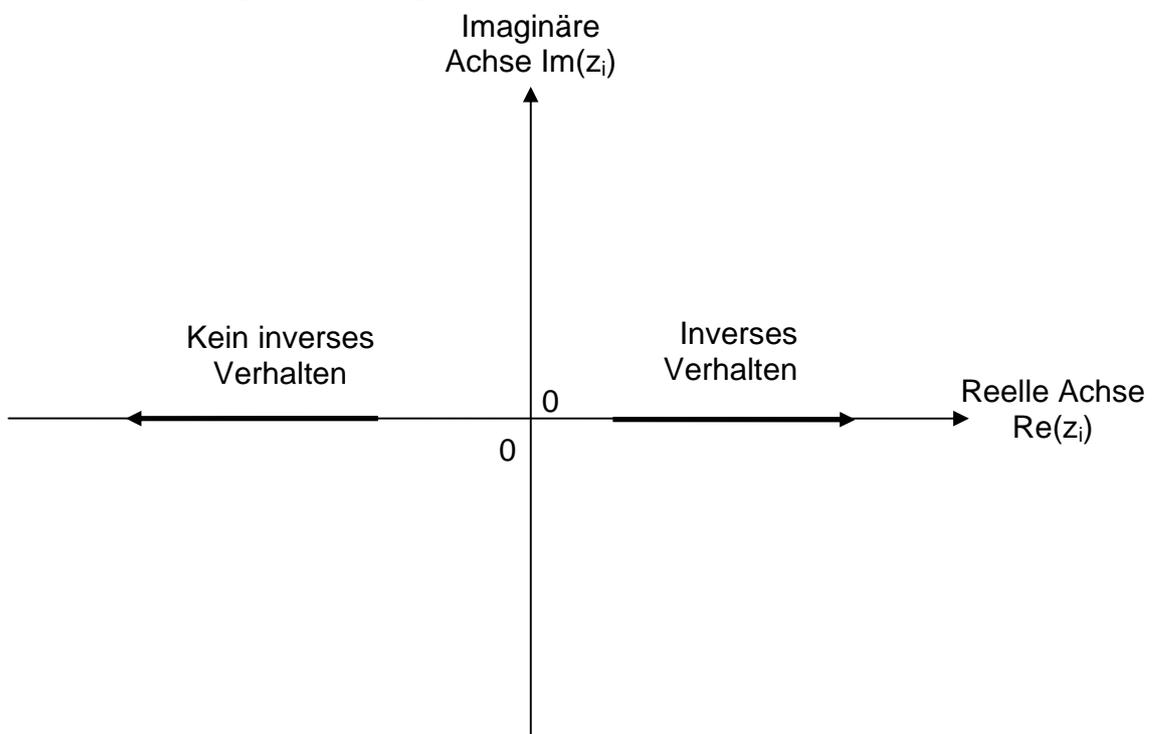


Abb. 11.2: Wirkungen der Lage der Nullstellen auf die Prozessdynamik



11.2.1 Qualitative Dynamik infolge der Pol-Lagen

- Lage der Pole bestimmt die „natürliche“ (=intrinsische) Dynamik (Antwortmoden) des Prozesses selbst (unabhängig vom gewählten Eingangssignal). PBZ von (11.6) liefert (keine mehrfachen Pole)

$$G(s) = \frac{\alpha_1}{s - p_1} + \frac{\alpha_2}{s - p_2} + \dots + \frac{\alpha_n}{s - p_n} \quad (11.8)$$

Daraus folgt im Zeitbereich:

$$y(t) = \underbrace{\alpha_1 e^{p_1 t} + \alpha_2 e^{p_2 t} + \dots + \alpha_n e^{p_n t}}_{\text{intrinsische Dynamik = "natürliche" Dynamik}} + \text{Moden von U(s)} \quad (11.9)$$

- ⇒ Terme mit $p_i < 0$ ergeben abklingendes (stabiles) Verhalten nach einem Störsignal/Eingangssignal (egal welcher Art)
- ⇒ Terme mit $p_i > 0$ ergeben aufklingendes (instabiles) Verhalten nach einem Störsignal/Eingangssignal (egal welcher Art)
- ⇒ Je größer der Betrag von $\text{Re}(p_i)$ ist, desto schneller ist das Antwortverhalten.

- Falls konjugiert komplexe Pole auftreten, gilt:

$$G(s) = \dots + \frac{\alpha_1 + j\beta_1}{s - p_1} + \frac{\alpha_2 - j\beta_2}{s - p_2} + \dots \quad (11.10)$$

mit

$$p_{1,2} = \gamma \pm j \cdot \omega, \quad \gamma = \text{Re}(p_{1,2}), \quad \omega = \text{Im}(p_{1,2}) \quad (11.11)$$

Im Zeitbereich folgt aus (11.10):

$$y(t) = \dots + c_1 e^{\gamma t} \cos(\omega t) + c_2 e^{\gamma t} \sin(\omega t) + \dots \quad (11.12)$$

mit den reellwertigen Gewichtungsfaktoren c_1 und c_2 .

- ⇒ Terme mit $\gamma < 0$ ergeben abklingendes (stabiles) oszillatorisches Verhalten nach einem Störsignal/Eingangssignal
- ⇒ Terme mit $\gamma > 0$ ergeben aufklingendes (instabiles) oszillatorisches Verhalten nach einem Störsignal/Eingangssignal

- Falls ein Pol p_i genau r -mal auftritt:

$$G(s) = \dots + \frac{\alpha_1}{s - p_i} + \frac{\alpha_2 s}{s - p_i} + \frac{\alpha_3 s^2}{s - p_i} + \dots + \frac{\alpha_r s^{r-1}}{s - p_i} + \dots \quad (11.13)$$

folgt im Zeitbereich:

$$y(t) = \dots + \alpha_1 e^{p_1 t} + \alpha_2 t e^{p_2 t} + \alpha_3 \frac{t^2}{2!} e^{p_3 t} + \dots + \alpha_r \frac{t^{r-1}}{(r-1)!} e^{p_r t} + \dots \quad (11.14)$$

⇒ $\operatorname{Re}(p_i) < 0$ ergibt abklingendes (stabiles) Verhalten

⇒ $\operatorname{Re}(p_i) > 0$ ergibt aufklingendes (instabiles) Verhalten

- Daraus kann allgemein für die **Stabilität eines linearen Systems** gefolgert werden:
 - ⇒ Falls für alle Pole $\operatorname{Re}(p_i) < 0$ (Lage in der linken Halbebene) gilt, ist das System stabil.
 - ⇒ Falls mind. ein Pol mit $\operatorname{Re}(p_i) > 0$ (Lage in der rechten Halbebene) existiert, ist das System instabil.

