

Diss. ETH Nr. 6459

EIN INTEGRIERTES RECHNERGESTEUERTES SYSTEM  
ZUR DATENERFASSUNG, VERSUCHSPLANUNG UND  
-DURCHFUEHRUNG FUER DIE CHEMISCHE PROZESS-  
ENTWICKLUNG

A B H A N D L U N G

zu Erlangung des Titels eines  
Doktors der Technischen Wissenschaften  
der

EIDGENOESSISCHEN TECHNISCHEN HOCHSCHULE ZUERICH


vorgelegt von

SCHIFFERLI Christoph Cyrill  
Dipl. Chem.-Ing. ETH  
geboren am 3. Juli 1949  
von Dietikon/ZH und Döttingen/AG

Angenommen auf Antrag von

Prof. Dr. D.W.T. Rippin, Referent  
PD. Dr. M.L. Rose, Korreferent

1979



## Zusammenfassung

Die vorliegende Arbeit beschreibt Struktur und Anwendung eines rechnergesteuerten Systems zur Versuchsplanung in der chemischen Prozessentwicklung. Für einen Mini-computer wurde ein Programmpaket zur

- Datenerfassung und -auswertung
- statistischen, nichtlinearen Versuchsplanung
- Steuerung der Versuchsdurchführung

entwickelt.

Mithilfe dieser Programme und einer mit dem Rechner gekoppelten Labor Batchanlage wurden erhältliche Versuchsplanungsalgorithmen anhand einer Testreaktion praktisch untersucht. Die Planungskriterien erreichen die gestellten Ziele, vorausgesetzt, dass ein korrektes Modell des Prozesses vorhanden ist.

Da in der Prozessentwicklung eine der Hauptschwierigkeiten in der Herleitung eines genauen Modells liegt, wurde dem Verhalten dieser Methoden bei Verwendung von ungenauen Modellen besondere Aufmerksamkeit zuteil. Die geplanten Versuche tragen nicht unbedingt zur Erkennung von Modellunzulänglichkeiten bei.

Ein erweitertes Vorgehen vermochte im untersuchten Fall auch nicht alle Mängel der erhältlichen Methoden zu beheben.

Schliesslich wurde ein Planungsalgorithmus zu Prozessoptimierung, der die besonderen Gegebenheiten bei der Verwendung von ungenauen Modellen berücksichtigt, vorgeschlagen und praktisch angewandt. Die Methode vermag auch bei Verwendung von sehr unzulänglichen Modellen mit vertretbarem experimentellem Aufwand in die Nähe des gesuchten Optimums zu kommen, kann aber das Auffinden des globalen Optimums nicht garantieren. Die geplanten Versuche ermöglichen eine frühzeitige Erkennung von Modellunzulänglichkeiten.

Die Anwendung bestätigt die Durchführbarkeit einer integrierten Versuchsplanung auf einem Kleinrechner.

## Abstract

The present work describes the structure and implementation of an integrated computercontrolled experimental planning system for the development of chemical processes. A set of programs including

- data acquisition and processing
- statistical nonlinear experimental planning
- control of the planned experiments

has been implemented on a minicomputer. Using these programmes and a laboratory plant connected to the process computer available statistical experimental design procedures have been tested. The objectives are achieved, provided an accurate model of the process under investigation is available.

As one major difficulty in process development is the deduction of an adequate model, special emphasis is put on the behaviour of these algorithms when inaccurate models are used. The planned experiments do not necessarily contribute to the discovery of lack of fit of the model used.

An extended design algorithm did not, in the case investigated, overcome all of the disadvantages of the available methods.

Finally an algorithm for process optimization taking into account the special circumstances when inaccurate models are used is proposed and applied. The method is found to make good progress towards the optimum with reasonable experimental effort even in the presence of a poor model. It cannot, however, guarantee to find the global optimum. The planned experiments enable discovery of model inadequacies at an early stage of experimentation.

In general, the application proves the practicability of integrated experimental planning on a mini computer.