UNIVERSITY OF APPLIED SCIENCES

THM
TECHNISCHE HOCHSCHULE MITTELHESSEN

Olaf Strelow

Fabian Dawitz

Validierung von Zuständen in energetisch und stofflich verflochtenen Systemen durch Analyse von Messdaten

THM-Hochulschriften Band 14

Olaf Strelow
Fabian Dawitz

Validierung von Zuständen in energetisch und stofflich verflochtenen Systemen durch Analyse von Messdaten

THM-Hochschulschriften Band 14

THM-Hochschulschriften Band 14

© 2020 Olaf Strelow, Fabian Dawitz
Technische Hochschule Mittelhessen
Fachbereich Maschinenbau und Energietechnik
Herausgeber der THM-Hochschulschriften:
Der Präsident der Technischen Hochschule Mittelhessen

Alle Rechte vorbehalten, Nachdruck, auch auszugsweise, nur mit schriftlicher Genehmigung und Quellenangabe.

Einzelne Hochschulschriften sind auch online abrufbar:
www.thm.de/bibliothek/thm-hochschulschriften

ISSN (Print) 2568-0846
ISSN (Online) 2568-3020

Inhaltsverzeichnis

1 Mathematische Beschreibung von makroskopischen Systemeigenschaften 5

2 Validierung mittels Methode der Fehlerquadrate 6

3 Validierung mit relativer Wichtung der Meßwerte 7

4 Validierung mit unvollständigen Messdaten 8

5 Beispiele zur Validierung 8
5.1 Validierung von Messungen der Verbrennung eines lösungsmittelbeladenen Abluftstroms 9
5.2 Analyse einer Wärmerückgewinnungsschaltung durch Messung von Temperaturen 13

6 Formelzeichen 17
6.1 Skalare 17
6.2 Vektoren 17
6.3 Matrizen 18
6.4 Indizes 18

7 Literatur 18

Validierung von Zuständen in energetisch und stofflich verflochtenen Systemen durch Analyse von Messdaten

Prof. Dr.-Ing. O. Strelow; M.Sc. F. Dawitz
Technische Hochschule Mittelhessen - FB Maschinenbau Energietechnik
Institut für Thermodynamik, Energieverfahrenstechnik u. Systemanalyse

St. Tönis, 1.4.2020

Computergestützte Steuerungen und Regelungen komplexer Anlagen der stoff- und energiewandelnden Industrie verarbeiten umfangreiche Datenmengen. Ein wesentlicher Teil des Datenaufkommens entsteht durch Messung technologischer Größen. Diese Daten sind zur Beurteilung des aktuellen Anlagenzustandes erforderlich und beeinflussen die Art und Weise der Prozesseinwirkung. Leider unterliegen gemessene Daten zahlreichen Fehlerquellen. Messfehler können systematischer oder zufälliger Natur sein und treten zufällig gestreut auf. Aussagen über Fehlerstreuungen einzelner Messungen sind statistisch unscharf und helfen bezogen auf den Einzelfall selten weiter. Komplexe Fehlerbehandlungen erfordern Methoden der Validierung.

Die Validierung von Messdaten aus der Prozessbeobachtung ist seit den siebziger Jahren des 20. Jahrhunderts ein häufig untersuchtes Thema. Die meist erfolgreich angewendeten Herangehensweisen sind sehr vielfältig und auf die jeweils verfolgten Zielstellungen zugeschnitten. Jüngere Arbeiten orientieren auf einen simultanen Abgleich zwischen gemessenen und simulierten Daten und lassen Aussagen zur Beobachtungsgüte der Prozesse zu [1], [2] und [3]. Die nachfolgenden Ausführungen beschreiben ein schrittweises Vorgehen, bei welchem zunächst physikalisch-chemisch widersprüchliche Messdaten einen Abgleich erfahren und anschließend als Input für Simulationen und Optimierungen zur Verfügung stehen.

Die Gewinnung und die Verarbeitung von Messwerten sind auf die Eliminierung der Fehler gerichtet. Üblicherweise erfolgen Mehrfachmessungen der beschreibenden Größen mit statistischer Analyse der Messwerte. Dieses Vorgehen führt jedoch nicht zwangsläufig zum Ziel. Systeme mit nicht ausreichender Anzahl von Messstellen generieren zu wenig Informationen für den Nachweis mathematischer Zusammenhänge zwischen Zustandsgrößen. Dieses Informationsdefizit lässt die ermittelten Größen irrtümlich als voneinander unabhängig erscheinen. Bei Systemen mit ausreichender Zahl von Messstellen treten häufig Widersprüche zwischen gemittelten Messwerten auf, da mathematische Zusammenhänge unter den Zustandsgrößen bei Auswertung der Messdaten unberücksichtigt bleiben. Nachfolgend wird ein Verfahren zur Validierung vorgestellt, welches bei der Verarbeitung von Messdaten physikalische Widersprüche ausschließt.

Die automatische Beobachtung technischer Prozesse ist auf unterschiedlichen Ebenen möglich. Diese Ebenen reichen von der allgemeinen Ebene dem Verfolgen der wesentlichen

Stoff- und Energieströme bis hin zum Überwachen spezieller Details innerhalb einzelner Prozesseinheiten. Jede Ebene erfordert eine bestimmte Anzahl und Auswahl von Messstellen, um eine eindeutige Verfolgung der Prozessabläufe zu gewährleisten. Die nachfolgenden Ausführungen sind ausschließlich der allgemeinen Betrachtungsebene gewidmet.

Aus allgemeiner Sicht involvieren Systeme stofflich und energetisch (auch ökonomisch) verflochtene Elemente. Die Struktur der Kausalitäten sämtlicher zustandsbeschreibenden Größen eines Systems kann äußerst kompliziert sein. Daher ist eine Differenzierung in primäre und sekundäre Kausalitäten geboten. Primäre Kausalitäten basieren auf makroskopischen Bilanzen der Elemente innerhalb des Systems. Bilanziert wird bezüglich der Erhaltung von Masse, Stoff, Energie und Impuls. Sekundäre Kausalitäten sind u.a. Transportphänomene des Stoff- und Wärmeübergangs. Diese unterliegen zwar ebenfalls den Erhaltungssätzen, werden aber nachrangig betrachtet. - Hinweis: Die Unterscheidung zwischen System und Element ist relativ und hängt entscheidend von der gewählten Abstraktionsebene ab.

1 Mathematische Beschreibung von makroskopischen Systemeigenschaften

Die makroskopische Modellierung von Systemen mit energetisch und stofflich verflochtenen Elementen erfolgt durch Bilanzgleichungen. Die Bilanzierung umfasst die Elemente des Systems oder die Stoff- bzw. Energieströme. Für ein System mit z Zustandsgrößen existieren g linear unabhängige Bilanzgleichungen in Form eines unterbestimmten Gleichungssystems. Allgemein gilt $g < z$, d.h. das System weist den Freiheitsgrad $f = z - g$ auf. Dies bedeutet, f Zustandsgrößen sind frei wählbar und g Zustandsgrößen sind eindeutig bestimmbar.