- Beispiel: Ein System möge Übertragungsfunktion

$$G(s) = \frac{k}{(\tau_1 s + 1)(\tau_2^2 s^2 + 2\zeta\tau_2 s + 1)} \quad (11.15)$$

besitzen. Daraus kann geschlussfolgert werden:

⇒ Ein stabiler Eigenwert mit der Lage:

$$p_1 = -\frac{1}{\tau_1} < 0$$

⇒ Zwei konjugiert komplexe Eigenwerte, die stabil sind, falls $\zeta > 0$:

$$p_{2,3} = -\frac{\zeta}{\tau_2} + j \frac{\sqrt{1-\zeta^2}}{\tau_2}$$

11.2.2 Qualitative Dynamik infolge der Lage der Nullstellen

- Die An- oder Abwesenheit von Nullstellen hat keine Auswirkung auf die Zahl und Lage der Pole in (11.6), es sei denn, dass eine exakte Pol-Nullstellen-Auslöschung stattfindet (d.h., Pol und Nullstelle haben identische numerische Werte).
- Die Nullstellen haben Auswirkung auf die Gewichtungsfaktoren der Antwortterme in $y(t)$. Diese Gewichtungsfaktoren gewinnt man mit Hilfe der Partialbruchzerlegung von $G(s)$.

- Beispiel: Ein System möge die Übertragungsfunktion

$$G(s) = \frac{k(\tau_{z1}s + 1)}{(\tau_{p1}s + 1)(\tau_{p2}s + 1)} \quad (11.16)$$

mit $\tau_{p1} > \tau_{p2}$ und $\tau_{z1} \neq \tau_{p1}$, $\tau_{z1} \neq \tau_{p2}$ besitzen, und mit einem Eingangssprung der Amplitude A befragt werden.

Das Antwortsignal kann zerlegt werden in die Partialbrüche

$$\begin{aligned} Y(s) &= G(s) \cdot \frac{A}{s} = \frac{kA(\tau_{z1}s + 1)}{s(\tau_{p1}s + 1)(\tau_{p2}s + 1)} = \\ &= kA \left(1 + \frac{\tau_{z1} - \tau_{p1}}{\tau_{p1}s + 1} + \frac{\tau_{z1} - \tau_{p2}}{\tau_{p2}s + 1} \right) \end{aligned} \quad (11.17)$$

Im Zeitbereich folgt:

$$y(t) = kA \left(1 + \left(\frac{\tau_{z1} - \tau_{p1}}{\tau_{p1} - \tau_{p2}} \right) e^{-t/\tau_{p1}} + \left(\frac{\tau_{z1} - \tau_{p2}}{\tau_{p2} - \tau_{p1}} \right) e^{-t/\tau_{p2}} \right) \quad (11.18)$$

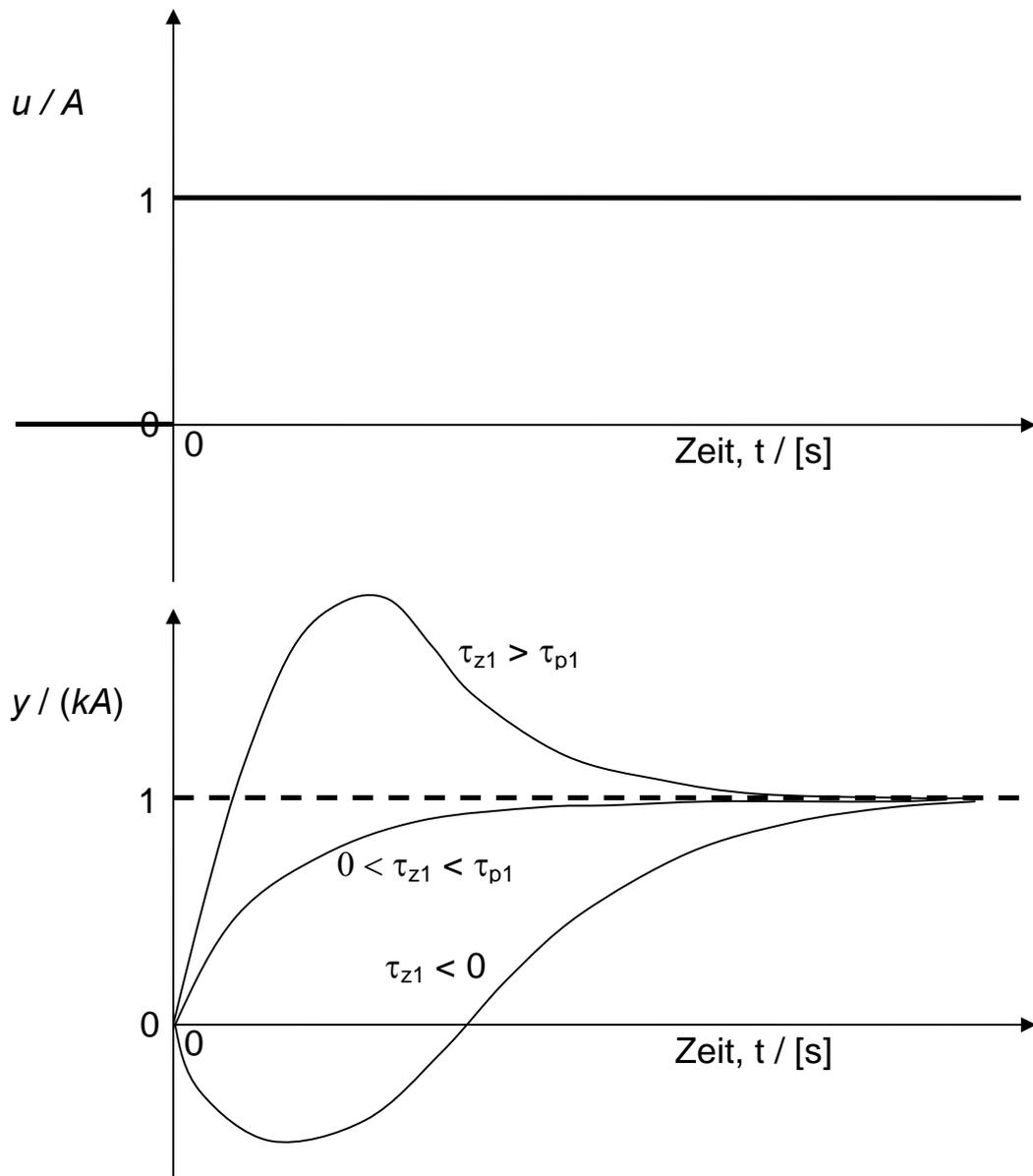
Daraus kann gefolgert werden:

- ⇒ Für $t \rightarrow \infty$ folgt $y = k \cdot A$, d.h. die Nullstelle der Übertragungsfunktion verändert den Endwert nach dem Abklingen nicht.
 - ⇒ Die Nullstellen beeinflussen die Gewichtung der beiden Antwortmoden (exponentielle Terme) der Lösung (11.18).
 - ⇒ Abb.11.3 zeigt drei Fälle: a) $\tau_{z1} > \tau_{p1}$; b) $0 < \tau_{z1} < \tau_{p1}$; c) $\tau_{z1} < 0$
- Für $\tau_{z1} = \tau_{p1}$ ergibt sich in (11.16) eine Pol-Nullstellen-Auslöschung. Die Übertragungsfunktion vereinfacht sich dann zu:

$$G(s) = \frac{k}{(\tau_{p2}s + 1)} \quad (11.19)$$

d.h., das System verhält sich wie ein System erster Ordnung (obwohl es eigentlich ein System zweiter Ordnung ist, da zwei Polstellen existieren). Falls sich die Zeitkonstanten τ_{z1} und τ_{p1} leicht voneinander unterscheiden, ist die Auslöschung nicht perfekt, d.h. das System verhält sich definitiv wie ein System zweiter Ordnung.

Abb. 11.3: Antwortverhalten des betrachteten Systems in Abhängigkeit von der Lage der Nullstelle für einen Eingangssprung



Fall (a): $\tau_{z1} > \tau_{p1} \Rightarrow$ sog. Overshoot-Verhalten

Fall (b): $0 < \tau_{z1} < \tau_{p1} \Rightarrow$ näherungsweise Verhalten wie ein System erster Ordnung

Fall (c): $\tau_{z1} < 0$ (d.h. $z_1 > 0$) \Rightarrow inverses Antwortverhalten (negative Anfangssteigung)

- **Inverses Antwortverhalten:**

⇒ $z_1 > 0$ (Nullstelle in der rechten Halbebene)

⇒ typisch für chem. Festbettreaktoren; dort: Anstieg der Ausgangstemperatur, wenn Eingangstemperatur abgesenkt wird

⇒ Nachweis über Betrachtung der Anfangssteigung des Antwortsignals mit Hilfe des Anfangswert-Theorem der LT:

$$\lim_{t \rightarrow 0} \frac{dy(t)}{dt} = \lim_{s \rightarrow \infty} \left(s \cdot L \left[\frac{dy}{dt} \right] \right) = \lim_{s \rightarrow \infty} (s \cdot (sY(s) - y(0))) = \lim_{s \rightarrow \infty} (s^2 Y(s)) \quad (11.20)$$

Mit (11.17) folgt:

$$\lim_{t \rightarrow 0} \left(\frac{dy(t)}{dt} \right) = \lim_{s \rightarrow \infty} \left(\frac{kAs(\tau_{z1}s + 1)}{(\tau_{p1}s + 1)(\tau_{p2}s + 1)} \right) = \frac{kA\tau_{z1}}{\tau_{p1}\tau_{p2}} \quad (11.21)$$

Aus (11.21) folgt mit $k > 0$, $A > 0$, $\tau_{p1} > 0$, $\tau_{p2} > 0$: inverses Antwortverhalten (negative Anfangssteigung), falls $\tau_{z1} < 0$ ($z_1 > 0 \Rightarrow$ Nullstelle in der rechten Halbebene).

- Sprungantwort bei mehreren pos. Nullstellen (alle $z_j > 0$, alle $p_j < 0$):

⇒ Es treten soviele Inversionen auf, wie Nullstellen vorhanden sind.

⇒ Anfangswert der Steigung:

$$\lim_{t \rightarrow 0} \frac{dy(t)}{dt} = \lim_{s \rightarrow \infty} \left(kA \frac{s(\tau_{z1}s + 1) \dots (\tau_{z,m}s + 1)}{(\tau_{p1}s + 1) \dots (\tau_{pn}s + 1)} \right) = \lim_{s \rightarrow \infty} \left(kA \frac{\left(\prod_{i=1}^m \tau_{zi} \right) s^{m+1-n}}{\left(\prod_{i=1}^n \tau_{pi} \right)} \right) \quad (11.22)$$

Daraus folgt:

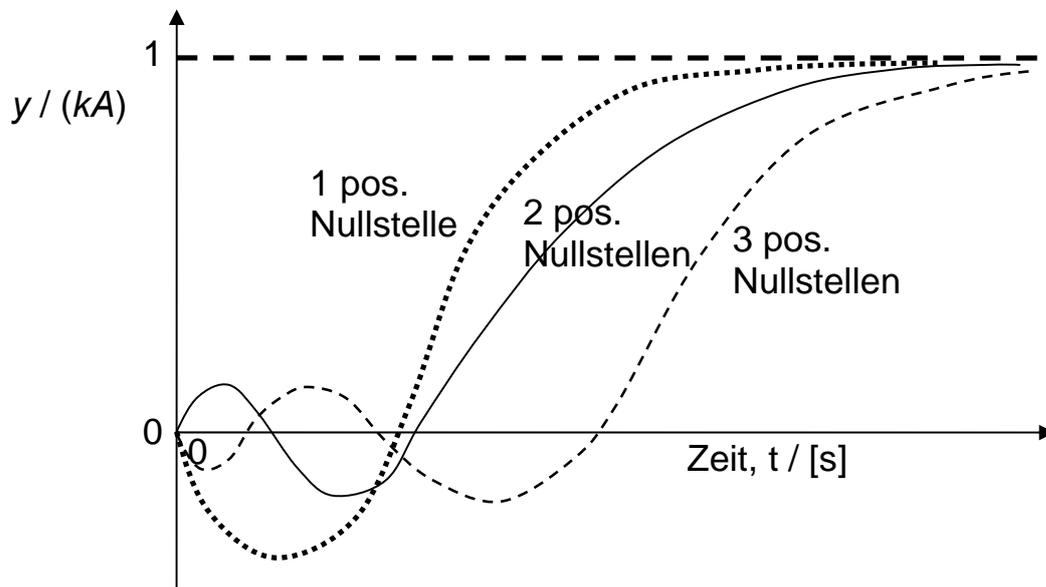
⇒ Falls $m + 1 = n$, wird das Vorzeichen der Anfangssteigung durch das Produkt der Nullstellen festgelegt.

Für den Sonderfall, das nur positive Nullstellen vorliegen, gilt:

⇒ m ungerade: „echt“ inverses Verhalten

⇒ m gerade: m Inversionen, aber Signal geht sofort in Richtung des Endwertes. Anmerk.: Diesen kann man mit dem LT-Endwerttheorem direkt bestimmen:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} y(t) = \lim_{s \rightarrow 0} (sY(s)) = kA > 0, \text{ falls } k > 0, A > 0 \quad (11.23)$$

Abb. 11.4: Sprungantworten für unterschiedliche Zahl positiver Nullstellen.

11.3 Totzeitglieder

- **Bespiel:** Transport durch Rohrleitungen führt zu Verzögerungen, die durch die Bewegung der Fluide verursacht wird.
- Die Transportzeit (Totzeit, bis das Antwortsignal „anspringt“) ist gegeben durch:

$$\theta = \frac{\text{Länge des Rohres}}{\text{Fluid - Geschwindigkeit}} \sim \frac{\text{Volumen des Rohres}}{\text{volumetrischer Mengenstrom}} \quad (11.24)$$

- Das Ein-Ausgangs-Verhalten im Zeitbereich lässt sich beschreiben als

$$y(t) = \begin{cases} 0 & \text{für } t < \theta \\ u(t-\theta) & \text{für } t \geq \theta \end{cases} \quad (11.25)$$

d.h., das Antwortsignal wird um die Totzeit θ verzögert.