In allgemeiner Matrix-Schreibweise gilt für ein System im stationären Zustand: Das Produkt aus Bilanzmatrix $\underline{\underline{\mathbf{B}}}$ und Zustandsvektor $\underline{\mathbf{Z}}$ ist gleich dem Nullvektor $\underline{\mathbf{0}}$.

$$\underline{\underline{\mathbf{B}}} \cdot \underline{\mathbf{Z}} = \underline{\mathbf{0}} \tag{1}$$

Offenbar bestehen zwischen den bilanzierten Zustandsgrößen des Systems lineare Abhängigkeiten, welche ein unterbestimmtes Gleichungssystem 1 abbildet. Da f Zustandsgrößen frei wählbar sind und g Zustandsgrößen von den freien Größen abhängen besteht die Menge der systembeschreibenden Zustandsgrößen $\underline{\mathbf{Z}}$ aus einer Teilmenge der freien Zustandsgrößen $\underline{\mathbf{Z}}^f$ und einer Teilmenge der abhängigen Zustandsgrößen $\underline{\mathbf{Z}}^a$. Die Bilanzmatrix $\underline{\underline{\mathbf{B}}}$ erfährt eine diesen Teilmengen entsprechende Zerlegung in die Einheitsmatrix $\underline{\underline{\mathbf{E}}}$ und die Abhängigkeitsmatrix $\underline{\underline{\mathbf{D}}}$. Die Bilanzgleichungen nehmen folgende Form an

$$\underline{\underline{\mathbf{E}}} \cdot \underline{\mathbf{Z}}^a - \underline{\underline{\mathbf{D}}} \cdot \underline{\mathbf{Z}}^f = \underline{\mathbf{0}} \tag{2}$$

Die Zerlegung der Bilanzmatrix erfordert i.a. das Gauß-Jordan-Verfahren. An den nachfolgenden Beispielen wird gezeigt, dass durch geschickte Wahl freier und abhängiger Größen auf dieses Verfahren häufig verzichtet werden kann. Die abhängigen Zustandsgrößen $\underline{\mathbf{Z}}^a$ sind über die Abhängigkeitsmatrix $\underline{\underline{\mathbf{D}}}$ als Funktion der freien Zustandsgrößen $\underline{\mathbf{Z}}^f$ darstellbar.

$$\underline{\mathbf{Z}}^a = \underline{\underline{\mathbf{D}}} \cdot \underline{\mathbf{Z}}^f \tag{3}$$

Für eine abstrakte und damit kompakte Darstellung ist es günstig die Schreibweise mit der Funktionsmatrix $\underline{\underline{\mathbf{F}}}$ zu verwenden. Es gilt

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \underline{\mathbf{Z}}^f \\ \underline{\mathbf{Z}}^a \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \underline{\underline{\mathbf{E}}} \\ \underline{\underline{\mathbf{D}}} \end{bmatrix} \underline{\mathbf{Z}}^f \\ \underline{\mathbf{Z}} &= \underline{\underline{\mathbf{F}}} \quad \underline{\mathbf{Z}}^f \end{aligned} \tag{4}$$

Gleichung 4 stellt die Abhängigkeiten sämtlicher primären systembeschreibenden Zustandsgrößen als Funktion der freien Zustandsgrößen explizit dar. Diese Gleichung ist Grundlage der Validierung, dem Ziel gemessene Daten auszugleichen und Widersprüche zwischen ihnen zu beseitigen.

2 Validierung mittels Methode der Fehlerquadrate

Die Methode der Fehlerquadrate minimiert die Quadratsumme der Differenzen zwischen gemessenen und berechneten Größen. Jeder Messwert sollte Mittelwert mehrerer Einzelmessungen sein. Für jede Extremwertaufgabe sind zur Einstellung des Extremums Entscheidungsvariablen erforderlich. Im vorliegenden Fall sind dies die freien Zustandsgrößen $\underline{\mathbf{Z}}^f$. Diese sind derart zu bestimmen, dass die Quadratsumme der Differenzen Q und ein Minimum aufweist. Durch den funktionalen Zusammenhang zwischen freien und abhängigen Größen sind Erhaltungssätze für Masse, Energie usw. permanent erfüllt (4).

Die Abweichungen zwischen gemessenen Bilanzgrößen des Vektors $\underline{\hat{\mathbf{Z}}}$ und berechneten Bilanzgrößen des Vektors $\underline{\mathbf{Z}}$ bilden den Differenzvektor $\underline{\boldsymbol{\Delta}}$. Unter Einbeziehung von Gleichung 4 gilt:

$$\underline{\boldsymbol{\Delta}} = \underline{\hat{\mathbf{Z}}} - \underline{\mathbf{Z}} = \underline{\hat{\mathbf{Z}}} - \underline{\underline{\mathbf{F}}} \cdot \underline{\mathbf{Z}}^f \tag{5}$$

Die Quadratsumme der Differenzen Q hängt nur von den freien Bilanzgrößen $\underline{\mathbf{Z}}^f$ ab. Diese sind derart zu bestimmen, dass ein Minimum der Quadratsumme Q vorliegt.

$$Q = \sum \Delta_i^2 = \underline{\boldsymbol{\Delta}}^T \underline{\boldsymbol{\Delta}} = \left(\underline{\hat{\mathbf{Z}}} - \underline{\underline{\mathbf{F}}} \cdot \underline{\mathbf{Z}}^f\right)^T \left(\underline{\hat{\mathbf{Z}}} - \underline{\underline{\mathbf{F}}} \cdot \underline{\mathbf{Z}}^f\right) \Rightarrow Min! \tag{6}$$

Zur Bestimmung eines Extremwertes sind partiellen Ableitungen A_i der Funktion Q bezüglich sämtlicher freien Variablen Z_i zu bilden und gleich Null zu setzen.

$$A_i = \frac{dQ}{dZ_i} = 0 \tag{7}$$

Die partiellen Ableitungen A_i bilden die Elemente des Ableitungsvektors $\underline{\mathbf{A}}$. In Analogie zur linearen Regression gilt folgende Matrizengleichung

$$\underline{\mathbf{A}} = 2\, \underline{\underline{\mathbf{F}}}^T \underline{\underline{\mathbf{F}}}\ \underline{\bar{\mathbf{Z}}}^f_{opt} - 2\, \underline{\underline{\mathbf{F}}}^T\, \underline{\hat{\mathbf{Z}}} = \underline{\mathbf{0}} \tag{8}$$

Der optimale Vektor der freien Variablen $\underline{\bar{\mathbf{Z}}}^f_{opt}$ wird durch Umstellung explizit erhalten. Er repräsentiert gemäß Gleichung 6 das Minimum der Quadratsumme Q aus.

$$\underline{\bar{\mathbf{Z}}}^f \;=\; \left(\underline{\underline{\mathbf{F}}}^T \underline{\underline{\mathbf{F}}}\right)^{-1} \underline{\underline{\mathbf{F}}}^T \; \underline{\hat{\mathbf{Z}}} \tag{9}$$