- LT liefert die Übertragungsfunktion eines Totzeitgliedes:

$$G(s) = \frac{Y(s)}{U(s)} = e^{-\theta s} \quad (11.26)$$

- (11.26) ist eine transzendente Übertragungsfunktion. In der Prozessdynamik werden aus Gründen der einfacheren Analyse jedoch gebrochen rationale Funktionen in s bevorzugt. D.h., es ist folgende Approximation anzustreben:

$$e^{-\theta s} \approx \frac{a_p (\theta s)^p + a_{p-1} (\theta s)^{p-1} + \dots + a_0}{b_q (\theta s)^q + b_{q-1} (\theta s)^{q-1} + \dots + b_0} \quad (11.27)$$

- Die Ordnungen (p, q) der Polynome und die Koeffizienten a_j, b_j werden so gewählt, dass die Reihenentwicklung von (11.27) die Taylor-Reihe

$$e^{-\theta s} = 1 - \theta s + \frac{(\theta s)^2}{2!} - \frac{(\theta s)^3}{3!} + \dots \quad (11.28)$$

möglichst gut approximiert. Für die praktische Anwendung ist es vorteilhaft, (p, q) möglichst niedrig zu halten.

- **Padé-Approximationen:** Unter allen möglichen Approximationen geben diese Approximationen für vorgegebene Ordnungen (p, q) eine größtmögliche Zahl von Termen in (11.28) richtig wieder.

Padé-Approx. erster Ordnung ($p=q=1$) / zweiter Ordnung ($p=q=2$):

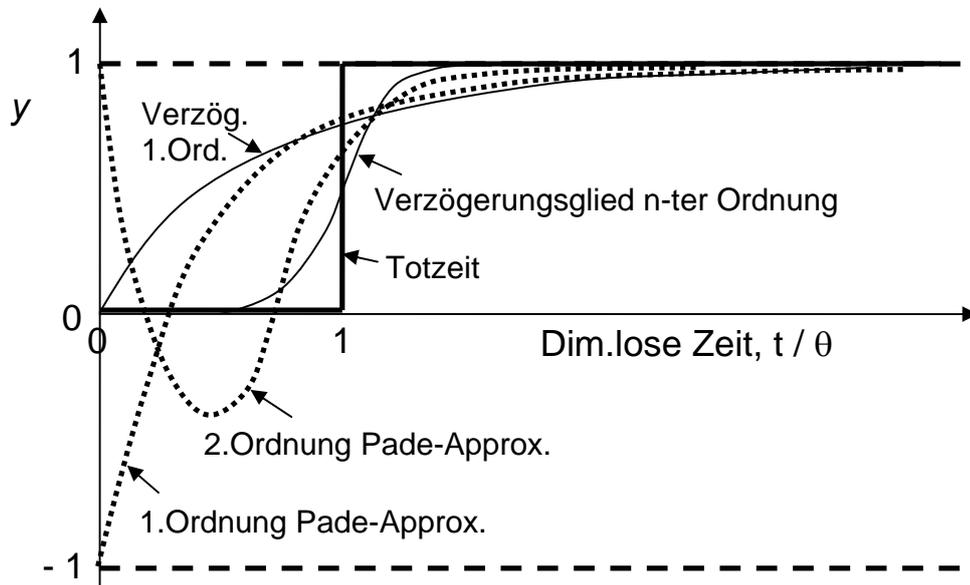
$$e^{-\theta s} \approx \frac{1 - \frac{\theta}{2}s}{1 + \frac{\theta}{2}s} ; e^{-\theta s} \approx \frac{1 - \frac{\theta}{2}s + \frac{\theta^2}{12}s^2}{1 + \frac{\theta}{2}s + \frac{\theta^2}{12}s^2} \quad (11.29a,b)$$

- Man kann auch zeigen, dass gilt:

$$e^{-\theta s} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{\left(\frac{\theta s}{n} + 1\right)^n} \quad (11.30)$$

d.h., das Totzeitglied kann durch ein Verzögerungsglied sehr hoher Ordnung n approximiert werden. Allerdings liefert die Padé-Approximation (im Frequenzbereich) eine bessere Näherung des dynamischen Verhaltens bei niedriger Ordnung (p, q) .

Abb.11.5: Sprungantworten eines Totzeit-Gliedes sowie verschiedener Approximationen.



12 Blockschaltbilder

12.1 Reihenschaltungen

- Rückwirkungsfreie Systeme (Bsp: Kaskade zweier Rührtanks unterschiedlichen Volumens ohne chem. Reaktion, in Reihe geschaltet) \Rightarrow stromabwärts liegender Tank hat keinen Einfluss auf den stromaufwärts liegenden Tank.

- Modell:

$$\text{Tank 1: } \frac{dc_1}{dt} = \frac{F_{in}}{V_1} (c_{in,1} - c_1) \quad (12.1a)$$

$$\text{Tank 2: } \frac{dc_2}{dt} = \frac{F_{in}}{V_2} (c_1 - c_2) \quad (12.1b)$$

- LT des Modells mit Null-Anfangsbedingungen:

$$\text{Tank 1: } sC_1(s) = \frac{F_{in}}{V_1} (C_{in,1}(s) - C_1(s)) \quad (12.2a)$$

$$\text{Tank 2: } sC_2(s) = \frac{F_{in}}{V_2} (C_1(s) - C_2(s)) \quad (12.2b)$$

- Festlegung der Ein- und Ausgangsgrößen der Kaskade:

$$U(s) = C_{in,1}(s); Y(s) = C_2(s) \quad (12.3)$$

- Übertragungsfunktionen der beiden Tanks:

$$G_1(s) = \frac{C_1(s)}{C_{in,1}(s)}; G_2(s) = \frac{C_2(s)}{C_1(s)} \quad (12.4)$$

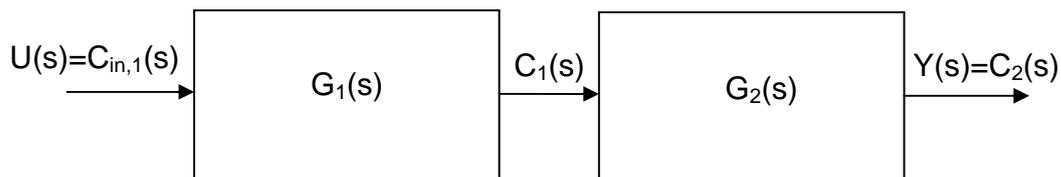
Aus (12.2a,b) folgt nach LT:

$$G_1(s) = \frac{1}{(V_1 / F_{in}s + 1)}; G_2(s) = \frac{1}{(V_2 / F_{in}s + 1)} \quad (12.5)$$

- Diese Reihenschaltung führt zur Multiplikation der Übertragungsfunktionen (Abb.12.1):

$$\begin{aligned}
 G_{ges}(s) &= \frac{C_2(s)}{C_{in,1}(s)} = \frac{C_2(s)}{C_1(s)} \cdot \frac{C_1(s)}{C_{in,1}(s)} = \\
 &= G_1(s) \cdot G_2(s) = \frac{1}{(V_1 / F_{in} s + 1)(V_2 / F_{in} s + 1)}
 \end{aligned}
 \tag{12.6}$$

Abb.12.1: Blockschaltbild einer Reihenschaltung



- Gesamtübertragungsfunktion:

$$G_{ges}(s) = G_1(s) \cdot G_2(s) = \frac{Z_1(s) \cdot Z_2(s)}{N_1(s) \cdot N_2(s)}
 \tag{12.7}$$

- Aus (12.7) folgt verallgemeinert: Eine Reihenschaltung von Teilprozessen ist stabil, wenn die einzelnen Teilprozesse jeweils stabil sind. Die Nullstellen und Pole der Gesamtübertragungsfunktion stimmen mit den Nullstellen und Polen der Einzelübertragungsfunktionen überein.

12.2 Parallelschaltungen

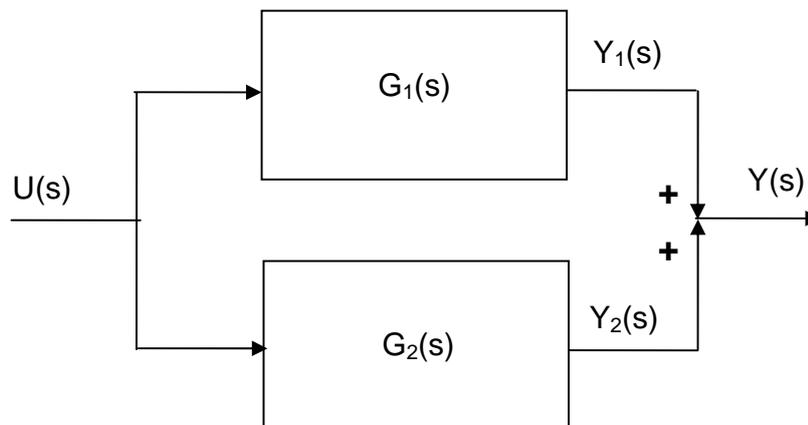
- Das Verhalten eines chemischen Prozesses lässt sich häufig als Parallelschaltung von zwei Prozessen beschreiben (Abb.12.2).

- Ausgangsgröße des Systems ist Summe der Einzelantworten:

$$Y(s) = Y_1(s) + Y_2(s) = (G_1(s) + G_2(s))U(s)
 \tag{12.8}$$

- Gesamtübertragungsfunktion:

$$G_{ges}(s) = G_1(s) + G_2(s)
 \tag{12.9}$$

Abb. 12.2: Blockschaltbild einer Parallelschaltung

- **Beispiel:** Parallelschaltung zweier Übertragungsglieder erster Ordnung:

$$G_1(s) = \frac{k_1}{\tau_{p1}s + 1}; \quad G_2(s) = \frac{k_2}{\tau_{p2}s + 1} \quad (12.10a,b)$$

- Gesamtübertragung:

$$G_{ges}(s) = \frac{k_1}{\tau_{p1}s + 1} + \frac{k_2}{\tau_{p2}s + 1} \quad (12.11)$$

- Verstärkungsfaktor/Zeitkonstanten-Form:

$$G_{ges}(s) = k \frac{(\tau_{z1}s + 1)}{(\tau_{p1}s + 1)(\tau_{p2}s + 1)} \quad (12.12)$$

mit

$$k = k_1 + k_2; \quad \tau_{z1} = \frac{k_1\tau_{p2} + k_2\tau_{p1}}{k_1 + k_2} \quad (12.13)$$

- **Bedingung für inverses Antwortverhalten:**

$$z_1 = -\frac{1}{\tau_{z1}} > 0 \Rightarrow \frac{k_1\tau_{p2} + k_2\tau_{p1}}{k_1 + k_2} < 0 \Leftrightarrow \frac{k_1\tau_{p2}}{k_1 + k_2} < \frac{-k_2\tau_{p1}}{k_1 + k_2} \quad (12.14)$$

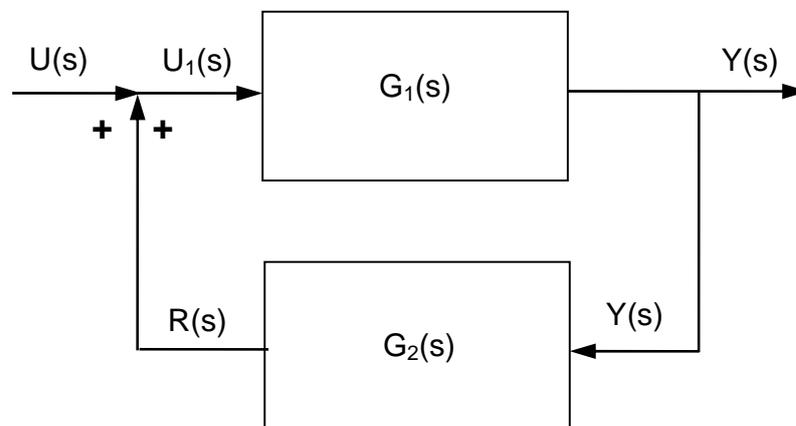
- 1) Falls $k_1 + k_2 > 0$, dann $k_1 \tau_{p2} < -k_2 \tau_{p1} \Rightarrow \frac{\tau_{p2}}{\tau_{p1}} < -\frac{k_2}{k_1}$.
- 2) Falls $k_1 + k_2 < 0$, dann $k_1 \tau_{p2} > -k_2 \tau_{p1} \Rightarrow \frac{\tau_{p2}}{\tau_{p1}} > -\frac{k_2}{k_1}$.

D.h., inverses Verhalten tritt auf, wenn der Verstärkungsfaktor k_1 des langsameren Prozesses (größeres τ_{p1}) betragsmäßig größer ist als die Verstärkung k_2 des schnelleren Prozesses (kleineres τ_{p2}).