Gemäß Gleichungen 4 und 9 folgt die Ermittlung der validierten Zustandsgrößen $\underline{\bar{\mathbf{Z}}}$ als Funktion der gemessenen Zustandsgrößen $\underline{\hat{\mathbf{Z}}}$ in geschlossener Form durch Multiplikation mit der Validierungsmatrix $\underline{\underline{\mathbf{V}}}$. Es gilt

$$\underline{\bar{\mathbf{Z}}} \;=\; \underline{\underline{\mathbf{F}}} \; \left(\underline{\underline{\mathbf{F}}}^T \underline{\underline{\mathbf{F}}}\right)^{-1} \underline{\underline{\mathbf{F}}}^T \; \underline{\hat{\mathbf{Z}}} \;=\; \underline{\underline{\mathbf{V}}} \; \underline{\hat{\mathbf{Z}}} \tag{10}$$

Beachtenswert ist die Konstanz der Validierungsmatrix $\underline{\underline{\mathbf{V}}}$. Diese hängt nur von der Funktionsmatrix $\underline{\underline{\mathbf{F}}}$ d.h. von den Struktureigenschaften des Systems ab. Die ausgeglichenen Zustandsgrößen $\underline{\bar{\mathbf{Z}}}$ erfüllen sämtliche Erhaltungssätze. Für die minimierten Ausgleichbeträge $\underline{\Delta \mathbf{Z}}$ gilt

$$\underline{\Delta \mathbf{Z}} \;=\; \underline{\bar{\mathbf{Z}}} - \underline{\hat{\mathbf{Z}}} \tag{11}$$

Die Ausgleichsbeträge des Vektors $\underline{\Delta \mathbf{Z}}$ sind, neben anderen Kriterien, ein geeignetes Maß für die Güte des erfolgten Ausgleichs. Liegen die Ausgleichsbeträge des Vektors $\underline{\boldsymbol{\Delta} \mathbf{Z}}$ innerhalb plausibler Grenzen kann die Validierung als sinnvoll angenommen werden. Je nach Anwendungsfall können weitere spezifische Gütektriterien wie z.B. die relativen Abweichungen oder die Varianz der Abweichungen sinnvoll sein.

3 Validierung mit relativer Wichtung der Meßwerte

Das Vertrauen in gemessene Daten ist aufgrund variierender Anzahl von Messungen zur Mittelwertbildung, verschiedener Messprinzipien und Genauigkeit der Messinstrumente höchst unterschiedlich. Abhängig vom relativen Fehler ist für jede Messeinrichtung ein individueller Wichtungsfaktor ermittelbar. Wichtungsfaktoren lassen sich beispielsweise als Verhältnis des durchschnittlichen relativen Fehlers sämtlicher Messeinrichtungen zum jeweiligen relativen Fehler der Messeinrichtung bestimmen. Die Wichtungsfaktoren W_i bilden die Elemente einer Diagonalmatrix, der Wichtungsmatrix $\underline{\underline{\mathbf{W}}}$. Mit den Wichtungsfaktoren sind auch systematische Fehler korrigierbar. Der modifizierte Ansatz für die Quadratsumme der Differenzen

$$Q \;=\; \underline{\boldsymbol{\Delta}}^T \underline{\boldsymbol{\Delta}} \;=\; \left(\underline{\hat{\mathbf{Z}}} - \underline{\underline{\mathbf{F}}} \cdot \underline{\mathbf{Z}}^f\right)^T \underline{\underline{\mathbf{W}}} \left(\underline{\hat{\mathbf{Z}}} - \underline{\underline{\mathbf{F}}} \cdot \underline{\mathbf{Z}}^f\right) \;=>\; Min! \tag{12}$$

Nach Ausmultiplizieren, Ableiten und Umstellung folgt die gewichtete Validierungsfunktion mit der Validierungsmatrix $\underline{\underline{\mathbf{V}}}^w$

$$\underline{\bar{\mathbf{Z}}}^w \;=\; \underline{\underline{\mathbf{F}}} \; \left(\underline{\underline{\mathbf{F}}}^T \underline{\underline{\mathbf{W}}} \; \underline{\underline{\mathbf{F}}}\right)^{-1} \underline{\underline{\mathbf{F}}}^T \underline{\underline{\mathbf{W}}} \; \underline{\hat{\mathbf{Z}}} \;=\; \underline{\underline{\mathbf{V}}}^w \; \underline{\hat{\mathbf{Z}}} \tag{13}$$

Die Validierungsmatrix $\underline{\underline{\mathbf{V}}}^w$ ist ebenfalls eine Systemkonstante. Sie hängt nur von den Struktureigenschaften des Systems ab.

4 Validierung mit unvollständigen Messdaten

Im bisherigen Kontext gilt die Voraussetzung, dass die Anzahl der betrachteten Zustandsgrößen z mit der Zahl der Messstellen m übereinstimmt. Dies ist oftmals nicht der Fall. Liegen für zustandsbeschreibende Größen keine Messwerte vor, die Eindeutigkeit der Bilanzierung diese Größen aber zwingend erfordert, sind diese Größen nur durch Schätzung bestimmbar. Die geschätzten Größen sind konstante freie Zustandsgrößen, welche nicht als Entscheidungsgröße für den Datenabgleich zur Verfügung stehen. Mit $s = z - m$ geschätzten Zustandsgrößen verringert sich die Dimension der Optimierung der Fehlerquadratsumme um die Zahl s. Die Qualität des Datenausgleichs wird reduziert! Aus Gleichung 2 folgt

$$\underline{\underline{\mathbf{E}}} \cdot \underline{\mathbf{Z}}^a - \underline{\underline{\mathbf{D}}} \cdot \underline{\mathbf{Z}}^f - \underline{\underline{\mathbf{D}}}^s \cdot \underline{\mathbf{Z}}^s = \underline{\mathbf{0}} \tag{14}$$

Diese Zerlegung erfordert u.U. die Anwendung des Gaus-Jordan-Verfahrens. Die geschätzten Größen $\underline{\mathbf{Z}}^s$ sind mit der entsprechenden Teilmatrix $\underline{\underline{\mathbf{D}}}^s$ im Vektor $\underline{\mathbf{C}}$ zusammengefasst. Es gilt

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \underline{\mathbf{Z}}^f \\ \underline{\mathbf{Z}}^a \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \underline{\underline{\mathbf{E}}} \\ \underline{\underline{\mathbf{D}}} \end{bmatrix} \underline{\mathbf{Z}}^f + \begin{bmatrix} \underline{\mathbf{0}} \\ \underline{\underline{\mathbf{D}}}^s \end{bmatrix} \underline{\mathbf{Z}}^s \\ \underline{\mathbf{Z}} &= \underline{\underline{\mathbf{F}}} \quad \underline{\mathbf{Z}}^f + \quad \underline{\mathbf{C}} \end{aligned} \tag{15}$$

Der modifizierte Ansatz mit der Fehlerquadratsumme lautet nun

$$Q = \underline{\boldsymbol{\Delta}}^T \underline{\boldsymbol{\Delta}} = \left(\hat{\underline{\mathbf{Z}}} - \underline{\mathbf{C}} - \underline{\underline{\mathbf{F}}} \cdot \underline{\mathbf{Z}}^f\right)^T \left(\hat{\underline{\mathbf{Z}}} - \underline{\mathbf{C}} - \underline{\underline{\mathbf{F}}} \cdot \underline{\mathbf{Z}}^f\right) => Min! \tag{16}$$

Mit analoger Vorgehensweise gemäß den Gleichungen 7 bis 9 wird die Lösung erhalten

$$\bar{\underline{\mathbf{Z}}}^s = \underline{\underline{\mathbf{F}}} \left(\underline{\underline{\mathbf{F}}}^T \underline{\underline{\mathbf{F}}}\right)^{-1} \underline{\underline{\mathbf{F}}}^T \left(\hat{\underline{\mathbf{Z}}} - \underline{\mathbf{C}}\right) + \underline{\mathbf{C}} = \underline{\underline{\mathbf{V}}} \left(\hat{\underline{\mathbf{Z}}} - \underline{\mathbf{C}}\right) + \underline{\mathbf{C}} \tag{17}$$

Bei der Validierung wirken g linear unabhängige Bilanzgleichungen, welche die eindeutige Bestimmung von g abhängigen Zustandsgrößen gestatten. Werden von restlichen $z - g$ Zustandsgrößen s Größen durch Schätzung bestimmt, stehen nur noch $f = z - g - s$ freie Zustandsgrößen für Anpassung zur Verfügung. Ist die Anzahl freier Zustandsgrößen gleich Null ($f = 0$), ist keine Validierung möglich, da g abhängige Größen bereits ohne Validierung eindeutig berechenbar sind. Ist die Zahl der Schätzungen s derart groß, dass $f = z - g - s < 0$ gilt, verfügt das System über zu wenig Messstellen, ist nicht eindeutig beobachtbar und damit auch nicht validierbar.

5 Beispiele zur Validierung

Nachfolgend wird die vorgestellte Methode zur Validierung von gemessenen Daten ausführlich an zwei Beispielen demonstriert. Die Berechnungen benötigen keine spezielle Software, sondern sind mit Standardsoftware wie EXCEL, MathCad oder Scientific Workplace sehr effektiv durchführbar.

5.1 Validierung von Messungen der Verbrennung eines lösungsmittelbeladenen Abluftstroms

Lösungsmittelbeladene Abluft einer Abfüllanlage für organische Lösungsmittel wird dem Brenner einer thermischen Energieanlage als Verbrennungsluft zugeführt. Das Brenngas besteht aus 80% Methan und 20% Kohlenmonoxid. Zur Durchführung einer Prozessanalyse liegen Messungen zur Bestimmung der Stoffströme (Molströme) vor. Aufgrund von Messungenauigkeiten sind die Stoffbilanzen nicht konsistent. Das Schema der Verbrennung

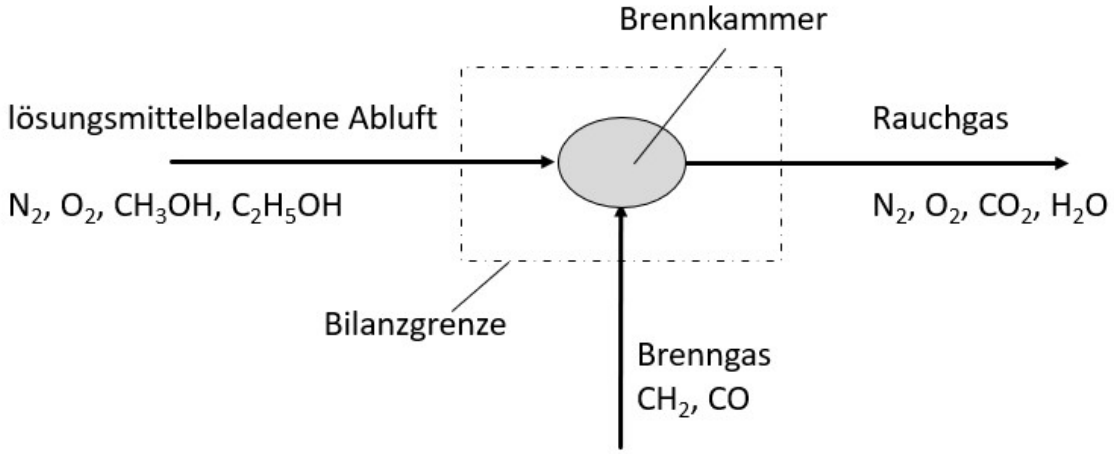

Abbildung 1: Prozess der Abluftverbrennung

Der Verbrennungsprozess ist mit vier Bruttoreaktionen beschreibbar. Für die Zusammensetzung der Verbrennungsluft existiert eine formale Reaktionsgleichung. Abbildung 2 zeigt die Reaktiongleichungen mit ganzzahligen stöchiometrischen Koeffizienten.

$$\begin{array}{rcrcrcr} 2\,CO & + & O_2 & \rightarrow & 2\,CO_2 & & \\ CH_4 & + & 2\,O_2 & \rightarrow & CO_2 & + & 2\,H_2O \\ 2\,CH_3OH & + & 3\,O_2 & \rightarrow & 2\,CO_2 & + & 4\,H_2O \\ C_2H_5OH & + & 3\,O_2 & \rightarrow & 2\,CO_2 & + & 3\,H_2O \\ & & 5\,Lu & \rightarrow & O_2 & + & 4\,N_2 \end{array} \tag{18}$$

Abbildung 2: Bruttoreaktionen der Verbrennung

Für die mathematische Modellierung erfordert jede Reaktionsgleichung eine Schlüsselkomponente, deren stöchiometrischer Koeffizient gleich Eins ist. Dadurch liegen andere stöchiometrischen Koeffizienten u.U. als gebrochene Zahlen vor. Die Schlüsselkomponenten Kohlenmonoxid CO, Methan CH_4, Methanol CH_3OH, Ethanol C_2H_5OH und Luft Lu befinden sich an erster Position der Reaktionsgleichungen (Abbildung 3).

$$
\begin{array}{rcrcrcl}
CO & + & \frac{1}{2}O_2 & \rightarrow & CO_2 & & \\
CH_4 & + & 2\ O_2 & \rightarrow & CO_2 & + & 2\ H_2O \\
CH_3OH & + & \frac{3}{2}O_2 & \rightarrow & CO_2 & + & 2\ H_2O \\
C_2H_5OH & + & 3\ O_2 & \rightarrow & 2\ CO_2 & + & 3\ H_2O \\
Lu & & \rightarrow & & \frac{1}{5}O_2 & + & \frac{4}{2}N_2
\end{array}
\tag{19}
$$

Abbildung 3: Modifizierte stöchiometrische Koeffizienten der Bruttoreaktionen

Anschaulicher Zwischenschritt für die Formulierung des beschreibenden Gleichungssystems ist das Reaktionsschema inform eines Netzwerkes. Die konvektiven Molströme $\dot{n}_i$ der reagierenden Komponenten sind Knoten mit Quellen und Senken (waagerechte Linien). Die umgesetzen Stoffströme $\Delta\dot{n}$ sind die Verbindungen zwischen den Knoten (senkrechte Linien).