12.3 Rückführschaltungen

- Rückführungen in chemischen Anlagen
- Informationsrückführung in geschlossenen Regelkreisen
- Interne Rückkopplung innerhalb der Prozesselemente (z.B. Materialbilanz \Leftrightarrow Energiebilanz)

Abb. 12.3: Blockschaltbild einer Parallelschaltung



- Für die Signalflüsse gilt:

$$Y(s) = G_1(s) \cdot U_1(s)$$

$$U_1(s) = U(s) + R(s)$$

$$R(s) = G_2(s) \cdot Y(s)$$

(12.15)

- Gesamtübertragung:

$$Y(s) = G_1(s) \cdot (U(s) + G_2(s) \cdot Y(s))$$

$$\Leftrightarrow Y(s) = \frac{G_1(s)}{1 - G_1(s) \cdot G_2(s)} \cdot U(s) \quad (12.16)$$

- Stabilität ist gegeben, falls die Realteile der Pole des geschlossenen Kreises negativ sind, d.h. $\operatorname{Re}(p_i) < 0$ für alle Pole i .
- Pole und Nullstellen der Rückführschaltung ergeben sich allg. wie folgt:

$$G_1(s) = \frac{Z_1(s)}{N_1(s)}; \quad G_2(s) = \frac{Z_2(s)}{N_2(s)} \quad (12.17)$$

$$G_{\text{ges}}(s) = \frac{Z_1(s) \cdot N_2(s)}{N_1(s) \cdot N_2(s) - Z_1(s) \cdot Z_2(s)} \quad (12.18)$$

- Beispiel: Rückführschaltung zweier Übertragungsglieder erster Ordnung:

$$G_1(s) = \frac{k_1}{\tau_{p1}s + 1}; \quad G_2(s) = \frac{k_2}{\tau_{p2}s + 1} \quad (12.19)$$

- Gesamtübertragung:

$$G_{\text{ges}}(s) = \frac{k_1(\tau_{p2}s + 1)}{(\tau_{p1}s + 1)(\tau_{p2}s + 1) - k_1k_2}$$

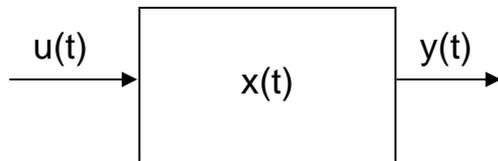
$$= \frac{k_1(\tau_{p2}s + 1)}{\tau_{p1}\tau_{p2}s^2 + ((\tau_{p1} + \tau_{p2})s + 1 - k_1k_2)} \quad (12.20)$$

- Diese Schaltung ist stabil, falls die Pole von $G_{\text{ges}}(s)$ negative Realteile haben. Dies gilt, wenn

$$k_1k_2 < 1. \quad (12.21)$$

13 MIMO-Systeme

- MIMO-System = Multiple Input Multiple Output



$u(t)$: Vektor der Eingangsgrößen
 $x(t)$: Vektor der Zustandsgrößen
 $y(t)$: Vektor der Ausgangsgrößen

13.1 Matrix der Übertragungsfunktionen

- Das Zustandsraummodell geht aus dem im allg. nichtlinearen Prozessmodell durch Linearisierung an einem Betriebspunkt hervor (vgl. Kap. 7). Es lautet:

$$\frac{dx}{dt} = A \cdot x + B \cdot u \quad (13.1)$$

$$y = C \cdot x + D \cdot u \quad (13.2)$$

mit

$x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ Zustandsvektor

$u = (u_1, u_2, \dots, u_m)$ Eingangsvektor

$y = (y_1, y_2, \dots, y_p)$ Ausgangsvektor

- Laplace-Transformation liefert:

$$sX(s) - x(t=0) = A \cdot X(s) + B \cdot U(s) \quad (13.3)$$

$$Y(s) = C \cdot X(s) + D \cdot U(s) \quad (13.4)$$

- Aus (13.3) folgt mit der AB $x(t=0) = 0$:

$$X(s) = (sI_n - A)^{-1} \cdot B \cdot U(s) \quad (13.5)$$

und mit (13.4):

$$Y(s) = (C(sI - A)^{-1}B + D) \cdot U(s) \quad (13.6)$$

- Aus (13.6) folgt die Matrix der Übertragungsfunktionen G(s):

$$Y(s) = G(s) \cdot U(s) \quad (13.7)$$

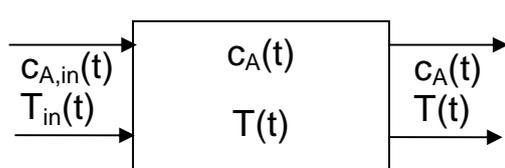
$$\text{mit } G(s) = C(sI - A)^{-1}B + D \quad (13.8)$$

- $G(s)$ ist eine $(m \times p)$ -Matrix:

$$G(s) = \begin{bmatrix} G_{11}(s) & G_{12}(s) & \dots & G_{1m}(s) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ G_{p1}(s) & G_{p2}(s) & \dots & G_{pm}(s) \end{bmatrix} \quad (13.9)$$

- Das Element $G_{ij}(s)$ beschreibt das Übertragungsverhalten der Eingangsgröße $U_j(s)$ auf die Ausgangsgröße $Y_i(s)$.

13.2 Beispiel: Rührkessel mit exothermer chem. Reaktion



$u(t)$: 2 Eingangsgrößen
 $x(t)$: 2 Zustandsgrößen
 $y(t)$: 2 Ausgangsgrößen

- Vereinfachende Annahmen:

- irreversible chem. Reaktion 1. Ordnung $A \rightarrow B$
- konstantes Reaktionsvolumen V
- konstante Stoffeigenschaften (c_p^m, ρ)
- molzahlbeständige Reaktion, d.h. konstanter Volumenstrom $F_{in} = F$
- Leistungseintrag durch Rührer vernachlässigt
- kein Wärmestrom in die Umgebung

- Mengenbilanz der Komponente A:

$$V \frac{dc_A}{dt} = F(c_{A,in} - c_A) - V \cdot k_o e^{-E_A/(RT)} c_A \quad (13.10)$$

- Enthalpiebilanz:

$$V\rho c_p \frac{dT}{dt} = F\rho c_p (T_{in} - T) + V(-\Delta_R h^m) \cdot k_o e^{-E_A/(RT)} c_A \quad (13.11)$$

- Prozessmodell für die Zustandsgrößen $x = (c_A, T)$:

$$\frac{dc_A}{dt} = \frac{F}{V}(c_{A,in} - c_A) - k_0 e^{-E_A/(RT)} c_A \equiv f_1(c_A, T) \quad (13.12)$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{F}{V}(T_{in} - T) + \frac{-\Delta_R h^m}{\rho c_p} k_0 e^{-E_A/(RT)} c_A \equiv f_2(c_A, T) \quad (13.13)$$