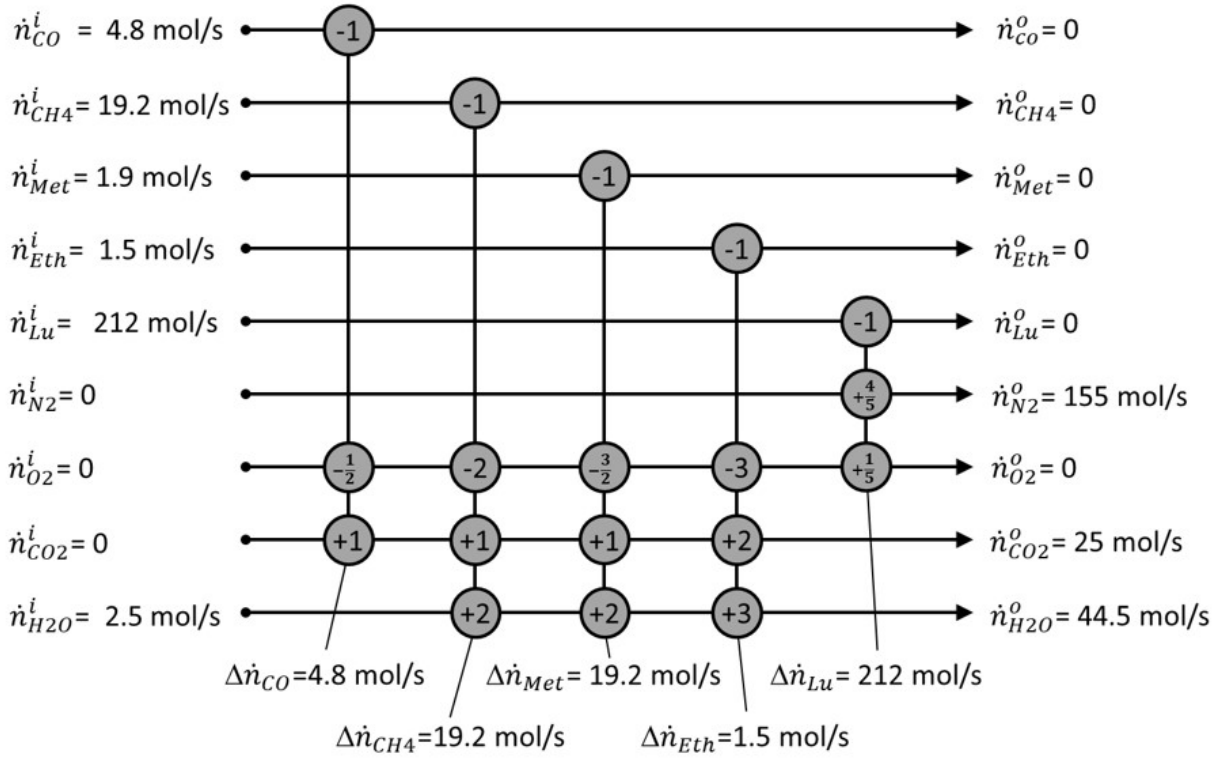

Abbildung 4: Reaktionsschema der Verbrennung in Netzwerkdarstellung

Die Änderungen der Stoffströme gemäß einer Reaktionsgleichung sind proportional zum Umsatz der Schlüsselkomponente. Die stöchiometrischen Koeffizienten der modifizierten Reaktionsgleichungen wirken als Proportionalitätsfaktoren.

Die fünf Reaktionsgleichungen der Verbrennung involvieren neun chemische Verbindungen, welche aus den vier Elementen Kohlenstoff, Wasserstoff, Sauerstoff und Stickstoff bestehen. Für die Elemente existieren vier unabhängige Stoffbilanzen. Eine chemische Verbindung ist aus mathematischer Sicht als lineare Kombiation"der Elemente auffassbar. Von den neun Bilanzen der Verbindungen sind somit vier Bilanzen linear unabhängig, mit denen vier Stoffströme eindeutig berechenbar sind. Es ist sinnvoll die fünf Schlüsselkomponenten

als freie Zustandsgrößen zu wählen und die restlichen vier Zustandgrößen als abhängige Größen mit ihrer jeweiligen Bilanzgleichung zu bestimmen. Die Funktionsmatrix $\underline{\underline{\mathbf{F}}}$ enthält die negativen stöchiometrischen Koeffizienten aus Abbildung 4. Entsprechend gilt für Gleichung 4

$$\begin{bmatrix} \Delta\dot{n}_{CO} \\ \Delta\dot{n}_{CH_4} \\ \Delta\dot{n}_{Met} \\ \Delta\dot{n}_{Eth} \\ \Delta\dot{n}_{Lu} \\ \Delta\dot{n}_{N_2} \\ \Delta\dot{n}_{O_2} \\ \Delta\dot{n}_{CO_2} \\ \Delta\dot{n}_{H_2O} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{4}{5} \\ \frac{1}{2} & 2 & \frac{3}{2} & 3 & -\frac{1}{5} \\ -1 & -1 & -1 & -2 & 0 \\ 0 & -2 & -2 & -3 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta\dot{n}_{CO} \\ \Delta\dot{n}_{CH_4} \\ \Delta\dot{n}_{Met} \\ \Delta\dot{n}_{Eth} \\ \Delta\dot{n}_{Lu} \end{bmatrix} \tag{20}$$

$$\underline{\mathbf{Z}} = \underline{\underline{\mathbf{F}}} \quad \underline{\mathbf{Z}}^f$$

Die Bilanzmatrix $\underline{\underline{\mathbf{B}}}$ enthält im linken Teil die stöchiometrischen Koeffizienten der Bilanzgleichungen für die abhängigen Zustandsgrößen und im rechten Teil die Einheitsmatrix. Aufgrund von Messungenauigkeiten sind die Bilanzen gemäß 1 fehlerbehaftet.

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{4}{5} & 1 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2} & -2 & -\frac{3}{2} & -3 & \frac{1}{5} & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 2 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 2 & 2 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta\dot{n}_{CO} \\ \Delta\dot{n}_{CH_4} \\ \Delta\dot{n}_{Met} \\ \Delta\dot{n}_{Eth} \\ \Delta\dot{n}_{Lu} \\ \Delta\dot{n}_{N_2} \\ \Delta\dot{n}_{O_2} \\ \Delta\dot{n}_{CO_2} \\ \Delta\dot{n}_{H_2O} \end{bmatrix} \neq \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{21}$$

$$\underline{\underline{\mathbf{B}}} \quad \hat{\underline{\mathbf{Z}}} \neq \underline{\mathbf{0}}$$

Mit den Werten aus Abbildung 4 ergeben sich die Bilanzfehler.

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{4}{5} & 1 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2} & -2 & -\frac{3}{2} & -3 & \frac{1}{5} & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 2 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 2 & 2 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4.80 \\ 19.20 \\ 1.90 \\ 1.50 \\ 212.00 \\ -155.00 \\ 0.00 \\ -25.00 \\ -42.00 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 14.60 \\ -5.75 \\ 3.90 \\ 4.70 \end{bmatrix} \tag{22}$$

Mit der Funtionsmatrix $\underline{\underline{\mathbf{F}}}$ folgt gemäß Gleichung 10 die Validierungsmatrix $\underline{\underline{\mathbf{V}}}$, welche in Gleichung 11 verwendet wird.

$$\underline{\underline{\mathbf{V}}} = \frac{1}{3242}\begin{bmatrix} 1912 & 125 & 166 & -457 & 10 & -8 & 82 & -1289 & 789 \\ 125 & 2371 & -625 & -1121 & 60 & -48 & 492 & 371 & -129 \\ 166 & -625 & 2412 & -957 & -50 & 40 & -410 & -39 & -703 \\ -457 & -1121 & -957 & 1414 & 40 & -32 & 328 & -293 & -86 \\ 10 & 60 & -50 & 40 & 1950 & -1560 & -220 & -100 & -140 \\ -8 & -48 & 40 & -32 & -1560 & 1248 & 176 & 80 & 112 \\ 82 & 492 & -410 & 328 & -220 & 176 & 1438 & -820 & -1148 \\ -1289 & 371 & -39 & -293 & -100 & 80 & -820 & 1543 & 215 \\ 789 & -129 & -703 & -86 & -140 & 112 & -1148 & 215 & 1922 \end{bmatrix} \tag{23}$$

Gleichung 10 liefert durch Multiplikation der Validierungsmatrix $\underline{\underline{\mathbf{V}}}$ mit dem Vektor der gemessenen Zustandsgrößen $\underline{\hat{\mathbf{Z}}}$ folgen ausgeglichenen Zustandsgrößen $\underline{\bar{\mathbf{Z}}}$. Die minimalen Ausgleichsbeträge $\underline{\mathbf{\Delta Z}}$ ermöglichen den Bilanzausgleich.

$$\begin{bmatrix} \Delta Z_1 \\ \Delta Z_2 \\ \Delta Z_3 \\ \Delta Z_4 \\ \Delta_{Z5} \\ \Delta Z_6 \\ \Delta Z_7 \\ \Delta Z_8 \\ \Delta Z_9 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4.21 \\ 18.37 \\ 1.74 \\ 0.30 \\ 205.04 \\ 1.34 \\ -164.03 \\ -24.92 \\ -41.11 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 4.80 \\ 19.20 \\ 1.90 \\ 1.50 \\ 212.00 \\ 0.00 \\ -155.00 \\ -25.00 \\ -42.00 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0.59 \\ -0.83 \\ -0.16 \\ -1.20 \\ -6.96 \\ 1.34 \\ -9.03 \\ 0.08 \\ 0.89 \end{bmatrix} \tag{24}$$

$$\underline{\mathbf{\Delta Z}} = \underline{\bar{\mathbf{Z}}} - \underline{\hat{\mathbf{Z}}}$$

Die Bilanzgleichungen 1 sind mit dem ausgeglichen Zustandsvektor $\underline{\bar{\mathbf{Z}}}$ sämtlich erfüllt!

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{4}{5} & 1 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2} & -2 & -\frac{3}{2} & -3 & \frac{1}{5} & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 2 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 2 & 2 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4.21 \\ 18.37 \\ 1.74 \\ 0.30 \\ 205.04 \\ -164.03 \\ 1.341 \\ -24.92 \\ -41.12 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{25}$$

$$\underline{\underline{\mathbf{B}}} \qquad \underline{\bar{\mathbf{Z}}} \neq \underline{\mathbf{0}}$$

Zur Beurteilung der Validierungsgüte sollte grundsätzlich nach technologiespezifischen Kriterien erfolgen.

5.2 Analyse einer Wärmerückgewinnungsschaltung durch Messung von Temperaturen

In der Abbildung 5 ist das Schema einer Rekuperatorschaltung zur Wärmerückgewinnung dargestellt. Die fünf Rekuperatoren sind Teil einer größeren Anlage für chemische Produkte und nutzen die Abwärme von zwei Produktstömen zur Vorwärmung von zwei Eduktströmen.

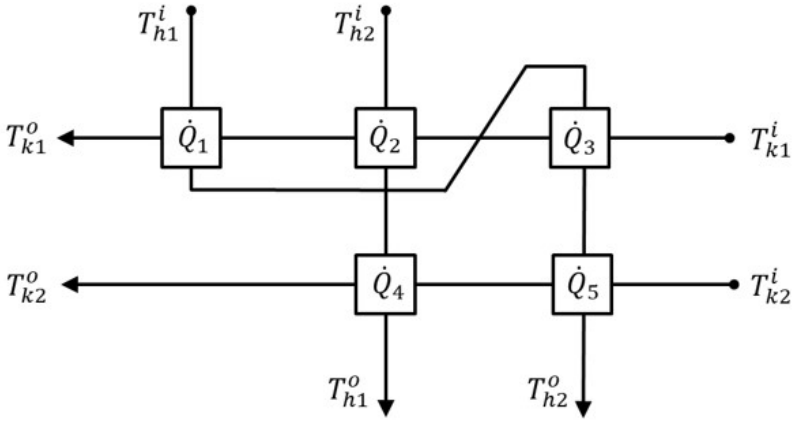

Abbildung 5: Rekuperatorschaltung

Die Effizienz der Schaltung wird durch Temperaturmessung an Ein- und Ausgängen der Apparate untersucht. Die mehrfach gemessenen Temperaturen der einzelnen Messstellen sind durch arithmetische Mittelwertbildung zusammengefasst und in Abbildung 6 ausgewiesen. Temperaturen sind keine Bilanzgrößen und somit sekundäre Zustandsgrößen. Primäre Zustandsgrößen sind ausschließlich extensive Bilanzgrößen, wie die Enthalpie- und Wärmeströme der Apparateschaltung. Diese basieren auf den gemessenen Temperaturen und vertrauenswürdigen Stoffdatenbeziehungen. Die ermittelten Zustandsgrößen sind ebenfalls im Energieflußschema gemäß Abbildung 6 ausgewiesen.