- Linearisierung bzgl. Zustands- und Eingangsgrößen an einem stationären Betriebspunkt (Index s):

$$f_1(c_A, T) \approx f_1(c_{A,S}, T_S) + A_{11} \Delta c_A + A_{12} \Delta T + B_{11} \Delta c_{in} + B_{12} \Delta T_{in} \quad (13.14)$$

$$f_2(c_A, T) \approx f_2(c_{A,S}, T_S) + A_{21} \Delta c_A + A_{22} \Delta T + B_{21} \Delta c_{in} + B_{22} \Delta T_{in} \quad (13.15)$$

mit folgenden partiellen Ableitungen:

$$A_{11} = \left. \frac{\partial f_1}{\partial c_A} \right|_S = -\frac{F}{V} - k_0 e^{-E_A/(RT_S)}$$

$$A_{12} = \left. \frac{\partial f_1}{\partial T} \right|_S = -k_0 \frac{E_A}{RT_S^2} e^{-E_A/(RT_S)} c_{A,S}$$

$$A_{21} = \left. \frac{\partial f_2}{\partial c_A} \right|_S = +k_0 \frac{-\Delta_R h^m}{\rho c_p} e^{-E_A/(RT_S)}$$

$$A_{22} = \left. \frac{\partial f_2}{\partial T} \right|_S = -\frac{F}{V} + k_0 \frac{E_A}{RT_S^2} \frac{-\Delta_R h^m}{\rho c_p} e^{-E_A/(RT_S)} c_{A,S}$$

$$B_{11} = \left. \frac{\partial f_1}{\partial c_{A,in}} \right|_S = +\frac{F}{V}$$

$$B_{12} = \left. \frac{\partial f_1}{\partial T_{in}} \right|_S = 0$$

$$B_{21} = \left. \frac{\partial f_2}{\partial c_{A,in}} \right|_S = 0$$

$$B_{22} = \left. \frac{\partial f_2}{\partial T_{in}} \right|_S = +\frac{F}{V}$$

- Zustandsraummodell (in Distanzvariablen):

$$\underbrace{\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \Delta c_A \\ \Delta T \end{pmatrix}}_{dx(t)/dt} = \underbrace{\begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix}}_{x(t)} \underbrace{\begin{pmatrix} \Delta c_A \\ \Delta T \end{pmatrix}}_{x(t)} + \underbrace{\begin{bmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{bmatrix}}_{u(t)} \underbrace{\begin{pmatrix} \Delta c_{A,in} \\ \Delta T_{in} \end{pmatrix}}_{u(t)} \quad (13.16)$$

$$\underbrace{\begin{pmatrix} \Delta c_A \\ \Delta T \end{pmatrix}}_{y(t)} = \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}}_{x(t)} \underbrace{\begin{pmatrix} \Delta c_A \\ \Delta T \end{pmatrix}}_{x(t)} \quad (13.17)$$

- Laplace-Transformierte der Distanz-Variablen:

$$C(s) = L[\Delta c_A(t)]; \quad C_{in}(s) = L[\Delta c_{A,in}(t)] \quad (13.18)$$

$$T(s) = L[\Delta T(t)]; \quad T_{in}(s) = L[\Delta T_{in}(t)] \quad (13.19)$$

- LT von (13.16) ergibt mit den Nullbedingungen als AB:

$$\begin{pmatrix} s \cdot C \\ s \cdot T \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} C \\ T \end{pmatrix} + \begin{bmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} C_{in} \\ T_{in} \end{pmatrix} \quad (13.20)$$

- Aus (13.20) folgt wegen $B_{12} = B_{21} = 0$:

$$\begin{aligned} sC &= A_{11}C + A_{12}T + B_{11}C_{in} \\ sT &= A_{21}C + A_{22}T + B_{22}T_{in} \end{aligned} \quad (13.21)$$

- Auflösung von (13.21) liefert:

$$C = \frac{(s - A_{22})B_{11}}{(s - A_{11})(s - A_{22}) - A_{12}A_{21}} C_{in} + \frac{A_{12}B_{22}}{(s - A_{11})(s - A_{22}) - A_{12}A_{21}} T_{in} \quad (13.22)$$

$$T = \frac{A_{21}B_{11}}{(s - A_{11})(s - A_{22}) - A_{12}A_{21}} C_{in} + \frac{(s - A_{11})B_{22}}{(s - A_{11})(s - A_{22}) - A_{12}A_{21}} T_{in} \quad (13.23)$$

- Mit der Matrix der Übertragungsfunktionen

$$G(s) = \frac{1}{\det(sI - A)} \cdot \begin{bmatrix} (s - A_{22})B_{11} & A_{12}B_{22} \\ A_{21}B_{11} & (s - A_{11})B_{22} \end{bmatrix} \quad (13.24)$$

lässt sich kompakt schreiben:

$$\begin{pmatrix} C(s) \\ T(s) \end{pmatrix} = G(s) \cdot \begin{pmatrix} C_{in}(s) \\ T_{in}(s) \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad G(s) = \begin{bmatrix} G_{11}(s) & G_{12}(s) \\ G_{21}(s) & G_{22}(s) \end{bmatrix} \quad (13.25)$$

- Nullstellen treten nur in $G_{11}(s)$ und $G_{22}(s)$ auf:

$$G_{11}(s) \sim (s - A_{22}); \quad G_{22}(s) \sim (s - A_{11}) \quad (13.26)$$

- A_{11} ist stets negativ, A_{22} kann je nach Stärke der Wärmetönung der chemischen Reaktion das Vorzeichen wechseln. D.h., nur $G_{11}(s)$ kann inverses Verhalten zeigen.

- Stabil ist das System, falls die Pole der Übertragungsfunktionen negative Realteile haben. Die Pole erhält man aus

$$\det(sI - A) = (s - A_{11})(s - A_{22}) - A_{12}A_{21} = 0 \quad (13.27)$$

- (13.27) kann man auch schreiben als:

$$\det(sI - A) = s^2 - sp(A) \cdot s + \det(A) = 0 \quad (13.28)$$

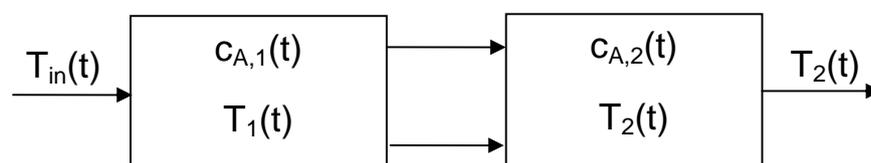
- Die Pole von (13.28)

$$p_{1,2} = \frac{sp(A) \pm \sqrt{(sp(A))^2 - 4 \det(A)}}{2} \quad (13.29)$$

$$\text{sind dann stabil, falls } sp(A) < 0 \text{ und } \det(A) > 0. \quad (13.30)$$

13.3 Beispiel: Reihenschaltung von zwei kont. Rührkesseln des Typs 13.2 mit identischen Parametern

- SIMO-System mit MISO-System in Reihe geschaltet



- Gesucht:

$$G_{ges}(s) = \frac{T_2(s)}{T_{in}(s)} \quad (13.31)$$

- Übertragungsverhalten des ersten Rührreaktors:

$$\begin{pmatrix} C_1(s) \\ T_1(s) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} G_{12}(s) \\ G_{22}(s) \end{pmatrix} \cdot T_{in}(s) \quad (13.32)$$