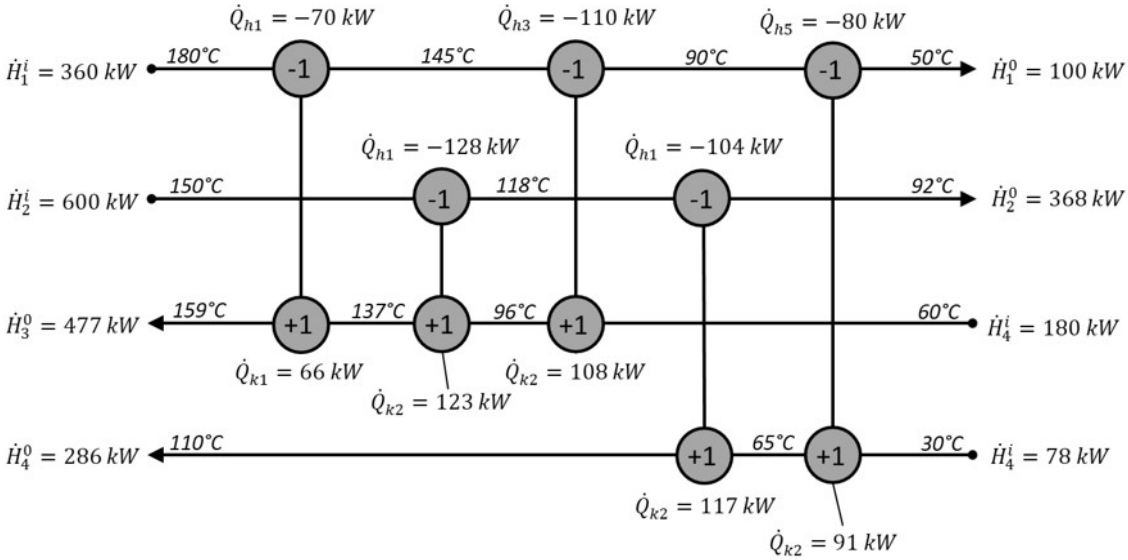

Abbildung 6: Energieflußschema mit den gemittelten Messdaten

Die Differenzen der Enthalpie- und Wärmeströme stehen bedingt durch Messfehler im Widerspruch zum Energieerhaltungsatz. Damit sind die Bilanzen der Rekuperatoren sowie die Gesamtbilanz der Schaltung ohne Validierung nicht für eine Analyse geeignet.

Der 1. Hauptsatz der Thermodynamik ist Grundlage für die Bilanz eines Rekuperators. Die übertragene Wärme $\dot{Q}$ des Rekuperators ist gleich der Enthalpieänderung des Mediums $\Delta\dot{H}$. Gemäß Energieflußplan sind die Energiebilanzen der Rekuperatoren unausgeglichen. Deshalb ist die Unterscheidung zwischen abgegebenem Wärmestrom $\dot{Q}_{hi}$ und aufgenommenem Wärmestrom $\dot{Q}_{ki}$ erforderlich. Für die ausgeglichene Energiebilanz eines Rekuperators gilt.

$$\dot{Q}_{hi} + \dot{Q}_{ki} \quad = \quad 0 \tag{26}$$

Der Energiebilanz der Prozessströme liegt ebenfalls der 1. Hauptsatz der Thermodynamik zugrunde. Die gesamte Enthalpieänderung eines Prozeßstroms $\Delta\dot{H}$ ist die Summe der durch die Rekuperatoren zu- bzw. abgeführten Wärmeströme

$$\Delta\dot{H} \quad = \quad \sum \dot{Q}_i \tag{27}$$

Für die Rekuperatoren und die Prozessströme gilt die Matrix-Bilanzgleichung 28. Die oberen fünf Zeilen der Bilanzmatrix $\underline{\underline{\mathbf{B}}}$ beschreiben die Bilanzen der Rekuperatoren. Die unteren vier Zeilen beschreiben mit den Koeffizienten der Kopplungen die Bilanzen der Prozessströme (siehe Abbildung 6). Der rechte Teil der Matrix $\underline{\underline{\mathbf{B}}}$ stellt eine Einheitsmatrix dar und steht mit den Spalten für die jeweilige abhängige Zustandsgröße (vergl. Gleichung 2). Der linke Teil der Matrix $\underline{\underline{\mathbf{B}}}$ ist die negative Abhängigkeitsmatrix $\underline{\underline{\mathbf{D}}}$. Aufgrund von Messungenauigkeiten ist die Bilanz nicht ausgeglichen (Gleichung 1).

$$\begin{bmatrix}
1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
-1 & 0 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\
0 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\
1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
\dot{Q}_{k1} \\ \dot{Q}_{k2} \\ \dot{Q}_{k3} \\ \dot{Q}_{k4} \\ \dot{Q}_{k5} \\ \dot{Q}_{h1} \\ \dot{Q}_{h2} \\ \dot{Q}_{h3} \\ \dot{Q}_{h4} \\ \dot{Q}_{h5} \\ \Delta\dot{H}_{h1} \\ \Delta\dot{H}_{h2} \\ \Delta\dot{H}_{k1} \\ \Delta\dot{H}_{k2}
\end{bmatrix}
\neq
\begin{bmatrix}
0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0
\end{bmatrix} \tag{28}$$

$$\underline{\underline{\mathbf{B}}} \qquad\qquad \underline{\hat{\mathbf{Z}}} \quad \neq \quad \underline{\mathbf{0}}$$

Mit den Werten für Enthalpiedifferenzen und Wärmeströme gemäß Abbildung 6 folgen die Zahlenwerte der Bilanzfehler.

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 66.0 \\ 123.0 \\ 108.0 \\ 117.0 \\ 91.0 \\ -70.0 \\ -128.0 \\ -110.0 \\ -104.0 \\ -80.0 \\ 260.0 \\ 232.0 \\ -297.0 \\ -208.0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -4.0 \\ -5.0 \\ -2.0 \\ 13.0 \\ 11.0 \\ -5.0 \\ -8.0 \\ 0.0 \\ 0.0 \end{bmatrix} \tag{29}$$

Der untere Teil der Funktionsmatrix $\underline{\underline{\mathbf{F}}}$ enthät die Abhängigkeitsmatrix $\underline{\underline{\mathbf{D}}}$, der obere Teil die Einheitsmatrix $\underline{\underline{\mathbf{E}}}$.

$$\begin{bmatrix} \dot{Q}_{k1} \\ \dot{Q}_{k2} \\ \dot{Q}_{k3} \\ \dot{Q}_{k4} \\ \dot{Q}_{k5} \\ \dot{Q}_{h1} \\ \dot{Q}_{h2} \\ \dot{Q}_{h3} \\ \dot{Q}_{h4} \\ \dot{Q}_{h5} \\ \Delta\dot{H}_{h1} \\ \Delta\dot{H}_{h2} \\ \Delta\dot{H}_{k1} \\ \Delta\dot{H}_{k2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ -1 & -1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \dot{Q}_{k1} \\ \dot{Q}_{k2} \\ \dot{Q}_{k3} \\ \dot{Q}_{k4} \\ \dot{Q}_{k5} \end{bmatrix} \tag{30}$$

$$\underline{\mathbf{Z}} \quad = \quad \underline{\underline{\mathbf{F}}} \quad \underline{\mathbf{Z}}^f$$

Die Validierungsmatrix $\underline{\underline{\mathbf{V}}}$ entsteht gemäß Gleichung 10

$$136 \cdot \underline{\underline{\mathbf{V}}} =$$

$$\begin{bmatrix}
48 & -8 & -20 & 4 & -8 & -48 & 8 & 20 & -4 & 8 & 20 & -4 & -20 & 4 \\
-8 & 41 & -8 & -12 & 7 & 8 & -41 & 8 & 12 & -7 & -9 & 29 & -25 & 5 \\
-20 & -8 & 48 & 4 & -8 & 20 & 8 & -48 & -4 & 8 & 20 & -4 & -20 & 4 \\
4 & -12 & 4 & 40 & -12 & -4 & 12 & -4 & -40 & 12 & -4 & 28 & 4 & -28 \\
-8 & 7 & -8 & -12 & 41 & 8 & -7 & 8 & 12 & -41 & 25 & -5 & 9 & -29 \\
-48 & 8 & 20 & -4 & 8 & 48 & -8 & -20 & 4 & -8 & -20 & 4 & 20 & -4 \\
8 & -41 & 8 & 12 & -7 & -8 & 41 & -8 & -12 & 7 & 9 & -29 & 25 & -5 \\
20 & 8 & -48 & -4 & 8 & -20 & -8 & 48 & 4 & -8 & -20 & 4 & 20 & -4 \\
-4 & 12 & -4 & -40 & 12 & 4 & -12 & 4 & 40 & -12 & 4 & -28 & -4 & 28 \\
8 & -7 & 8 & 12 & -41 & -8 & 7 & -8 & -12 & 41 & -25 & 5 & -9 & 29 \\
20 & -9 & 20 & -4 & 25 & -20 & 9 & -20 & 4 & -25 & 65 & -13 & -31 & -21 \\
-4 & 29 & -4 & 28 & -5 & 4 & -29 & 4 & -28 & 5 & -13 & 57 & -21 & -23 \\
-20 & -25 & -20 & 4 & 9 & 20 & 25 & 20 & -4 & -9 & -31 & -21 & 65 & -13 \\
4 & 5 & 4 & -28 & -29 & -4 & -5 & -4 & 28 & 29 & -21 & -23 & -13 & 57
\end{bmatrix} \tag{31}$$

Die Validierung erfolgt durch Multiplikation der Validierungsmatrix $\underline{\underline{\mathbf{V}}}$ mit den messwertbasierten Bilanzgrößen des Systems. Gleichung **b6** zeigt die Gegenüberstellung von Urdaten $\hat{\underline{\mathbf{Z}}}$ und validierten Daten $\bar{\underline{\mathbf{Z}}}$.

$$\begin{bmatrix} \Delta Z_1 \\ \Delta Z_2 \\ \Delta Z_3 \\ \Delta Z_4 \\ \Delta Z_5 \\ \Delta Z_6 \\ \Delta Z_7 \\ \Delta Z_8 \\ \Delta Z_9 \\ \Delta Z_{10} \\ \Delta Z_{11} \\ \Delta Z_{12} \\ \Delta Z_{13} \\ \Delta Z_{14} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 66.6 \\ 123.4 \\ 107.6 \\ 112.4 \\ 88.1 \\ -66.6 \\ -123.4 \\ -107.6 \\ -112.4 \\ -88.1 \\ 262.3 \\ 235.8 \\ -297.6 \\ -200.5 \end{bmatrix} kW - \begin{bmatrix} 66.0 \\ 123.0 \\ 108.0 \\ 117.0 \\ 91.0 \\ -70.0 \\ -128.0 \\ -110.0 \\ -104.0 \\ -80.0 \\ 260.0 \\ 232.0 \\ -297.0 \\ -208.0 \end{bmatrix} kW = \begin{bmatrix} 0.6 \\ 0.4 \\ -0.4 \\ -4.6 \\ -2.9 \\ 3.4 \\ 4.6 \\ 2.4 \\ -8.4 \\ -8.1 \\ 2.3 \\ 3.8 \\ -0.6 \\ 7.5 \end{bmatrix} kW \tag{32}$$

$$\underline{\mathbf{\Delta Z}} = \bar{\underline{\mathbf{Z}}} - \hat{\underline{\mathbf{Z}}}$$

Liegen die Ausgleichsbeträge des Vektors $\underline{\mathbf{\Delta Z}}$ innerhalb plausibler technologischer Grenzen sind die Resultate der Validierung zu akzeptieren.

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 66.6 \\ 123.4 \\ 107.6 \\ 112.4 \\ 88.1 \\ -66.6 \\ -123.4 \\ -107.6 \\ -112.4 \\ -88.1 \\ 262.3 \\ 235.8 \\ -297.6 \\ -200.5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{33}$$

$$\underline{\underline{\mathbf{B}}} \qquad \underline{\bar{\mathbf{Z}}} \qquad = \qquad \underline{\mathbf{0}}$$

Der ausgeglichene Zustandsvektor $\underline{\bar{\mathbf{Z}}}$ erfüllt die Bilanzgleichung exakt.

6 Formelzeichen

6.1 Skalare

A	...	*Ableitung*	...	$kW,\ mol/s$
f	...	*Freiheitsgrad*	...	$-$
g	...	*Anzahl der Gleichungen*	...	$-$
$\dot{H}$	...	*Enthalpiestrom*	...	$kW,\ mol/s$
m	...	*Anzahl der Messstellen*	...	$-$
Q	...	*Summe der Fehlerquadrate*	...	$kW^2,\ mol^2/s^2$
$\dot{Q}$	...	*Wärmestrom*	...	$kW,\ mol/s$
s	...	*Anzahl geschätzter Grössen*	...	$-$
z	...	*Anzahl Zustandsvariablen*	...	$-$
$\Delta\dot{H}$	...	$Differenz - Enthalpiestrom$	...	$kW,\ mol/s$

6.2 Vektoren

$\underline{\mathbf{A}}$	...	*Vektor der Ableitungen*	...	$-$
$\underline{\mathbf{Z}}$	...	*Zustandsvektor*	...	$-$
$\underline{\mathbf{\Delta}}$	...	$Differenzvektor$	...	$-$
$\underline{\mathbf{0}}$	...	*Nullvektor*	...	$-$

6.3 Matrizen

$\underline{\underline{\mathbf{B}}}$	...	*Bilanzmatrix*	...	–
$\underline{\underline{\mathbf{D}}}$	...	*Abhängigkeitsmatrix*	...	–
$\underline{\underline{\mathbf{E}}}$	...	*Einheitsmatrix*	...	–
$\underline{\underline{\mathbf{F}}}$	...	*Funktionsmatrix*	...	–
$\underline{\underline{\mathbf{V}}}$	...	*Validierungsmatrix*	...	–
$\underline{\underline{\mathbf{W}}}$	...	*Wichtungsmatrix*	...	–
$\underline{\underline{\mathbf{0}}}$	...	*Nullmatrix*	...	–

6.4 Indizes

$\square^{a}$	...	*abhängig*
$\square^{b}$	...	*abhängig*
$\square^{f}$	...	*frei*
$\square^{s}$	...	*geschätzt*
$\square^{w}$	...	*gewichtet*
$\square_{h}$	...	*heiss*
$\square_{k}$	...	*kalt*
$\widehat{\square}$	...	*gemessen*
$\overline{\square}$	...	*ausgeglichen*

7 Literatur

[1] Brockmeier U.: "Validierung von Prozessdaten in Kraftwerken"
VGB Kraftwerkstechnik -GERMAN EDITION- ; 79 , 9 ; 61-66 ; 1999

[2] Laipple, B.: Önline-Validierung energietechnischer Prozesse unter Zulassung transienter Messdatenverläufe "; Promotion Universität Stuttgart 2003

[3] Schäfer, S.: "Dynamische Simulation zur thermodynamischen Analyse einer Wasserstofftankstelle"; Promotion Technische Universität München 2019

[4] Strelow, O.: „Die Allgemeine Theorie der technischen Netze”
Vorträge und Manuskripte

Technische Hochschule Mittelhessen
University of Applied Sciences

Wiesenstraße 14
D-35390 Gießen

www.thm.de