- Übertragungsverhalten des zweiten Rührreaktors:

$$T_2(s) = G_{21}(s) \cdot C_1(s) + G_{22}(s) \cdot T_1(s) \quad (13.33)$$

- (13.32) in (13.33) eingesetzt liefert:

$$T_2(s) = (G_{21}(s) \cdot G_{12}(s) + G_{22}(s) \cdot G_{22}(s)) \cdot T_{in}(s) \quad (13.34)$$

- Übertragungsfunktion des Gesamtsystems gemäß (13.31) unter Nutzung von (13.24):

$$\begin{aligned} G_{ges}(s) &= G_{21}(s) \cdot G_{12}(s) + G_{22}(s) \cdot G_{22}(s) \\ &= \frac{A_{12}B_{22}A_{21}B_{11} + (s - A_{11})^2 B_{22}^2}{(\det(sI - A))^2} \end{aligned} \quad (13.35)$$

- Aus (13.35) folgt:

⇒ Pole identisch mit Polen der Einzelrührkessel;

⇒ zwei verschiedene Nullstellen, deren Vorzeichen von den Elementen A_{ij} und B_{ij} abhängen:

$$z_{1,2} = A_{11} \pm \frac{\sqrt{-A_{12}B_{22}A_{21}B_{11}}}{B_{22}} \quad (13.36)$$

- Inverses Antwortverhalten ($z_1 > 0$) tritt auf, falls

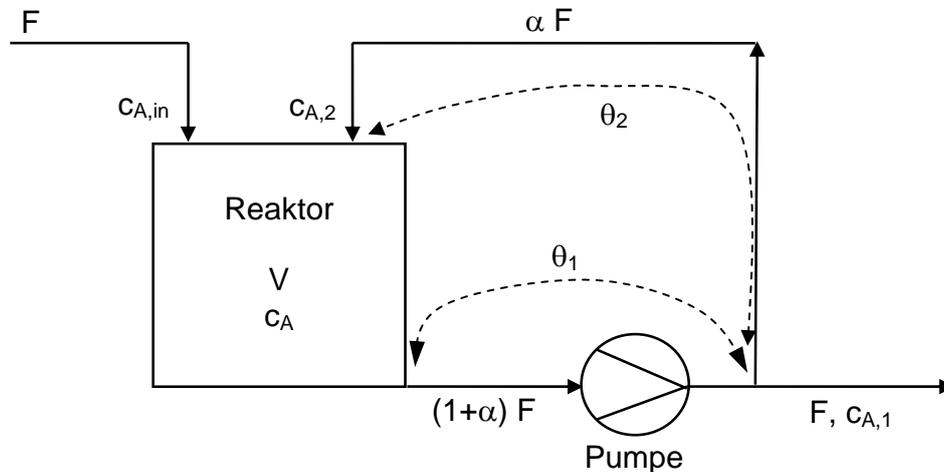
$$\sqrt{-A_{12}B_{22}A_{21}B_{11}} > -A_{11}B_{22} > -\sqrt{-A_{12}B_{22}A_{21}B_{11}} \quad (13.37)$$

und mit (13.14) sowie (13.15) folgt:

$$\Leftrightarrow \sqrt{\frac{E_A}{RT_S^2} c_{A,S} \frac{-\Delta_R h^m}{\rho c_p}} > \frac{F}{Vk(T_S)} + 1 \quad (13.38)$$

d.h., insbesondere bei großer Wärmetönung der chemischen Reaktion kann inverses Antwortverhalten auftreten.

13.4 Beispiel: Reaktor mit externem Kreislauf



- Vereinfachende Annahmen:
 - ideal durchmischter, isothermer Reaktor
 - irreversible chemische Reaktion 1. Ordnung $A \rightarrow B$
 - konstantes Reaktionsvolumen V
 - konstanter Volumenstrom $F_{in} = F$
 - keine chemische Reaktion in der Kreislaufleitung
 - Kreislauf durch Totzeitglieder approximiert
- Mengenbilanz des Reaktors (direkt in Distanzvariablen):

$$V \frac{dc_A}{dt} = Fc_{A,in} + \alpha Fc_{A,2} - (1 + \alpha)Fc_A - Vkc_A \quad (13.39)$$

- Kreislaufleitungen:

$$c_{A,1}(t) = c_A(t - \theta_1) \quad (13.40)$$

$$c_{A,2}(t) = c_{A,1}(t - \theta_2) \quad (13.41)$$

- Laplace-Transformierte:

$$sVC(s) = FC_{in} + \alpha FC_2 - (1 + \alpha)FC - VkcC \quad (13.42)$$

$$C_1(s) = C(s) \cdot e^{-\theta_1 s} \quad (13.43)$$

$$C_2(s) = C_1(s) \cdot e^{-\theta_2 s} = C(s) \cdot e^{-(\theta_1 + \theta_2)s} = C(s) \cdot e^{-\theta_3 s} \quad (13.44)$$

- Gesuchte Übertragungsfunktion:

$$G(s) = \frac{C_1(s)}{C_{in}(s)} = \frac{K \cdot e^{-\theta_1 s}}{\tau s + 1 + \alpha K (1 - e^{-\theta_3 s})} \quad (13.45)$$

mit $K = F / (F + V k)$ und $\tau = V / (F + V k)$.

- Die analytische Rücktransformation in den Zeitbereich ist nur möglich, falls der Nenner von (13.45) als rationaler Ausdruck vorliegt. Daher wenden wir für den Exponentialterm im Nenner die Padé-Approximation 1. Ordnung an:

$$e^{-\theta_3 s} \approx \frac{1 - \frac{\theta_3}{2} s}{1 + \frac{\theta_3}{2} s} \quad (13.46)$$

- Im Zähler von (13.45) ist die Exponentialfunktion $e^{-\theta_1 s}$ dagegen unproblematisch, weil hier für die Rücktransformation der Verschiebungssatz (8.28) eingesetzt werden kann.

- (13.46) eingesetzt in (13.45) liefert: (13.47)

$$G(s) = \frac{C_1(s)}{C_{in}(s)} = \frac{K \cdot \left(1 + \frac{\theta_3}{2} s\right) e^{-\theta_1 s}}{(\tau s + 1) \left(1 + \frac{\theta_3}{2} s\right) + \alpha K \theta_3 s} = K \frac{(\tau_{z1} s + 1) e^{-\theta_1 s}}{(\tau_{p1} s + 1) (\tau_{p2} s + 1)}$$

- Die Sprungantwort ist von folgender Form:

$$C_1(s) = G(s) \frac{A}{s} = KA \frac{(\tau_{z1} s + 1) e^{-\theta_1 s}}{s (\tau_{p1} s + 1) (\tau_{p2} s + 1)} \quad (13.48)$$

- Im Zeitbereich folgt:

$$c_1(t) = KA \left(1 + a_1 e^{-(t-\theta_1)/\tau_{p1}} + a_2 e^{-(t-\theta_1)/\tau_{p2}}\right) \cdot S(t - \theta_1) \quad (13.49)$$

In (13.49) bezeichnet $S(t - \theta_1)$ den um die Zeitdauer θ_1 verschobenen Einheitssprung.